

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MENTOURI- CONSTANTINE  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

Série :

THESE  
PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT  
EN SCIENCES PHYSIQUES  
SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE  
THEME

Quantification par l'intégrale de chemin d'un ensemble de potentiels  
déformés

Par

Samir MAMERI

Soutenue le        /        / 2010

**devant le Jury :**

Président :	F. Benamira	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
Rapporteur :	L. Guechi	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
Examineurs :	H. Hachemi	Prof.	Univ. F. Abbas-Sétif
	M. Maamache	Prof.	Univ. F. Abbas-Sétif
	M. T. Meftah	Prof.	Univ. Ouargla
	S. R. Zouzou	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Formalisme des intégrales de chemin en coordonnées polaires</b>	<b>6</b>
1.1 Introduction . . . . .	6
1.2 Propagateur . . . . .	7
1.2.1 Définition . . . . .	7
1.2.2 Forme discrète du propagateur . . . . .	9
1.2.3 Intégrale de chemin dans l'espace des phases . . . . .	9
1.3 Intégrale de chemin en coordonnées polaires . . . . .	12
1.4 Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert . . . . .	19
1.5 Technique de développement en série de perturbations . . . . .	21
<b>2 Potentiel diatomique à quatre paramètres</b>	<b>24</b>
2.1 Introduction . . . . .	24
2.2 Potentiel de Hulthén généralisé . . . . .	26
2.3 Premier Cas : $\lambda \geq 1$ et $r_0 < r < \infty$ . . . . .	26
2.4 Deuxième Cas : $0 < \lambda < 1$ et $0 < r < \infty$ . . . . .	33
2.5 Potentiel de Woods-Saxon généralisé . . . . .	36
2.6 Cas particuliers . . . . .	39
2.6.1 Premier cas : potentiel écranté . . . . .	39
2.6.2 Deuxième cas : potentiel de Woods-Saxon déformé . . . . .	41
2.6.3 Troisième cas : potentiel de Morse radial . . . . .	42

<b>3</b>	<b>Potentiels vecteur et scalaire généralisés de Hulthén et Woods-Saxon</b>	<b>45</b>
3.1	Introduction . . . . .	45
3.2	Fonction de Green . . . . .	47
3.3	Potentiels de Hulthén généralisés . . . . .	51
3.3.1	Premier cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$ . . . . .	51
3.3.2	Deuxième cas : $0 < q < 1$ and $r \in \mathbb{R}^+$ . . . . .	57
3.4	Potentiels de Woods-Saxon generalisés . . . . .	60
3.5	Cas particuliers . . . . .	63
3.5.1	Premier cas : potentiels de Hulthén standard . . . . .	63
3.5.2	Deuxième cas : potentiel vecteur de Hulthén généralisé . . . . .	64
3.5.3	Troisième cas : potentiels de Woods-Saxon . . . . .	64
3.5.4	Quatrième cas : potentiels exponentiels . . . . .	65
3.5.5	Cinquième cas : potentiels de Coulomb . . . . .	67
	<b>Conclusion</b>	<b>69</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>71</b>
	<b>Annexe</b>	<b>74</b>

# Introduction

La mise sur pied du formalisme des intégrales de chemin en mécanique quantique non relativiste par Feynman [1] en 1948 est basée sur les résultats de la publication d'un travail de Dirac [2] dans lequel il avait suggéré que la fonction de transformation, communément connue comme le propagateur, est analogue à  $e^{\frac{i}{\hbar}S}$  où  $S$  est la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi. En développant la suggestion de Dirac, Feynman avait réussi à établir une nouvelle formulation de la mécanique quantique comme une alternative aux deux formulations équivalentes proposées presque simultanément : la mécanique des matrices d'Heisenberg [3] et la mécanique ondulatoire de Schrödinger [4]. Sa formulation repose sur le fait que le propagateur, solution de l'équation de Schrödinger et qui définit l'amplitude de la probabilité d'évolution d'une particule du point  $\vec{r}_1$  à l'instant  $t_1$  au point  $\vec{r}_2$  à l'instant  $t_2$ , peut être écrit comme une somme d'une infinité d'amplitudes partielles associées à chacun des chemins d'espace-temps noté  $\Gamma$  qui relie les points de coordonnées  $(\vec{r}_1, t_1)$  et  $(\vec{r}_2, t_2)$ . Chaque chemin contribue au propagateur par la quantité  $\exp(\frac{i}{\hbar}S_\Gamma)$  où  $S_\Gamma$  est l'action classique évaluée le long du chemin  $\Gamma$ , c'est à dire  $S_\Gamma = \int_\Gamma L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)dt$ , où  $L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)$  est le Lagrangien de la particule. Feynman inclut dans cette action le principe de moindre action [2] pour ignorer les chemins autres que ceux qui sont très proches du chemin classique  $\Gamma_0$  où l'action est minimale. Ainsi, tandis que Dirac considérait seulement le chemin classique, Feynman a prouvé que tous les chemins contribuent, dans un sens où la particule quantique peut suivre tous les chemins et les amplitudes associées à ces chemins s'ajoutent selon le principe de superposition habituel de la mécanique quantique. Cette formulation est particulièrement intéressante puisqu'elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique. On doit noter qu'à la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , la contribution essentielle au propagateur provient des chemins qui obéissent au principe varia-

tionnel classique  $\delta S = 0$ . La formulation Lagrangienne de la mécanique quantique présente de nombreux avantages. A titre d'exemple, elle se prête aisément à une généralisation relativiste puisque le raisonnement est directement inscrit dans l'espace-temps.

Sur le plan mathématique, de nombreux inconvénients ont été contournés depuis l'introduction d'une transformation spatio-temporelle par Duru et Kleinert [5] pour construire le propagateur de Feynman associé au problème de l'atome d'hydrogène. Le succès du calcul de ce propagateur marqua un tournant important dans le développement du formalisme des intégrales de chemin. Des exemples de problèmes non relativistes ou relativistes résolus exactement à l'aide de cette transformation spatio-temporelle de Duru et Kleinert sont donnés dans la référence [6].

Si, aujourd'hui, le calcul exact du propagateur par l'approche des intégrales de chemin de Feynman semble atteindre un point de saturation pour des systèmes physiques régis par un Lagrangien avec un potentiel régulier à longue portée, il existe encore d'autres types de problèmes qui sont rarement abordés dans le cadre du formalisme de l'intégrale de chemin [7, 8, 9]. Parmi ces problèmes, nous pouvons citer ceux qui obéissent aux conditions aux limites de Dirichlet [10] qui se traduisent en mécanique quantique par des conditions aux limites devant être satisfaites par les fonctions d'onde du système physique en question.

L'objet de ce travail concerne l'étude par l'approche des intégrales de chemin de deux systèmes dynamiques intéressant la physique théorique et la chimie quantique. Ces deux systèmes sont caractérisés par des potentiels contraignant le mouvement à se produire sur un demi axe dans certains cas.

Ce mémoire comporte trois chapitres. Dans le chapitre 1, nous présentons des généralités sur le formalisme des intégrales de chemin en coordonnées polaires avec un bref rappel sur l'introduction d'une fonction régulatrice pour rendre le propagateur stable et calculable et un exposé rudimentaire sur la technique de développement de l'intégrale de chemin contenant un potentiel additionnel  $\tilde{V}(x) = -\alpha\delta(x - a)$  en une série de perturbations par rapport à un potentiel donné  $V(x)$  [11, 12, 13, 14]. Dans le chapitre 2, nous étudions un potentiel à quatre paramètres servant comme modèle de potentiel diatomique. La dépendance de ce potentiel d'un paramètre de déformation  $\lambda$  qui détermine la forme du potentiel, ne permet pas de traiter de façon unifiée le problème des états liés quelque soit la valeur réelle de  $\lambda$ . Dans le chapitre 3,

nous analysons le problème d'une particule de charge  $(-e)$  sans spin dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire dépendant d'un même paramètre réel  $q$  de déformation. Dans le cas du potentiel diatomique comme dans celui des potentiels vecteur et scalaire, lorsque le paramètre de déformation est négatif ou compris entre 0 et 1, on a un problème de mécanique quantique avec des conditions aux limites de Dirichlet représentées par des demi axes. Ces conditions aux limites sont caractérisées dans l'intégrale de chemin par l'incorporation d'une perturbation décrite par une fonction  $\delta$  de Dirac dans l'expression de l'action. Nous terminons ce mémoire par une conclusion.

Ce travail a donné lieu à deux publications internationales qu'on trouvera en annexe.

# Chapitre 1

## Formalisme des intégrales de chemin en coordonnées polaires

### 1.1 Introduction

Le but principal de ce chapitre est de se familiariser avec l'approche des intégrales de chemin qui offre un point de vue alternatif aux méthodes standard de Schrödinger et d'Heisenberg. C'est une approche qui est devenue essentielle à une compréhension profonde de la théorie quantique des champs et de ses applications qui vont de la physique des interactions fondamentales à la mécanique statistique des transitions de phase ou aux propriétés des gaz quantiques. L'intégrale de chemin est un outil très puissant pour l'étude des problèmes de la mécanique quantique. Elle établit un lien très explicite entre la mécanique classique et la mécanique quantique. La formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin peut paraître plus compliquée du point de vue mathématique, mais elle est bien adaptée à l'étude des systèmes à un grand nombre de degrés de liberté où un formalisme du type équation de Schrödinger est beaucoup moins utile.

## 1.2 Propagateur

### 1.2.1 Définition

Considérons une particule, à une dimension, en mouvement sous l'action d'un potentiel  $V(x, t)$  allant du point  $A(x', t')$  au point  $B(x'', t'')$ . Le chemin de la particule est représenté par une fonction du temps  $x(t)$  avec  $x(t') = x'$  et  $x(t'') = x''$ .

Le mouvement de la particule est régi par le Lagrangien

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x, t). \quad (1.1)$$

Le chemin classique noté par  $\bar{x}(t)$  est celui pour lequel l'action de la particule donnée par

$$S = \int_{t'}^{t''} L(x, \dot{x}, t) dt \quad (1.2)$$

est minimale. En d'autres termes, la variation de l'action

$$\delta S = S(x + \delta x) - S(x) = 0 \quad (1.3)$$

au premier ordre en  $\delta x$ . Or

$$\begin{aligned} S(x + \delta x) &= \int_{t'}^{t''} L(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}, t) dt \\ &= \int_{t'}^{t''} \left( L(x, \dot{x}, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \\ &= S(x) + \int_{t'}^{t''} \left( \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \end{aligned} \quad (1.4)$$

En intégrant par partie, la variation de l'action devient

$$\delta S = \delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t'}^{t''} - \int_{t'}^{t''} \delta x \left( \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \quad (1.5)$$

Puisque  $\delta x(t') = \delta x(t'') = 0$ , le terme  $\delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t'}^{t''}$  de l'équation (1.4) est nul. Comme  $\delta x$  peut prendre toute valeur arbitraire entre les points initial et final, la condition suivante est toujours

satisfaite,

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \quad (1.6)$$

Cette équation est appelée équation d'Euler-Lagrange du mouvement de la particule.

Au lieu de considérer seulement la trajectoire classique, nous allons maintenant considérer tous les chemins possibles que peut prendre la particule pour aller du point  $A$  au point  $B$ . On associe à chacun de ces chemins une amplitude de probabilité partielle  $\Phi_\Gamma [x(t)]$  donnée par

$$\Phi_\Gamma [x(t)] = N \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_\Gamma [x(t)] \right], \quad (1.7)$$

où  $N$  est une constante de normalisation et  $S_\Gamma$  est l'action associée au chemin  $\Gamma$ . Par définition, la probabilité de transition du point  $x_a$  à  $t_a$  au point  $x_b$  à  $t_b$  est

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2 \quad (1.8)$$

où  $K(b, a)$  est l'amplitude ou propagateur d'aller de  $A$  à  $B$ . Cette amplitude est la somme des contributions  $\Phi_\Gamma [x(t)]$  de chaque chemin

$$K(b, a) = \sum_\Gamma \Phi_\Gamma [x(t)]. \quad (1.9)$$

Comme les chemins sont très proches les uns des autres, la somme peut être remplacée par une intégrale. Ainsi, nous obtenons l'expression du propagateur

$$\begin{aligned} K(b, a) &= \int_\Gamma D_\Gamma \Phi_\Gamma [x(t)] \\ &= \int_{x(t')}^{x(t'')} Dx(t) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_\Gamma [x(t)] \right], \end{aligned} \quad (1.10)$$

où  $D_\Gamma$  et  $Dx(t)$  sont les mesures.

## 1.2.2 Forme discrète du propagateur

Le propagateur qui gouverne l'évolution d'une particule de masse  $m$  du point  $x'$  à l'instant  $t'$  au point  $x''$  au temps  $t''$  a été défini par Feynman [1] de la façon suivante :

$$K(x'', t''; x', t') = \int Dx(t) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(x, \dot{x}; t) dt \right], \quad (1.11)$$

où  $T = t'' - t'$ . En subdivisant l'intervalle de temps  $T$  en  $(N + 1)$  intervalles élémentaires égaux tel que  $\varepsilon = t_n - t_{n-1} = T/(N + 1)$ , et en utilisant les notations habituelles  $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$ ,  $\bar{x} = \frac{x_n + x_{n-1}}{2}$ ,  $x'' = x(t_{N+1})$ ,  $x' = x(t_0)$ ,  $t_0 = t'$  et  $t_{N+1} = t''$ , l'expression du propagateur (1.11) prend la forme suivante :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \times \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} A_N \right], \quad (1.12)$$

avec l'action totale

$$A_N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_n)^2 - \varepsilon V(x_n) \right] = \int_0^T \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt. \quad (1.13)$$

## 1.2.3 Intégrale de chemin dans l'espace des phases

L'évolution d'une particule soumise à un potentiel  $V(x)$  et repérée par les positions  $x'$  et  $x''$  aux instants fixés  $t'$  et  $t''$  respectivement, peut être décrite en définissant le propagateur comme étant l'amplitude de probabilité de transition définie à l'aide de l'opérateur d'évolution par :

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x' | \hat{U}(t'', t') | x'' \rangle \Theta(t'' - t'). \quad (1.14)$$

$\Theta(t'' - t')$  étant la fonction saut :

$$\Theta(t'' - t') = \begin{cases} 1 & \text{pour } t'' > t', \\ 0 & \text{pour } t' > t''. \end{cases} \quad (1.15)$$

En divisant l'intervalle de temps  $T = (t'' - t')$  en  $(N + 1)$  intervalles infinitésimaux égaux  $\varepsilon$ , on peut décomposer l'opérateur d'évolution  $\hat{U}(t'', t')$  en  $(N + 1)$  opérateurs élémentaires  $\hat{U}(t_n, t_{n-1})$  tels que

$$\hat{U}(t'', t') = \hat{U}(t_{N+1}, t_N) \hat{U}(t_N, t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_n, t_{n-1}) \dots \hat{U}(t_1, t_0), \quad (1.16)$$

avec  $t_{N+1} = t''$ ,  $t_0 = t'$  et  $T = \varepsilon(N + 1)$ . Ensuite, en insérant  $N$  relations de fermeture de la forme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n| = 1; \quad n = 1, 2, 3, \dots, N, \quad (1.17)$$

entre les opérateurs d'évolution infinitésimaux, le propagateur peut se mettre sous la forme d'un produit de  $(N + 1)$  propagateurs élémentaires

$$\begin{aligned} K(x'', t''; x', t') &= \langle x'', t'' | x', t' \rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \prod_{n=1}^N dx_n, \end{aligned} \quad (1.18)$$

où

$$\begin{aligned} \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle &= \langle x_n | \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | x_{n-1} \rangle \\ &= \langle x_n | \exp\left(i\varepsilon \hat{H}/\hbar\right) | x_{n-1} \rangle, \end{aligned} \quad (1.19)$$

avec  $x_0 = x'$  et  $x_{N+1} = x''$ . L'opérateur Hamiltonien  $\hat{H}$  de la particule est donné par

$$\hat{H} = \hat{T}(p, t) + \hat{V}(x, t), \quad (1.20)$$

où  $\hat{T}(p, t)$  est l'opérateur énergie cinétique et  $\hat{V}(x, t)$  l'opérateur énergie potentielle. Pour  $\varepsilon$  très petit, on peut appliquer la formule de Baker-Hausdorff [15]

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{H}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{T}} e^{-\frac{i}{\hbar^2}\varepsilon^2\hat{X}}, \quad (1.21)$$

où l'opérateur  $\hat{X}$  représente le développement

$$\hat{X} = \frac{1}{2} [\hat{V}, \hat{T}] - \frac{\varepsilon}{\hbar} \left( \frac{1}{6} [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{T}]] - \frac{1}{3} [[\hat{V}, \hat{T}], \hat{T}] \right) + \dots \quad (1.22)$$

Si nous négligeons tous les termes d'ordre supérieur ou égal à  $\varepsilon^2$  puisque l'action élémentaire est par définition d'ordre  $\varepsilon$  et si nous insérons les relations de fermeture suivantes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n| = 1; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} |p_n\rangle \langle p_n| = 1, \quad (1.23)$$

dans l'expression (1.19), nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle x_n | \exp \left( i\varepsilon \hat{H} / \hbar \right) | x_{n-1} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{V}(\hat{x}, t_n)} | x \rangle \langle x | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{T}(p; t_n)} | x_{n-1} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{V}(x, t_n)} | x \rangle \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} [p_n (x - x_{n-1}) - \varepsilon T(p_n, t_n)] \right]. \end{aligned} \quad (1.24)$$

En tenant compte de l'élément de matrice local

$$\langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{V}(x, t_n)} | x \rangle = \delta(x_n - x) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(x_n, t_n)}, \quad (1.25)$$

on a

$$\langle x_n | \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | x_{n-1} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [[p_n (x_n - x_{n-1}) - \varepsilon [T(p_n, t_n) + V(x_n, t_n)]] \right\}. \quad (1.26)$$

Par substitution de (1.26) dans (1.18) et en définissant la fonction de Green  $G(x'', x'; E)$  comme étant la transformée de Fourier du propagateur  $K(x'', t''; x', t')$ , nous obtenons

$$\begin{aligned}
G(x'', x'; E) &= \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) K(x'', t''; x', t') \\
&= \int_0^\infty dT \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_n\right], \quad (1.27)
\end{aligned}$$

avec l'action élémentaire

$$A_n = p_n(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon(T(p_n, t_n) + V(x_n, t_n) - E), \quad (1.28)$$

et  $T = t'' - t'$ .

### 1.3 Intégrale de chemin en coordonnées polaires

De nombreux systèmes physiques sont invariants par rotation. Le traitement de ces systèmes permet généralement une transformation aux coordonnées polaires. Ainsi, par exemple, dans le cas de l'équation de Schrödinger pour des potentiels à symétrie sphérique, on réduit le problème à un problème unidimensionnel représenté par l'équation radiale de Schrödinger.

Il est naturel de se demander si une telle transformation en coordonnées polaires est possible aussi avec une intégrale de chemin. La réponse à cette question n'est pas triviale, car il n'existe apparemment pas de prescription générale pour écrire une intégrale de chemin en coordonnées curvilignes.

En fait, à l'origine, lors de la formulation complète des intégrales de chemin en mécanique quantique, on doit nécessairement démarrer à partir des coordonnées cartésiennes. La nature stochastique des chemins s'oppose généralement à une utilisation directe de l'action classique exprimée en coordonnées curvilignes. En outre, même si une intégrale de chemin est exprimée en coordonnées cartésiennes, elle n'est pas invariante par une modification formelle de variables. Toutefois, avec un petit peu de recul et de soin, on peut obtenir la correction Lagrangienne qui assure que l'intégrale transformée décrit le même problème quantique comme celui de départ. Notre motivation dans cette section est essentiellement de mettre en lumière ces questions subtiles. Nous allons aborder maintenant l'intégrale de chemin à trois dimensions en coordonnées

polaires. Pour cela, considérons entre les deux instants  $t'$  et  $t''$  tels que  $t' < t''$  et  $t'' - t' = T$ , le propagateur de Feynman d'une particule de masse  $m$  se déplaçant dans un espace Euclidien à trois dimensions dans un potentiel  $V(r)$ . Ce dernier est donné par

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) &= \int_{\vec{r}(t')=\vec{r}'}^{\vec{r}(t'')=\vec{r}''} D\vec{r}(t) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left( \frac{m}{2} \left( \dot{\vec{r}} \right)^2 - V(r) \right) dt \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N \left[ \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_j \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_N \right], \end{aligned} \quad (1.29)$$

avec l'action totale

$$S_N = \sum_{j=1}^{N+1} S_j = \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta \vec{r}_j)^2 - \varepsilon V(r_j) \right], \quad (1.30)$$

où  $S_j$  est l'action élémentaire donnée par la formule

$$S_j = \left[ \frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2\vec{r}_j \cdot \vec{r}_{j-1}) - \varepsilon V(r_j) \right]. \quad (1.31)$$

En utilisant le système des coordonnées sphériques  $(r, \theta, \phi)$  défini ainsi :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi, \\ y = r \sin \theta \sin \phi, \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (1.32)$$

avec  $r > 0$ ,  $0 \leq \theta < \pi$  et  $0 \leq \phi < 2\pi$ , la métrique s'écrit

$$ds^2 = g_{rr} (dr)^2 + g_{\theta\theta} (d\theta)^2 + g_{\phi\phi} (d\phi)^2, \quad (1.33)$$

où

$$g_{rr} = 1, \quad g_{\theta\theta} = r^2, \quad g_{\phi\phi} = r^2 \sin^2 \theta. \quad (1.34)$$

Le tenseur métrique se met alors sous la forme :

$$(g_{ab}) = \text{diag} (g_{rr}, g_{\theta\theta}, g_{\phi\phi}) , \quad (1.35)$$

avec

$$\sqrt{g} = \sqrt{\det (g_{ab})} = r^2 \sin \theta \quad (1.36)$$

et son inverse  $(g^{ab})$

$$(g_{ab})^{-1} = (g^{ab}) = \text{diag} (g_{rr}^{-1}, g_{\theta\theta}^{-1}, g_{\phi\phi}^{-1}) . \quad (1.37)$$

L'élément de volume  $d\vec{r}$  en coordonnées sphériques est donné par :

$$d\vec{r} = r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr. \quad (1.38)$$

L'intégrale de chemin (1.29) peut être réécrite en coordonnées sphériques ainsi :

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left( \frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N \left[ \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j \, dr_j \, d\theta_j \, d\phi_j \right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} A(j, j-1) \right], \end{aligned} \quad (1.39)$$

avec l'action élémentaire

$$A(j, j-1) = \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} \cos \Theta_{j, j-1}) - \varepsilon V(r_j) \right] \quad (1.40)$$

et

$$\cos \Theta_{j, j-1} = \cos \theta_j \cos \theta_{j-1} + \sin \theta_j \sin \theta_{j-1} \cos (\phi_j - \phi_{j-1}). \quad (1.41)$$

La mesure

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{3}{2}} \prod_{n=1}^N \left[ \int d\vec{r}_n \right] \quad (1.42)$$

s'écrit alors dans le système des coordonnées sphériques sous la forme :

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{3}{2}} \prod_{n=1}^N \left[ \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n \right]. \quad (1.43)$$

Toutefois, l'expression (1.39) n'est pas appropriée pour l'intégration, en raison de la présence des termes  $-(i/\hbar)(M/\varepsilon)r_j r_{j-1} \cos \Theta_j, j-1$  dans l'action. Cette dernière est séparable en une partie radiale et une partie angulaire. Pour une évaluation explicite de la partie angulaire du propagateur (1.39), nous allons utiliser la formule suivante (voir Gradshtein et Ryzhik [16], p. 980, Eq. (8.534)) :

$$e^{z \cos \Theta} = \left( \frac{2}{z} \right)^\nu \Gamma(\nu) \sum_{l=0}^{\infty} (l + \nu) I_{l+\nu}(z) C_l^\nu(\cos \Theta), \quad (1.44)$$

valable pour tout  $(\nu \neq 0, -1, -2, -3, \dots)$ , où  $I_\mu(z)$  sont les fonctions de Bessel modifiées et  $C_l^\nu(\cos \Theta)$  représentent les polynômes de Gegenbauer généralisant les polynômes de Legendre. Pour simplifier les calculs, on prend  $\nu = \frac{1}{2}$ . On aura alors :

$$\begin{aligned} e^{z \cos \Theta} &= \left( \frac{2}{z} \right)^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \sum_{l=0}^{\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) I_{l+\frac{1}{2}}(z) C_l^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta) \\ &= \left( \frac{2\pi}{z} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \left( l + \frac{1}{2} \right) I_{l+\frac{1}{2}}(z) C_l^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta) \\ &= \left( \frac{\pi}{2z} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) I_{l+\frac{1}{2}}(z) P_l(\cos \Theta), \end{aligned} \quad (1.45)$$

où  $P_l(\cos \Theta)$  est un polynôme de Legendre de degré  $l$  en  $\cos \Theta$ . Le propagateur (1.39) devient alors

$$\begin{aligned}
K(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \prod_{j=1}^N \left[ \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\} \left[ \prod_{j=1}^{N+1} \sqrt{\frac{\pi i \hbar \varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}}} \right] \\
&\times \sum_{l_j=0}^{\infty} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left( \frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta_{j, j-1}) \quad (1.46)
\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
K(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \sum_{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N+1}=0}^{\infty} \left[ \prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j^2 dr_j \right] \\
&\times \prod_{j=1}^{N+1} \left( \sqrt{\frac{\pi i \hbar \varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}}} \right) \prod_{j=1}^N \left[ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left( \frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) \right. \\
&C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta_{j, j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\phi_j \left. \right] \left[ (2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left( \frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) \right. \\
&C_{l_{N+1}}^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta_{N+1, N}) \left. \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\} \quad (1.47)
\end{aligned}$$

qui peut se mettre aussi sous la forme

$$\begin{aligned}
K(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{4\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1} \sum_{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N+1}=0}^{\infty} \left( \frac{1}{r'' r'} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\
&\times \prod_{j=1}^N \left[ \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left( \frac{M r_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta_{j, j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\phi_j \right] \\
&\times \left[ (2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left( \frac{M r_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_{N+1}}^{\frac{1}{2}}(\cos \Theta_{N+1, N}) \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}, \tag{1.48}
\end{aligned}$$

et à l'aide du théorème d'addition pour les harmoniques sphériques [17]

$$P_l(\cos \Delta \theta_n) = \frac{4\pi}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_n, \phi_n) Y_{l,m}^*(\theta_{n-1}, \phi_{n-1}), \tag{1.49}$$

où on somme sur tous les nombres quantiques azimutaux (magnétiques)  $m$ , le développement (1.45) devient :

$$e^{z \cos \Theta} = \left[ 2\pi \left( \sqrt{\frac{2\pi}{z}} \right) \sum_{l=0}^{\infty} I_{l+\frac{1}{2}}(z) \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_n, \phi_n) Y_{l,m}^*(\theta_{n-1}, \phi_{n-1}) \right], \tag{1.50}$$

et en insérant cette dernière dans (1.46), on obtient

$$\begin{aligned}
K(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{i\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \sum_{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N+1}=0}^{\infty} \left( \frac{1}{r'' r'} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\
&\times \prod_{j=1}^N \left[ I_{l_j + \frac{1}{2}} \left( \frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{l_j, m_j}(\theta_j, \phi_j) \right. \\
&Y_{l_j, m_j}^*(\theta_{j-1}, \phi_{j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\phi_j \left. \right] \left[ I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left( \frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \right. \\
&\times \left. \left( \sum_{m=-l_{N+1}}^{l_{N+1}} Y_{l_{N+1}, m}(\theta_{N+1}, \phi_{N+1}) \right) \right] \\
&\times Y_{l_{N+1}, m}^*(\theta_N, \phi_N) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{1.51}$$

L'orthogonalité des harmoniques sphériques décrite par la relation

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l, m}^*(\theta, \phi) Y_{l', m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \tag{1.52}$$

nous permet enfin de ramener le propagateur à la forme

$$K(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} K_l(r'', t''; r', t') P_l(\cos \Theta_{i, f}), \tag{1.53}$$

où

$$\begin{aligned}
K_l(r'', t''; r', t') &= \left( \frac{M}{i\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \left( \frac{1}{r'' r'} \right)^{\frac{1}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left[ \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\
&\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[ I_{l_j + \frac{1}{2}} \left( \frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{1.54}$$

et  $\Theta_{i, f} = (\vec{r}'', \vec{r}')$ . Le propagateur radial  $K_l(r'', t''; r', t')$  peut être simplifié. En effet, compte

tenu du comportement asymptotique des fonctions de Bessel modifiées

$$I_\nu \left( \frac{z}{\varepsilon} \right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\varepsilon}{2\pi z} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{z}{\varepsilon} - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{z} \left( \nu^2 - \frac{1}{4} \right) \right\}, \quad (1.55)$$

il devient

$$\begin{aligned} K_l (r'', t''; r', t') &= K_l (r'', r'; T) \\ &= \left( \frac{1}{r'' r'} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{j=1}^N \left[ \int_0^\infty dr_j \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j - r_{j-1})^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2 \varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}} - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.56)$$

## 1.4 Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert

Considérons une particule en mouvement linéaire repérée par les positions  $x'$  et  $x''$  aux instants fixés  $t'$  et  $t''$  respectivement. Dans l'espace des phases, le propagateur qui gouverne son évolution dans le potentiel  $V(x)$  est défini par l'intégrale de chemin de Feynman

$$K (x'', t''; x', t') = \int Dx(t) Dp(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} (p\dot{x} - H) dt \right\}, \quad (1.57)$$

avec l'Hamiltonien

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x). \quad (1.58)$$

Supposons que le potentiel  $V(x)$  est aussi compliqué qu'une évaluation directe de l'intégrale de chemin ne soit pas possible. Souvent, il est nécessaire d'effectuer une transformation de coordonnée  $x \rightarrow \xi$  représentée par  $x = g(\xi)$  accompagnée d'une transformation temporelle  $t \rightarrow s$  définie par  $dt = f(x) ds$ . Pour mettre en œuvre une telle transformation spatio-temporelle dans le calcul de l'intégrale de chemin, on commence par écrire l'opérateur résolvante donné par

$$\hat{R} = f_r(x) \frac{i\hbar}{f_l(x)(E-H+i0)f_r(x)} f_l(x), \quad (1.59)$$

où  $f_l(x)$  et  $f_r(x)$  sont des fonctions de la variable  $x$ , multipliant à gauche et à droite, respectivement, l'opérateur  $(E-H+i0)$  et sont telles que  $f_l(x)f_r(x) = f(x)$ . En exprimant l'opérateur  $\frac{i\hbar}{f_l(x)(E-H+i0)f_r(x)}$  dans la représentation de Schwinger [43], on peut associer à l'opérateur résolvante (1.59) un élément de matrice appelé amplitude de transition pour une énergie fixée ou fonction de Green

$$G(x'', x'; E) = \langle x'' | \hat{R} | x' \rangle = \int_{s'}^{\infty} ds'' \langle x'' | \hat{U}_E(s'' - s') | x' \rangle, \quad (1.60)$$

où  $\hat{U}_E(S)$  est l'opérateur pseudo-temporel d'évolution défini par

$$\hat{U}_E(S) = f_r(x) e^{-\frac{i}{\hbar} S f_l(x)(E-H)f_r(x)} f_l(x). \quad (1.61)$$

On peut maintenant convertir l'expression (1.60) en une intégrale de chemin en subdivisant la variable temporelle  $S$  en  $(N+1)$  intervalles infinitésimaux et en insérant  $N$  relations de fermeture pour arriver à la représentation intégrale approximée de la fonction de Green

$$G(x'', x'; E) \approx (N+1) \int_0^{\infty} d\varepsilon_s \langle x'' | \hat{U}_E^N(\varepsilon_s(N+1)) | x' \rangle, \quad (1.62)$$

avec l'intégrale de chemin pour l'amplitude pseudo-temporelle sous forme discrète donnée par

$$\langle x'' | \hat{U}_E^N(\varepsilon_s(N+1)) | x' \rangle = f_r(x'') f_l(x') \prod_{j=1}^N \left[ \int dx_j \right] \prod_{j=1}^{N+1} \left[ \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} A_E^N \right], \quad (1.63)$$

où  $A_E^N$  est l'action totale exprimée sous sa forme discrète par

$$A_E^N = \sum_{j=1}^{N+1} [p_j \Delta x_j - \varepsilon_s f_l(x_j) (H(p_j, x_j) - E) f_r(x_{j-1})], \quad (1.64)$$

avec  $ds = \varepsilon_s = \varepsilon / f_l(x_j) f_r(x_{j-1}) = dt / f_l(x_j) f_r(x_{j-1})$ . En effectuant l'intégration sur les variables  $p_j$ , nous obtenons l'intégrale de chemin dans l'espace des configurations

$$\begin{aligned}
\langle x'' | \hat{U}_E^N(\varepsilon_s(N+1)) | x' \rangle &= \frac{f_r(x'') f_l(x')}{\sqrt{2\pi i \hbar \varepsilon_s f_l(x'') f_r(x') / m}} \prod_{j=1}^N \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \prod_{j=1}^N \left[ \frac{dx_j}{\sqrt{f(x_j)}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{m(\Delta x_j)^2}{2\varepsilon_s f_l(x_j) f_r(x_{j-1})} \right. \right. \\
&\left. \left. - \varepsilon_s f_l(x_j) (V(x_j) - E) f_r(x_{j-1}) \right] \right\}. \tag{1.65}
\end{aligned}$$

En faisant maintenant tendre  $N$  vers l'infini et en choisissant  $f_l(x) = f_r(x) = f^{\frac{1}{2}}(x)$ , nous pouvons écrire la fonction de Green comme une intégrale sous la forme

$$G(x'', x'; E) = \int_0^\infty dS P^E(x'', x'; S), \tag{1.66}$$

avec l'intégrale de chemin

$$\begin{aligned}
P^E(x'', x'; S) &= [f_r(x'') f_l(x')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \prod_{j=1}^N \left[ \int \frac{dx_j}{\sqrt{f(x_j)}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[ \frac{m(\Delta x_j)^2}{2\varepsilon_s \sqrt{f(x_j) f(x_{j-1})}} \right. \right. \\
&\left. \left. - \varepsilon_s (V(x_j) - E) \sqrt{f(x_j) f(x_{j-1})} \right] \right\}. \tag{1.67}
\end{aligned}$$

Ce noyau est calculable moyennant une fonction régularisatrice  $f(x)$  appropriée.

## 1.5 Technique de développement en série de perturbations

Considérons une particule en mouvement dans un potentiel

$$W(x) = V(x) + \tilde{V}(x), \tag{1.68}$$

où  $W(x)$  est si compliqué qu'une évaluation directe du propagateur par l'approche de l'intégrale de chemin ne soit pas possible. Pour appliquer la méthode des perturbations, nous décomposons l'action

$$S = \int_0^T \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - W(x) \right] dt = S_V + S_{\tilde{V}}, \quad (1.69)$$

où

$$S_{\tilde{V}} = - \int_0^T \tilde{V}(x) dt \quad (1.70)$$

et  $S_V$  est l'action de la particule dans le potentiel  $V(x)$ . En effectuant le développement en série de  $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\tilde{V}}\right)$ , nous avons

$$\begin{aligned} K(x'', x'; T) &= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_V\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{S_{\tilde{V}}^n}{n!}\right) \\ &= K^{(V)}(x'', x'; T) + K^{(\tilde{V})}(x'', x'; T), \end{aligned} \quad (1.71)$$

où le propagateur  $K^{(V)}(x'', x'; T)$  correspondant au potentiel  $V(x)$  est donné par

$$K^{(V)}(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\}. \quad (1.72)$$

Toutefois, il est supposé connu. L'expression de  $K^{(\tilde{V})}(x'', x'; T)$  est de la forme

$$K^{(\tilde{V})}(x'', x'; T) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_V\right) S_{\tilde{V}}^n \dots \quad (1.73)$$

Notons que

$$\begin{aligned} S_{\tilde{V}}^n &= (-1)^n \int_{t'}^{t''} dt_n \int_{t'}^{t''} dt_{n-1} \dots \int_{t'}^{t''} dt_2 \int_{t'}^{t''} dt_1 \prod_{j=1}^n \tilde{V}(x(t_j)) \\ &= (-1)^n n! \int_{t'}^{t''} dt_n \int_{t'}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t'}^{t_3} dt_2 \int_{t'}^{t_2} dt_1 \prod_{j=1}^n \tilde{V}(x_j); \quad x_j = x(t_j), \end{aligned} \quad (1.74)$$

où, dans une deuxième étape, nous avons ordonné le temps comme suit :

$$t' = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n+1} = t''$$

et posé  $T = t'' - t'$ . Il est maintenant facile de voir que

$$\begin{aligned}
K^{(\tilde{V})}(x'', x'; T) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t'}^{t''} dt_n \int_{t'}^{t''} dt_{n-1} \dots \int_{t'}^{t''} dt_2 \int_{t'}^{t''} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \\
&\quad K^{(V)}(x_1, x'; t_1 - t') \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) \\
&\quad \times K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; t'' - t_n) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \left( \prod_{j=1}^n \int_{t'}^{t_{j+1}} t_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \right) \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; t_1 - t') \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \\
&\quad \times \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; t'' - t_n).
\end{aligned} \tag{1.75}$$

Cette technique sera exploitée dans les chapitres suivants en assimilant  $V(x)$  et  $\tilde{V}(x)$  au potentiel de Rosen-Morse ou de Manning-Rosen et à un potentiel  $\delta$ -fonction de Dirac, respectivement.

## Chapitre 2

# Potentiel diatomique à quatre paramètres

### 2.1 Introduction

Les potentiels à symétrie sphérique jouent un rôle très important en physique microscopique car ils sont largement utilisés comme une bonne approximation du potentiel d'interaction dans de nombreux domaines de la physique et de la chimie notamment en physique nucléaire [18], physique atomique [19] et moléculaire [20] et en chimie quantique [21]. Nous pouvons citer, entre autres, le potentiel à quatre paramètres introduit par Sun en 1999 comme une alternative au potentiel de Morse pour ajuster des courbes RKR (Rydberg-Klein-Rees) expérimentales de l'énergie potentielle d'un ensemble de systèmes de molécules diatomiques incluant l'état fondamental  $X^1\Sigma_g$  de  ${}^7Li_2$ , deux types de métaux et six types de molécules non métalliques [22]. Cette fonction potentielle est de la forme :

$$V(r) = \frac{2m}{\hbar^2}v(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} - \lambda)^2} - \frac{b}{(e^{\eta r} - \lambda)} \quad (2.1)$$

avec  $a$ ,  $b$ ,  $\eta$ , et  $\lambda$  des constantes réelles définies par  $a = \frac{2m}{\hbar^2}D_e(e^\alpha - \lambda)^2$ ,  $b = \frac{4m}{\hbar^2}D_e(e^\alpha - \lambda)$  et  $\eta = \frac{\alpha}{r_e}$  où  $D_e$  est la profondeur du puits de potentiel,  $r_e$  est la distance d'équilibre des deux noyaux et  $\lambda$  est le paramètre décrivant la forme du potentiel. Si  $\lambda = 0$ , nous avons le potentiel ordinaire de Morse. Dans le cas où  $\lambda > 0$ , le potentiel (2.1) est appelé potentiel de Hulthén

généralisé et potentiel de Woods-Saxon généralisé si  $\lambda < 0$ .

Un traitement de ce potentiel a été présenté récemment dans le cadre de l'approche de l'invariance de forme et à l'aide de la méthode de quantification WKB supersymétrique [23], mais il comporte plusieurs manipulations incorrectes de telle sorte que les solutions obtenues pour le problème des états liés ne sont pas satisfaisantes puisque, d'une part, le potentiel (2.1) a une forte singularité au point  $r = \frac{1}{\eta} \ln(\lambda)$  et d'autre part, les conditions aux limites ne sont pas remplies quand  $r \rightarrow 0$  et quand  $r \rightarrow \frac{1}{\eta} \ln(\lambda)$ . Comme il est facile de voir qu'il n'est pas possible d'étudier ce potentiel au moyen de la mécanique quantique supersymétrique quelque soient les valeurs du paramètre  $\lambda$ , nous pensons alors qu'il est intéressant de discuter en détail les solutions du problème des états  $s$  en utilisant le formalisme de l'intégrale de chemin.

Le plan de notre étude est le suivant : dans le second paragraphe, nous construisons l'intégrale de chemin associée au potentiel de Hulthén généralisé ( $\lambda > 0$ ) en distinguant les cas  $\lambda \geq 1$  et  $0 < \lambda < 1$ . Pour  $\lambda \geq 1$  et  $\frac{1}{\eta} \ln(\lambda) < r < \infty$ , il est montré que la fonction de Green pour le potentiel en question se ramène à celle du potentiel de Rosen-Morse  $\lambda$ -déformé en appliquant uniquement la technique de la transformation spatio-temporelle. La solution analytique du spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes avec un facteur de normalisation correct sont obtenues. Lorsque  $0 < \lambda < 1$  le potentiel de Rosen-Morse  $\lambda$ -déformé est défini sur une demi-droite. Dans ce cas, la fonction de Green est évaluée sous forme compacte en utilisant l'approche des perturbations qui consiste à incorporer une fonction  $\delta$  de Dirac comme une perturbation du potentiel standard de Rosen-Morse et en rendant la force de cette perturbation infiniment répulsive afin de former une barrière impénétrable. Les pôles de la fonction de Green donnent une équation transcendante pour les niveaux d'énergie. Dans le troisième paragraphe le potentiel de Woods-Saxon généralisé ( $\lambda < 0$ ) est traité de la même manière. Nous convertissons d'abord l'intégrale de chemin associée à celle du potentiel de Manning- Rosen  $\lambda$ -déformé défini sur une demi-droite. Nous calculons ensuite la fonction de Green au moyen de la perturbation décrite par une fonction  $\delta$  et nous obtenons une équation transcendante pour le spectre d'énergie. Le potentiel écranté qui généralise les potentiels de Hulthén et de l'atome d'hydrogène, le potentiel de Woods- Saxon déformé et le potentiel radial de Morse sont étudiés comme des cas particuliers dans le quatrième paragraphe.

## 2.2 Potentiel de Hulthén généralisé

Quand le paramètre de déformation  $\lambda$  est  $\lambda > 0$ , la fonction énergie potentielle à quatre paramètres (2.1) représente une forme générale du potentiel de Hulthén [24]. Comme ce potentiel est à symétrie sphérique, la fonction de Green se développe en ondes partielles ainsi :

$$G\left(\vec{r}'', \vec{r}' ; E\right) = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} G_l(r_f, r_i; E) P_l(\cos \theta) \quad (2.2)$$

où  $P_l(\cos \theta)$  est un polynôme de Legendre de degré  $l$  en  $\cos \theta$  et  $\theta = \left(\vec{r}'', \vec{r}'\right)$ . La fonction de Green radiale est donnée par :

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dT \left\langle r'' \left| \exp \left\{ -\frac{iT}{\hbar} (H_l - E) \right\} \right| r' \right\rangle \quad (2.3)$$

avec

$$H_l = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r). \quad (2.4)$$

Notre but est de trouver les niveaux d'énergie  $E_{n_r, l}$  et les fonctions d'onde radiales  $\Psi_{n_r, l}(r) = r^{-1} \chi_{n_r, l}(r)$  en calculant (2.3). Mais avant d'aborder la construction de la fonction de Green radiale (2.3) par l'intégrale de chemin pour  $\lambda > 0$ , nous devons prendre en considération les variations du potentiel effectif  $V_{eff} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$  selon les valeurs du paramètre  $\lambda$ . Nous distinguons alors deux cas. Si  $0 < \lambda < 1$ ,  $V(r)$  est continu sur tout l'intervalle  $\mathbb{R}^+$ . Mais, si  $\lambda \geq 1$ ,  $V(r)$  possède une forte singularité au point  $r = r_0 = \frac{1}{\eta} \ln(\lambda)$  et dans ce cas nous avons deux régions distinctes : l'une définie par l'intervalle  $]0, r_0[$  et l'autre par l'intervalle  $]r_0, \infty[$ . Ceci nous amène à construire la fonction de Green radiale par l'approche de l'intégrale de chemin dans chaque cas.

## 2.3 Premier Cas : $\lambda \geq 1$ et $r_0 < r < \infty$

Dans ce cas, nous allons étudier le potentiel effectif  $V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$  seulement dans l'intervalle  $]r_0, \infty[$  puisque, dans l'autre intervalle, la solution ne peut pas être obtenue d'une manière analytique. De plus, elle ne présente pas un intérêt physique considérable. Le potentiel  $V_{eff}(r)$  étant singulier au point  $r = r_0$ , la forme discrète de l'expression (2.3) n'existe

pas à cause de l'affaissement des chemins. Pour obtenir une intégrale de chemin stable, nous introduisons une fonction régularisatrice appropriée [15] et nous écrivons l'expression (2.3) sous la forme d'une intégrale de chemin :

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS P_l(r'', r'; S), \quad (2.5)$$

où  $P_l(r_f, r_i; S)$  est l'intégrale de chemin transformée donnée sous forme canonique par :

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S) &= f_R(r'') f_L(r') \langle r_f \left| \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} S f_L(r) \left( \frac{P_r^2}{2m} + V_{eff}(r) - E \right) f_R(r) \right] \right| r_i \rangle \\ &= f_R(r'') f_L(r') \int Dr(s) \int \frac{DP_r(s)}{2\pi\hbar} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left[ P_r \dot{r} - f_L(r) \left( \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) f_R(r) \right] ds \right\} \\ &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi\hbar} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right\}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

où  $A_1^n$  est l'action élémentaire définie par la forme

$$A_1^n = (P_r)_n \Delta r_n - \varepsilon_s f_L(r_n) \left( \frac{(P_r)_n^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_n^2} + V(r_n) - E \right) f_R(r_{n-1}) \quad (2.7)$$

et

$$\varepsilon_s = \frac{S}{N+1} = ds = \frac{dt}{f_R(r_n) f_L(r_{n-1})}; \quad dt = \varepsilon_t = \frac{T}{N+1}. \quad (2.8)$$

La fonction régularisatrice a été définie par Kleinert ainsi :

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\alpha}(r) f^\alpha(r), \quad (2.9)$$

où  $\alpha$  est le paramètre de dédoublement.

Pour simplifier le calcul du propagateur  $P_l(r'', r'; S)$ , nous posons  $\alpha = \frac{1}{2}$  et nous choisissons la prescription du point moyen. Cela peut être justifié par le fait que le résultat est

indépendant de ce paramètre. Alors, en intégrant ensuite par rapport à la variable  $(P_r)_n$  nous trouvons

$$P_l(r'', r'; S) = [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \times \prod_{n=1}^N \left[ \int \frac{dr_n}{\sqrt{f(r_n)}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right\}, \quad (2.10)$$

avec l'action élémentaire  $A_2^n$ , dans l'espace des configurations, donnée par

$$A_2^n = \frac{m(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_s \sqrt{f(r_n) f(r_{n-1})}} - \varepsilon_s \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_n^2} + V(r_n) - E \right) \sqrt{f(r_n) f(r_{n-1})}. \quad (2.11)$$

En effectuant la transformation spatiale  $r \rightarrow \xi$ , définie de  $r \in ]r_0, \infty[$  vers  $\xi \in \mathbb{R}$  par

$$r = \frac{1}{\eta} \ln [\exp(2\eta\xi) + \lambda], \quad (2.12)$$

et en utilisant la fonction régularisatrice suivante :

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)} = g'^2(\xi), \quad (2.13)$$

nous pouvons exprimer (2.10) ainsi

$$P_l(r'', r'; S) = [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[ \int d\xi_n \right] \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m(\Delta \xi_n)^2}{2\varepsilon_s} + \frac{m}{8\varepsilon_s} \left( \frac{g''^2}{g'^2} - \frac{2g'''}{3g'} \right) (\Delta \xi_n)^4 - \varepsilon_s \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m} \frac{l(l+1)}{(\ln(e^{2\eta\xi_n} + \lambda))^2} \frac{e^{2\eta\xi_n}}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi_n)} + \varepsilon_s \left( 2E - \frac{\hbar^2 a}{m\lambda^2} \right) + \varepsilon_s \left( 2E + \frac{\hbar^2 a}{m\lambda^2} \right) \tanh_\lambda(\eta\xi_n) + \varepsilon_s \left( \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda} + b \right) - \lambda E \right) \frac{1}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi_n)} \right] \right\}. \quad (2.14)$$

Nous avons introduit ici les fonctions hyperboliques déformées, définies pour la première fois par Arai [25] comme suit :

$$\cosh_\lambda x = \frac{1}{2} (e^x + \lambda e^{-x}), \quad \sinh_\lambda x = \frac{1}{2} (e^x - \lambda e^{-x}), \quad \tanh_\lambda x = \frac{\sinh_\lambda x}{\cosh_\lambda x}, \quad (2.15)$$

où  $\lambda$  est un paramètre réel. L'action contenue dans l'expression (2.14) renferme le terme  $(\Delta\xi_n)^4$  qui est d'ordre  $\varepsilon_s^2$ . Nous pouvons le remplacer en utilisant la formule suivante [26] :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 + \beta x^4) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\alpha x^2 + \frac{3\beta}{4\alpha^2}\right) dx + O\left(\frac{1}{\alpha^3}\right), \quad (2.16)$$

valable pour  $\Re\{\alpha\} > 0$  et  $|\alpha|$  grand, et donc le propagateur (2.14) s'écrit

$$P_l(r'', r'; S) = [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \int D\xi \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[ \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + \tilde{E} - A \tanh_\lambda(\eta\xi) + \frac{B}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)} - \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m} \frac{l(l+1)}{[\ln(e^{2\eta\xi} + \lambda)]^2} \frac{e^{2\eta\xi}}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}, \quad (2.17)$$

où nous avons posé

$$\begin{cases} \tilde{E} = 2 \left[ E - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \\ A = -2 \left[ E + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \\ B = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda} + b - \frac{\eta^2 \lambda}{4} \right) - \lambda E. \end{cases} \quad (2.18)$$

L'intégrale de chemin (2.17) telle qu'elle est, n'est pas soluble pour un moment cinétique orbital  $l$  non nul. Pour éliminer le terme proportionnel à  $\frac{e^{2\eta\xi}}{(\ln(e^{2\eta\xi} + \lambda))^2 \cosh_\lambda^2(\eta\xi)}$ , nous devons poser  $l = 0$ . Dans ce cas, la fonction de Green radiale (2.5) prend la forme :

$$\begin{aligned} G_0(r'', r'; E) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P_0(r'', r'; S) \\ &= [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E}), \end{aligned} \quad (2.19)$$

où

$$G_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P_{RM}(\xi'', \xi'; S) \quad (2.20)$$

et

$$P_{RM}(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - V^{RM}(\xi)\right]\right\} \quad (2.21)$$

représente justement le propagateur associé au potentiel de Rosen-Morse [27] défini en termes des fonctions hyperboliques  $\lambda$ -déformées par

$$V^{RM}(\xi) = A \tanh_\lambda(\eta\xi) - \frac{B}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)}; \quad \xi \in \mathbb{R}. \quad (2.22)$$

Comme la solution exacte du propagateur (2.21) est bien connue, nous pouvons donc écrire directement l'expression explicite de sa fonction de Green, à savoir

$$\begin{aligned} G_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) &= \frac{m}{\hbar^2} \left[ \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \right] \\ &\times \left( \frac{1 - \tanh_\lambda(\eta\xi')}{2} \frac{1 - \tanh_\lambda(\eta\xi'')}{2} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\ &\times \left( \frac{1 + \tanh_\lambda(\eta\xi')}{2} \frac{1 + \tanh_\lambda(\eta\xi'')}{2} \right)^{(M_1 + M_2)/2} \\ &\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh_\lambda(\eta\xi_{>})}{2}\right) \\ &\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh_\lambda(\eta\xi_{<})}{2}\right), \end{aligned} \quad (2.23)$$

où les symboles  $\xi_{>}$  et  $\xi_{<}$  dénotent le  $\max(\xi'', \xi')$  et le  $\min(\xi'', \xi')$  respectivement,  ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z)$  représente la fonction hypergéométrique. Nous avons utilisé également les abréviations suivantes :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda} - \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}, \\ M_{1,2} = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2 \lambda^2}}. \end{cases} \quad (2.24)$$

La fonction de Green radiale  $G_0(r'', r'; E)$  associée au potentiel à quatre paramètres (2.1)

pour  $\lambda \geq 1$  et dans l'intervalle  $]r_0, \infty[$  est donnée par

$$\begin{aligned}
G_0(r'', r'; E) &= \frac{m}{\hbar^2} \left[ \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \right] \frac{[f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\eta} \\
&\times \left[ \lambda^2 e^{-\eta(r''+r')} \right]^{(M_1+M_2)/2} \left[ (1 - \lambda e^{-\eta r''}) (1 - \lambda e^{-\eta r'}) \right]^{(M_1-M_2)/2} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \lambda e^{-\eta r''} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - \lambda e^{-\eta r'} \right).
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Le spectre d'énergie est obtenu à partir des pôles de la fonction de Green radiale (2.25) et qui sont aussi ceux de la fonction d'Euler  $\Gamma(M_1 - L_E)$  quand  $M_1 - L_E = -n_r$  pour  $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Ils sont donnés par l'équation

$$\frac{1}{2} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2 \lambda^2}} - \sqrt{\frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda} - \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} = -n_r \tag{2.26}$$

de sorte qu'on obtient les niveaux d'énergie

$$E_{n_r, 0}^{\lambda \geq 1} = -\frac{\hbar^2}{8m\lambda^2} \left( \frac{(P + \eta\lambda n_r)^2 - a - \lambda b}{P + \eta\lambda n_r} \right)^2, \tag{2.27}$$

où

$$P = \frac{\eta\lambda}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2 \lambda^2}} \right). \tag{2.28}$$

Afin de trouver les fonctions d'onde normalisées, nous effectuons l'approximation de la fonction d'Euler  $\Gamma(M_1 - L_E)$  au voisinage des pôles  $M_1 - L_E \approx -n_r$  comme suit :

$$\begin{aligned}
\Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\
&= \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{\hbar^2 \eta}{m} \frac{Q(P + \lambda\eta n_r - \lambda Q)}{(P + \lambda\eta n_r) (E - E_{n_r}^{(\lambda \geq 1)})},
\end{aligned} \tag{2.29}$$

où

$$Q = \frac{(P + n_r \lambda \eta)^2 - a - b \lambda}{2 \lambda (P + n_r \lambda \eta)} \quad (2.30)$$

et en tenant compte de la formule de transformation de Gauss (voir Gradshteyn et Ryzhik [16], Eq. (9.131.2), p. 1043)

$$\begin{aligned} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z) &= \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} {}_2F_1(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1; 1 - z) + (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \\ &\times \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} {}_2F_1(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1; 1 - z), \end{aligned} \quad (2.31)$$

dans laquelle le second terme de la relation (2.31) est nul du fait que la fonction d'Euler  $\Gamma(\alpha)$  est infinie ( $\alpha = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$ ). Ceci nous permet d'écrire la contribution de la partie discrète de la fonction de Green radiale sous la forme d'un développement spectral ainsi

$$G_0(r'', r'; E) = \sum_{n_r=0}^{n_{\max}} \frac{(\chi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r'))^* \chi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r'')}{E - E_{n_r}^{\lambda \geq 1}}. \quad (2.32)$$

Nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) \\ &= \left[ -\frac{2Q(P + n_r \lambda \eta - \lambda Q)}{(P + n_r \lambda \eta)} \frac{\Gamma\left(n_r + \frac{2P}{\lambda \eta}\right) \Gamma\left(n_r + \frac{2P}{\lambda \eta} - \frac{2Q}{\eta}\right)}{n_r! \Gamma\left(n_r - \frac{2Q}{\eta} + 1\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \frac{1}{\Gamma\left(\frac{2P}{\lambda \eta}\right)} (1 - \lambda e^{-\eta r})^{P/\lambda \eta} (\lambda e^{-\eta r})^{-Q/\eta} \\ &\times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + \frac{2P}{\lambda \eta} - \frac{2Q}{\eta}, \frac{2P}{\lambda \eta}; 1 - \lambda e^{-\eta r}\right). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Nous devons ensuite vérifier si les fonctions (2.33) satisfont les conditions aux limites suivantes :

$$\lim_{r \rightarrow r_0} r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = 0, \quad (2.34)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = 0. \quad (2.35)$$

Lorsque  $r \rightarrow r_0$ , il est clair que (2.33) remplit la condition d'hermiticité (2.34) de l'opérateur  $\widehat{P}_r$  associé à la composante radiale de la quantité de mouvement, mais, pour  $r \rightarrow \infty$ , nous devons imposer la condition que seules les fonctions d'onde (2.33) avec  $Q < 0$  remplissent la condition à la limite (2.35) et donc il peut être vu de (2.30) que  $n_r < (\sqrt{a + b\lambda} - P) / \lambda\eta$ . Les valeurs permises du nombre quantique radial  $n_r$  sont  $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, n_{r \max}$ . Le nombre d'états liés  $n_{r \max}$  étant déterminé par la relation  $n_{r \max} = \{(\sqrt{a + b\lambda} - P) / \lambda\eta\}$  où  $\{\kappa\}$  représente le plus grand entier inférieur à  $\kappa$ .

## 2.4 Deuxième Cas : $0 < \lambda < 1$ et $0 < r < \infty$

L'analyse présentée ci-dessus est valable, mais dans ce cas, la transformation spatiale (2.12) convertit  $r \in ]0, \infty[$  en  $\xi \in \left] \frac{1}{2\eta} \ln(1 - \lambda), +\infty[$ . Ceci signifie que le noyau (2.26) est le propagateur décrivant le mouvement d'une particule soumise à un potentiel du type Rosen-Morse  $\lambda$ -déformé sur la demi-droite  $\xi > \frac{1}{2\eta} \ln(1 - \lambda)$ . Comme une intégration directe des chemins n'est pas possible, le problème peut être résolu par une astuce qui consiste à introduire un terme auxiliaire représenté par une fonction  $-\delta$  de Dirac dans l'action contenue dans l'équation (2.21) pour former une barrière impénétrable [8] au point  $\xi = \xi_0 = \left(\frac{1}{2\eta}\right) \ln(1 - \lambda)$ . Alors, la fonction de Green (2.20) devient

$$\begin{aligned} G_0^\delta(r'', r'; E) &= \frac{i}{\hbar} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P^\delta(\xi'', \xi'; S) \\ &= [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}^\delta(\xi'', \xi'; \tilde{E}), \end{aligned} \quad (2.36)$$

où

$$G_{RM}^\delta(\xi'', \xi'; \tilde{E}) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P^\delta(\xi'', \xi'; S) \quad (2.37)$$

et

$$P_{RM}^{\delta}(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[ \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - V^{\delta}(\xi) \right] \right\}. \quad (2.38)$$

Cette intégrale de chemin (2.38) représente le propagateur d'une particule qui se déplace dans un potentiel de la forme :

$$V^{\delta}(\xi) = V^{RM}(\xi) - \frac{\alpha}{\eta} \delta(\xi - \xi_0); \quad \xi \in \mathbb{R}, \quad (2.39)$$

où  $V^{RM}(\xi)$  est le potentiel de Rosen-Morse (2.22). Comme il est tout à fait évident, vu la forme non triviale du potentiel (2.39), que l'intégrale de chemin (2.38) ne peut être directement effectuée. Par conséquent, nous avons trouvé qu'il est commode d'appliquer l'approche des perturbations en développant le facteur  $\exp \left( (i\alpha/\hbar\eta) \int_{s'}^{s''} \delta(\xi - \xi_0) ds \right)$  en une série de puissances. Ceci donne le développement en série suivant [12] :

$$\begin{aligned} P^{\delta}(\xi'', \xi'; S) &= P_{RM}(\xi'', \xi'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{i\alpha}{\hbar\eta} \right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \left[ \int_{s_i}^{s_{j+1}} ds_j \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_j \right] \\ &\quad \times P_{RM}(\xi_1, \xi'; s_1 - s_i) \delta(\xi_1 - \xi_0) P_{RM}(\xi_2, \xi_1; s_2 - s_1) \\ &\quad \times \dots \times \delta(\xi_{n-1} - \xi_0) P_{RM}(\xi_n, \xi_{n-1}; s_2 - s_1) \\ &\quad \times \delta(s_n - s_0) P_{RM}(s'', s_n; S - s_n) \\ &= P_{RM}(\xi'', \xi'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{i\alpha}{\hbar\eta} \right)^n \int_{s_i}^{s_f} ds_n \int_{s_i}^{s_n} ds_{n-1} \dots \int_{s_i}^{s_2} ds_1 \\ &\quad \times P_{RM}(\xi_0, \xi'; s_1 - s_i) P_{RM}(\xi_0, \xi_0; s_2 - s_1) \\ &\quad \times P_{RM}(\xi_0, \xi_0; s_n - s_{n-1}) P_{RM}(\xi'', \xi_0; S - s_n), \end{aligned} \quad (2.40)$$

où nous avons ordonné le temps de la manière suivante :  $s' = s_0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n < s_{n+1} = s''$ . Afin d'effectuer les intégrations successives sur les variables  $s_j$  dans (2.41), nous insérons (2.40) dans (2.37), et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de Fourier, nous arrivons à

$$G_{RM}^{\delta}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) = G_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) - \frac{G_{RM}(\xi'', \xi_0; \tilde{E}) G_{RM}(\xi_0, \xi'; \tilde{E})}{G_{RM}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}) - \frac{\eta}{\alpha}}, \quad (2.41)$$

où  $G_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E})$  est la fonction de Green (2.23) et il a été supposé que  $G_{RM}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E})$  existe effectivement .

Si nous prenons maintenant la limite  $\alpha \rightarrow -\infty$ , le système physique est assujéti à se déplacer dans le potentiel  $V^{RM}(\xi)$  délimité par une barrière infiniment répulsive [8, 10] au point  $\xi = \xi_0$ . Alors, la fonction de Green sur la demi-droite  $\xi > \xi_0$  est donnée par :

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) &= \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} G_{RM}^{\delta}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) \\ &= G_{RM}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) - \frac{G_{RM}(\xi'', \xi_0; \tilde{E}) G_{RM}(\xi_0, \xi'; \tilde{E})}{G_{RM}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E})}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de (2.42), c'est à dire, par l'équation  $G_{RM}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}) = 0$ , ou aussi bien par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(\nu + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon, \nu + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon, 2\frac{P}{\eta\lambda}; 1 - \lambda\right) = 0, \quad (2.43)$$

avec les notations suivantes :

$$\nu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, \quad \varepsilon = L_E + \frac{1}{2} = \sqrt{\frac{a}{\lambda^2\eta^2} + \frac{b}{\lambda\eta^2} + \nu^2}. \quad (2.44)$$

En général, une solution analytique de cette équation transcendante (2.44) est impossible. On peut envisager un calcul numérique pour connaître les niveaux d'énergie discrets.

En utilisant le lien entre (2.19) et (2.23), la formule de Gauss (2.31) et en revenant à la variable radiale par la transformation inverse de (2.12), nous obtenons les fonctions d'onde correspondantes aux états liés :

$$\begin{aligned}
\chi_{n_r}^{0 < \lambda < 1}(r) &= r \Psi_{n_r}^{0 < \lambda < 1}(r) \\
&= N \exp\left(-\sqrt{-\frac{2ME}{\hbar^2}} r\right) (1 - \lambda e^{-\eta r}) {}_2F_1\left(\nu + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon, \nu + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon, 2\nu + 1; \lambda e^{-\eta r}\right)
\end{aligned} \tag{2.45}$$

où  $N$  est un facteur constant.

## 2.5 Potentiel de Woods-Saxon généralisé

Dans le cas où le paramètre de déformation  $\lambda$  est négatif, la fonction potentielle à quatre paramètres est définie dans l'intervalle  $\mathbb{R}^+$  et elle peut s'écrire sous la forme suivante :

$$V_1(r) = \frac{2m}{\hbar^2} v_1(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} + \lambda)^2} - \frac{b}{e^{\eta r} + \lambda}, \tag{2.46}$$

où le signe moins est absorbé dans le paramètre  $\lambda$  et par conséquent ce dernier devient positif. La forme du potentiel nous dicte d'effectuer la transformation spatiale suivante :

$$r \rightarrow \xi, \quad r \in \mathbb{R}^+, \quad \xi \in \left] \frac{1}{2\eta} \ln(1 + \lambda), \infty \right[ ,$$

définie par

$$r = \frac{1}{\eta} \ln[\exp(2\eta\xi) - \lambda], \tag{2.47}$$

accompagnée de la fonction régulatrice

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)} = g'^2(\xi). \tag{2.48}$$

Après un calcul simple, nous montrons que la fonction de Green radiale, pour les états  $s$ , peut se mettre sous la forme suivante :

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P_0(\xi'', \xi'; S), \tag{2.49}$$

où

$$\tilde{E} = 2 \left[ E - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad (2.50)$$

et

$$P_0(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[ \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + A \coth_\lambda(\eta\xi) - \frac{B}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}. \quad (2.51)$$

Nous avons posé ici :

$$A = 2 \left[ E + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad B = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda} - b - \frac{\eta^2 \lambda}{4} \right) - \lambda E. \quad (2.52)$$

Suivant une procédure semblable à celle utilisée par Grosche [50], définissons une nouvelle variable  $y = \eta\xi - \ln \sqrt{\lambda}$ , et utilisons un nouveau pseudo-temps  $s' = \eta^2 s$ . Avec ces transformations, l'intégrale de chemin (2.51) devient

$$P_0(\xi'', \xi'; S) = \eta \int Dy(s') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{S'} ds' \left[ \frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{A}{\eta^2} \coth y - \frac{B}{\eta^2 \lambda \sinh^2 y} \right] \right\}. \quad (2.53)$$

Cette expression a la même forme que celle de l'intégrale de chemin associée au potentiel  $V^{MR}(y)$  introduit par Manning et Rosen [28] pour discuter les états de vibration de certaines molécules diatomiques. De plus,  $V^{MR}(y)$  a été utilisé pour décrire le problème de Kepler en géométrie hyperbolique [29]. Le potentiel de Manning et Rosen est défini pour  $y \in \mathbb{R}^+$ , mais, dans le cas présent, nous avons converti l'intégrale de chemin pour le potentiel (2.46) en une intégrale de chemin pour un potentiel du type Manning et Rosen au moyen de la transformation  $r \rightarrow r(y)$  qui réduit l'intervalle  $\mathbb{R}^+$  en  $\left] \frac{1}{2} \ln \left( 1 + \frac{1}{q} \right), +\infty \right[$ . Ceci signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite  $y > \frac{1}{2} \ln \left( 1 + \frac{1}{q} \right)$ . Nous considérons alors le problème de l'intégrale de chemin associée au potentiel de Manning et Rosen  $V^{MR}(y)$  défini sur la demi-droite  $y > y_0 = \frac{1}{2} \ln \left( 1 + \frac{1}{q} \right)$ . Pour calculer la fonction de Green, nous appliquons une procédure

analogue à celle employée dans le cas précédent. Nous obtenons donc

$$\begin{aligned}
\tilde{G}^{(MR)}\left(\xi'', \xi'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right) &= \frac{i}{\hbar\eta} \int_0^\infty dS' \exp\left(\frac{i\tilde{E}}{\hbar\eta^2}S'\right) P(\xi'', \xi'; S') \\
&= G^{(MR)}\left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right) - \frac{G^{(MR)}\left(y'', y_0; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right) G^{(MR)}\left(y_0, y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right)}{G^{(MR)}\left(y_0, y_0; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right)},
\end{aligned} \tag{2.54}$$

expression dans laquelle  $G^{(MR)}\left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right)$  est la fonction de Green relative au potentiel de Manning et Rosen standard. Comme sa solution exacte est connue, nous pouvons alors écrire directement le résultat

$$\begin{aligned}
G^{(MR)}\left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2}\right) &= \frac{m}{\hbar^2} \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\quad \times \left(\frac{2}{1 + \coth y'} \cdot \frac{2}{1 + \coth y''}\right)^{\frac{(M_1 + M_2 + 1)}{2}} \\
&\quad \times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \cdot \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1}\right)^{\frac{(M_1 - M_2)}{2}} \\
&\quad \times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, M_1 + L_E + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1}\right) \\
&\quad \times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, M_1 + L_E + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{\coth y_{<} + 1}\right),
\end{aligned} \tag{2.55}$$

où les notations suivantes ont été utilisées

$$L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2\eta^2}}, \quad M_{1,2} = \sqrt{\frac{a}{\lambda^2\eta^2} - \frac{b}{\lambda\eta^2} - \frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}. \tag{2.56}$$

Les niveaux d'énergie des états liés sont déterminés par les pôles de l'équation (2.54) et sont données par la condition de quantification

$${}_2F_1 \left( 1 + \tilde{\beta} + \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{P}{\eta\lambda}}, \tilde{\beta} + \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2} + \frac{P}{\eta\lambda}}, 2\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2} + 1}; \frac{\lambda}{\lambda + 1} \right) = 0. \quad (2.57)$$

C'est une équation transcendante impliquant la fonction hypergéométrique, où

$$\frac{P}{\eta\lambda} = \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2\lambda'^2}} \right), \quad (2.58)$$

et

$$\tilde{\beta} = \frac{M_1 + M_2}{2}. \quad (2.59)$$

Les fonctions d'onde des états liés correspondantes au spectre d'énergie donné par l'équation (2.57) ont la forme

$$\begin{aligned} \Psi_{n_r,0}^{\lambda>0}(r) &= N \left( \frac{e^{\eta r}}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\tilde{\beta}} \left( \frac{1}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2}}} \\ &\times {}_2F_1 \left( 1 + \tilde{\beta} + \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{P}{\eta\lambda}}, \tilde{\beta} + \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2} + \frac{P}{\eta\lambda}}, 2\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2\eta^2} + 1}; \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right), \end{aligned} \quad (2.60)$$

où  $N$  est un facteur constant.

## 2.6 Cas particuliers

### 2.6.1 Premier cas : potentiel écranté

En posant  $\lambda = 1$  et  $\eta = \nu$  dans la définition (2.1), nous obtenons le potentiel suivant :

$$V_S(r) = \frac{2m}{\hbar^2} v_S(r) = \frac{a}{(e^{\nu r} - 1)^2} - \frac{b}{e^{\nu r} - 1}, \quad (2.61)$$

avec  $a, b$  et  $\nu$  comme constantes positives définies par  $a = \nu^2 l(l+1)$ ,  $b = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - a$ ,  $V_0 = \nu Z e^2$ ,  $Z e^2$  étant la charge du noyau. Ce potentiel a été proposé par Manning et Rosen pour étudier

les états de vibration de molécules diatomiques [28].

Les paramètres (2.28) et (2.30) peuvent s'écrire donc

$$P = \nu l(l + 1) \quad (2.62)$$

et

$$Q = \frac{\nu N}{2} - \frac{mZe^2}{\hbar^2 N}; \quad N = n_r + l + 1. \quad (2.63)$$

Le spectre d'énergie discret et les fonctions d'onde normalisées peuvent être déduits à partir des équations (2.27) et (2.33),

$$E_N = -\frac{\hbar^2 \nu^2}{8m} \left( \frac{2mZe^2}{\hbar^2 \nu N} - N \right)^2, \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} \chi_N^{\lambda=1}(r) &= r \Psi_N^{\lambda=1}(r) \\ &= \left[ -\frac{2Q \left( N - \frac{Q}{\nu} \right) \Gamma(N + l + 1) \Gamma\left(l - \frac{2Q}{\nu} + l + 1\right)}{N \Gamma(N - l) \Gamma\left(N - \frac{2Q}{\nu} - l\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \frac{1}{\Gamma(2l + 2)} (1 - e^{-\nu r})^{l+1} e^{Qr} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(1 + l - N, N - \frac{2Q}{\nu} + l + 1, 2l + 2; 1 - e^{-\nu r}\right), \end{aligned} \quad (2.65)$$

où  $N = 1, 2, 3, \dots, N_{\max} < \left\{ \sqrt{\frac{2mZe^2}{\hbar^2 \nu}} \right\}$ .

Ces résultats coïncident avec ceux obtenus : (i) par la résolution de l'équation de Schrödinger [19]; (ii) depuis longtemps, à travers l'intégrale de chemin sur la variété du Groupe  $SU(1, 1)$  [30]; (iii) par la sommation de la représentation spectrale de la fonction de Green dépendant de l'énergie [31]; et, très récemment, (iv) via l'intégration des chemins sur la variété du groupe  $SU(2)$  [32].

## 2.6.2 Deuxième cas : potentiel de Woods-Saxon déformé

En faisant la substitution  $\lambda = qe^{\eta R}$  avec  $q > 0$  dans l'expression (2.46), nous obtenons le potentiel suivant qui est une forme particulière du potentiel de Woods-Saxon

$$V_{WS}(r) = \frac{W_0}{(e^{\eta(r-R)} + q)^2} - \frac{V_0}{e^{\eta(r-R)} + q}, \quad (2.66)$$

où  $V_0 = be^{-\eta R}$ ,  $W_0 = ae^{-2\eta R}$  et  $\eta R \gg 1$ . Le paramètre  $R$  est le rayon du potentiel nucléaire et  $\eta^{-1}$  est l'épaisseur de surface de la couche.

Dans ce cas, la condition de quantification pour les états liés peut être déterminée en utilisant la transformation de Gauss (2.31) et en remarquant que  $\frac{\lambda}{1+\lambda} \simeq 1$  pour  $\eta R \gg 1$ . Par conséquent dans cette approximation, l'équation (2.57) peut s'écrire ainsi

$$\frac{\Gamma(2\tilde{\beta}) \Gamma\left(1 + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} - \frac{P}{\eta\lambda} - \tilde{\beta}\right) \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} + \frac{P}{\eta\lambda} - \tilde{\beta}\right)}{\Gamma(-2\tilde{\beta}) \Gamma\left(1 + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} - \frac{P}{\eta\lambda} + \tilde{\beta}\right) \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} + \frac{P}{\eta\lambda} + \tilde{\beta}\right)} \left(\frac{e^{-\eta R}}{q}\right)^{-2\tilde{\beta}} = -1. \quad (2.67)$$

Pour simplifier la discussion de cette équation (2.67), nous considérons uniquement le cas où  $\tilde{\beta}^2 < 0$ , de telle sorte que, d'après l'équation (2.59),  $\tilde{\beta}$  devient imaginaire. En écrivant

$$\tilde{\beta} = i\mu \quad (2.68)$$

et en définissant  $\phi_1, \phi_2$  et  $\psi$  ainsi

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} + \frac{P}{\eta\lambda} + i\mu\right), \\ \phi_2 = \arg \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} - \frac{P}{\eta\lambda} + i\mu\right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (2.69)$$

nous pouvons écrire (2.67) sous la forme

$$\exp\left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan\left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} - \frac{P}{\eta\lambda}}\right)\right] \left(\frac{e^{-\eta R}}{q}\right)^{-2i\mu} = -1. \quad (2.70)$$

Ceci nous conduit à la condition de quantification

$$\mu(\eta R + \ln q) + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan\left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2} - \frac{P}{\eta\lambda}}}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \quad (2.71)$$

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

Si nous effectuons les remplacements  $a = 0$  et  $q = 1$ , le potentiel (2.66) devient le potentiel de Woods-Saxon [33]. La condition de quantification peut être déduite de l'équation (2.67),

$$\mu\eta R + \psi - 2\phi - \arctan\left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}}}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \quad (2.72)$$

où

$$\begin{cases} \mu = \frac{1}{\nu}\sqrt{V_0 + \frac{2mE}{\hbar^2}}, \\ \phi = \arg \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\nu^2}} + i\mu\right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (2.73)$$

et  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Ce résultat est en accord avec celui obtenu par la résolution de l'équation de Schrödinger [33].

### 2.6.3 Troisième cas : potentiel de Morse radial

En posant  $\lambda = 0$  dans l'expression (2.1), nous obtenons le potentiel de Morse radial :

$$V_M(r) = ae^{-2\eta r} - be^{-\eta r}, \quad (2.74)$$

avec les paramètres  $a$ ,  $b$  et  $\eta$  définis par  $a = (2m/\hbar^2) D_e e^{2\alpha r_e}$ ,  $b = (4m/\hbar^2) D_e e^{\alpha r_e}$  et  $\eta = \alpha$ .

Dans ce cas, il peut être vu des équations (2.28) et (2.45) que

$$\begin{cases} \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a}}{\alpha\lambda}, \\ \nu + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\alpha\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\longrightarrow} \infty \\ \nu + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{b}{2\alpha\sqrt{a}}}. \end{cases} \quad (2.75)$$

D'autre part, en utilisant la formule [53]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (2.76)$$

il est facile de montrer que, dans le cas limite  $\lambda \rightarrow 0$ , les fonctions d'onde (2.46) deviennent

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{0 < \lambda < 1}(r) &= r \Psi_{n_r}^{0 < \lambda < 1}(r) \\ &\underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} C \exp\left(-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} r\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r}\right) \\ &\times {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2}}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2}} + 1, \frac{2\sqrt{a}}{\alpha} e^{-\alpha r}\right). \end{aligned} \quad (2.77)$$

Ce sont en effet les fonctions d'onde radiales du potentiel de Morse. Le spectre d'énergie peut être déduit de la condition à la limite au point  $r = 0$ . En considérant  $a \gg 1$  et en utilisant le développement asymptotique, nous pouvons voir de (2.77) que la condition de quantification est donnée par

$$\frac{1}{2} - \frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2}} = -n_r. \quad (2.78)$$

Le spectre d'énergie de la molécule prend donc la forme

$$E_{n_r} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \left(\frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} - n_r - \frac{1}{2}\right)^2; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \left\{\frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} - \frac{1}{2}\right\}, \quad (2.79)$$

où  $\left\{\frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} - \frac{1}{2}\right\}$  représente le plus grand entier inférieur à  $\left(\frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} - \frac{1}{2}\right)$ .

Les fonctions d'onde (2.77) et le spectre d'énergie (2.79) peuvent être dérivés aussi d'une autre manière, en partant de la fonction d'onde (2.60) et en prenant la limite  $\lambda \rightarrow 0$ , nous pouvons voir que

$$\left\{ \begin{array}{l} P \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \sqrt{a}, \\ 1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} - \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} - \frac{b}{2\alpha\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2}}, \\ \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} + \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\alpha\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\longrightarrow} \infty, \end{array} \right. \quad (2.80)$$

et donc, en utilisant la formule (2.76), nous retrouvons les fonctions d'onde et le spectre d'énergie

des molécules diatomiques dans le potentiel de Morse. Comme prévu, le spectre d'énergie est une fonction continue par rapport au paramètre  $\lambda$  en passant à la limite  $\lambda \rightarrow 0$ .

## Chapitre 3

# Potentiels vecteur et scalaire généralisés de Hulthén et Woods-Saxon

### 3.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de traiter rigoureusement, par l'intermédiaire de l'approche des intégrales de chemin, le problème d'une particule relativiste sans spin et de charge ( $-e$ ) en présence d'un potentiel vecteur  $V_q(r)$  et un potentiel scalaire  $S_q(r)$  de la forme

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

où  $V_0$ ,  $S_0$  et  $\alpha$  sont des constantes réelles et positives telles que  $S_0 > V_0$  et  $q$  est un paramètre de déformation qui peut prendre des valeurs réelles quelconques. Ces potentiels sont appelés potentiels de Woods-Saxon généralisés pour  $q < 0$ , potentiels exponentiels pour  $q = 0$  et potentiels de Hulthén généralisés pour  $q > 0$ . Ils sont très utiles dans plusieurs branches de la physique (nucléaire, atomique et moléculaire). Le potentiel scalaire est ajouté au terme représentant la masse de la particule dans l'équation de Klein-Gordon qui peut être interprétée comme une masse effective dépendant de la position. Pour  $q = 1$ , les potentiels (3.1) se réduisent aux potentiels de Hulthén standard [24], dont la solution, à travers la résolution de l'équation

de Klein-Gordon associée aux ondes  $s$  [34] et dans le cadre des intégrales de chemin [35], a été obtenue depuis longtemps. Dans ces derniers temps, les potentiels (3.1) ont été analysés au moyen de différentes méthodes. Nous pouvons citer, à titre d'exemple, la résolution de l'équation de Klein-Gordon avec  $V_q(r)$  par la méthode de Nikiforov-Ouvarov [36]. Dans le même cadre, nous pouvons mentionner également le travail [37] sur le potentiel  $S_q(r)$ . De plus, les solutions de l'équation de Klein-Gordon relatives aux états liés avec les potentiels vecteur et scalaire (3.1) ont été obtenues à l'aide de l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique [38] et par la méthode d'itération asymptotique [39] pour les ondes  $s$ , c'est à dire, pour le moment angulaire  $l = 0$ , et en mécanique quantique standard pour les ondes  $l$  en utilisant une approximation particulière pour le terme centrifuge [40]. Ces dernières solutions approximatives ont été étendues au cas d'un système quantique dans un espace à  $D$  dimensions [41].

Cependant, nous devons signaler certaines inconséquences dans les récentes études contenues dans les références [36, 37, 38, 39, 40, 41]. Puisque leurs auteurs ont négligé que les potentiels  $V_q(r)$  et  $S_q(r)$  ont une forte singularité au point  $r = \frac{1}{\alpha} \ln q$  lorsque  $q \geq 1$  et ont donné des solutions pour le problème des états liés qui ne remplissent pas toujours les conditions aux limites, nous pensons que cela vaut la peine d'étudier de manière détaillée la solution du problème.

Dans le paragraphe qui suit, nous allons décrire brièvement l'intégrale de chemin en coordonnées polaires pour la fonction de Green associée à une particule chargée sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire qui possèdent la symétrie sphérique. Dans le troisième paragraphe, nous présentons l'évaluation de l'intégrale de chemin pour les potentiels de Hulthén généralisés ( $q > 0$ ) en distinguant deux cas :  $0 < q < 1$  et  $q \geq 1$ . Lorsque  $q \geq 1$  et  $\frac{1}{\alpha} \ln q < r < \infty$ , nous montrons que la fonction de Green radiale relative aux potentiels en question pour un état de moment cinétique orbital  $l$  se ramène à la fonction de Green pour le potentiel de Rosen-Morse  $q$ -déformé en utilisant  $\frac{1}{r^2} \approx \frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$  comme approximation du terme centrifuge et en appliquant la technique de transformation spatio-temporelle. L'expression analytique du spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes avec un facteur de normalisation correct pour  $l$  quelconque sont obtenues. Pour  $0 < q < 1$ , la fonction de Green radiale avec  $l = 0$  relative aux potentiels (3.1) dans l'intervalle  $]0, +\infty[$  est transformée en celle du potentiel de Rosen-Morse  $q$ -déformé qui est défini sur la demi-droite  $]\frac{1}{2\alpha} \ln(1 - q), +\infty[$ . Dans ce cas, nous calculons la fonction de Green en utilisant l'astuce employée dans le chapitre

précédent qui consiste à incorporer une perturbation représentée par une fonction  $\delta$  de Dirac. Les pôles de la fonction de Green donnent une équation transcendante qui permet de connaître les niveaux d'énergie discrets du système physique. Dans le quatrième paragraphe, nous construisons la fonction de Green correspondante également aux ondes  $s$  dans le cas des potentiels de Woods-Saxon généralisés ( $q < 0$ ) en convertissant l'intégrale de chemin relative à ces potentiels en celle du potentiel de Manning-Rosen  $q$ -déformé, défini sur l'intervalle  $]\frac{1}{2\alpha} \ln(1 + |q|), +\infty[$ . Ici, nous avons fait l'usage de la même approche à travers laquelle nous avons calculé la fonction de Green associée aux potentiels de Hulthén généralisés pour  $0 < q < 1$  et dans ce cas, une équation transcendante pour les niveaux d'énergie des états  $s$  peut être établie. Dans le cinquième paragraphe, les potentiels de Hulthén standard ( $q = 1$ ), les potentiels de Woods-Saxon ( $q = -e^{\alpha R}$ ), les potentiels exponentiels ( $q = 0$ ) et les potentiels de Coulomb ( $q = 1$  et  $\alpha \rightarrow 0$ ) sont étudiés comme des cas particuliers.

### 3.2 Fonction de Green

Afin de construire l'intégrale de chemin pour le problème d'une particule sans spin sous l'action des potentiels (3.1), considérons la fonction de Green correspondant à l'équation de Klein-Gordon

$$[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2] G(x'', x') = \delta^4(x'' - x'), \quad (3.2)$$

où  $eA = \begin{pmatrix} V_q(r) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$  et  $M$  est la masse d'une particule de charge  $(-e)$  dans l'espace-temps de Minkowski muni de la métrique  $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ . Pour résoudre ce problème, nous partons de la représentation intégrale de Schwinger qui consiste à écrire formellement la fonction de Green comme suit [12, 42, 43, 44, 45, 46, 47] :

$$G(x'', x') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \left\langle x'' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2} [(P - eA)^2 - (M + S_q)^2] \Lambda \right\} \right| x' \right\rangle. \quad (3.3)$$

Puisque les potentiels (3.1) sont du type Hulthén ou Woods-Saxon, nous avons un système à symétrie sphérique qui peut être convenablement décrit en coordonnées polaires. La fonction

de Green (3.3) peut être développée en ondes partielles

$$G(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (3.4)$$

où la fonction de Green radiale est donnée par

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} d\Lambda \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2] \Lambda \right\} | r', t' \rangle, \quad (3.5)$$

et  $P_l(\cos \Theta)$  est un polynôme de Legendre de degré  $l$  en  $\cos \Theta$  avec  $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\phi'' - \phi')$ . Suivant la référence [15], nous pouvons exprimer (3.5) comme une intégrale de chemin sous la forme discrète par rapport au pseudo-temps  $S'$ ,

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} dS' P_l(r'', t'', r', t'; S'), \quad (3.6)$$

où le propagateur transformé est donné sous la forme canonique compacte par

$$\begin{aligned} P_l(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} S' f_L(r) [-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2] f_R(r) \right\} | r', t' \rangle \\ &= f_R(r'') f_L(r') \int D r(s') D t(s') \int \frac{D P_r(s') D P_0(s')}{(2\pi)^2} \\ &\quad \times \exp \left\{ i \int_0^{S'} \left[ -P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r') (-P_r^2 + (P_0 - V)^2) - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S)^2 \right] f_R(r) ds' \right\}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Sous forme discrète, il s'écrit :

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n dt_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \\
&\times \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right], \tag{3.8}
\end{aligned}$$

dans lequel nous avons introduit les fonctions régulatrices  $f_L(r)$  et  $f_R(r)$  définies par Kleinert [15] ainsi

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r), \tag{3.9}$$

où  $\lambda$  est le paramètre de dédoublement. L'intégrale de chemin (3.8) comprend l'action élémentaire

$$\begin{aligned}
A_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[ -(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2 \right] f_R(r_{n-1}), \tag{3.10}
\end{aligned}$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_{s'} = \frac{S'}{N+1} = ds' = \frac{ds}{f_L(r_n) f_R(r_{n-1})}, \quad ds = \varepsilon_s = \frac{\Lambda}{N+1}. \tag{3.11}$$

Remarquons d'abord que les intégrations sur les variables  $t_n$  dans l'expression (3.8) produisent  $N$  distributions de Dirac  $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$ . Par la suite, après intégration sur les  $(P_0)_n$ , nous trouvons

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots (P_0)_{N+1} = E. \tag{3.12}$$

L'intégrale de chemin représentée par le propagateur  $P_l(r'', t'', r', t'; S')$  se réécrit alors

$$P_l(r'', t'', r', t'; S') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; S'), \tag{3.13}$$

où le noyau  $P_l(r'', r'; S')$  est donné par

$$P_l(r'', r'; S') = f_R(r'')f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right], \quad (3.14)$$

avec l'action élémentaire

$$A_2^n = -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[ -(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + (E - V_q(r_n))^2 - (M - S_q(r_n))^2 \right] f_R(r_{n-1}). \quad (3.15)$$

En substituant (3.13) dans (3.6), nous remarquons que le terme dépendant du temps  $t$  ne contient pas la variable pseudo-temporelle  $S'$ . Donc, nous pouvons réécrire la fonction de Green partielle (3.6) sous la forme

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (3.16)$$

où

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} dS' P_l(r'', r'; S'). \quad (3.17)$$

Afin de simplifier le calcul du noyau  $P_l(r'', r'; S')$ , posons le paramètre de dédoublement  $\lambda = \frac{1}{2}$ , c'est à dire, nous choisissons un développement de l'action et de la mesure autour du point moyen puisque le résultat final ne dépend d'aucun point [15]. Alors, en intégrant par rapport aux variables  $(P_r)_n$ , nous obtenons

$$P_l(r'', r'; S') = \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f(r_n)}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right\}, \quad (3.18)$$

avec l'action élémentaire dans l'espace des configurations donnée par

$$A_2^n = \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'} \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left( \left[ M - \frac{S_0}{e^{\alpha r_n} - q} \right]^2 - \left[ E + \frac{S_0}{e^{\alpha r_n} - q} \right]^2 + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right) \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}. \quad (3.19)$$

Cette intégrale de chemin (3.18) dépend du paramètre réel arbitraire de déformation  $q$  et ne peut pas être évaluée exactement à cause de la présence d'un terme centrifuge dans l'expression de l'action lorsque nous nous intéressons à l'étude des ondes  $l$ . Cependant, il a été montré [48, 49] que l'expression  $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$  peut être employée comme une très bonne approximation du terme centrifuge  $\frac{1}{r^2}$  lorsque le paramètre  $q \geq 1$  et  $\alpha r \ll 1$ .

Nous allons aborder dans ce qui suit le calcul de la fonction de Green (3.17) en distinguant quatre cas.

### 3.3 Potentiels de Hulthén généralisés

Lorsque le paramètre de déformation  $q$  est positif, les potentiels (3.1) représentent des formes générales du potentiel de Hulthén [24]. Si  $0 < q < 1$ , les potentiels (3.1) sont continus sur tout l'intervalle  $\mathbb{R}^+$ , mais, si  $q \geq 1$ , ils ont une forte singularité au point  $r = r_0 = \frac{1}{\alpha} \ln q$ , créant une barrière impénétrable, et dans ce cas, nous avons deux régions distinctes, l'une est définie par l'intervalle  $]0, r_0[$  et l'autre par l'intervalle  $]r_0, +\infty[$ . Ceci nous conduit à construire la fonction de Green radiale (3.17) par l'intégrale des chemins dans chaque cas.

#### 3.3.1 Premier cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$ .

Dans ce cas, nous allons discuter l'intégrale de chemin pour les potentiels (3.1) uniquement dans l'intervalle  $]r_0, +\infty[$  puisque, dans l'autre intervalle, la solution ne peut être obtenue analytiquement. De plus, elle est sans intérêt physique. Afin de construire l'intégrale de chemin pour un état de moment cinétique orbital  $l$ , nous remplaçons d'abord  $\frac{1}{r^2}$  par  $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2}$  comme une approximation du facteur  $\frac{1}{r^2}$  contenu dans le terme centrifuge et nous effectuons ensuite la transformation spatiale

$$r \in ]r_0, +\infty[ \rightarrow \xi \in ]-\infty, +\infty[$$

définie par

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln [\exp(2\alpha\xi) + q], \quad (3.20)$$

accompagnée de la fonction régulatrice appropriée

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\cosh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi). \quad (3.21)$$

Sous ces transformations, le noyau (3.18) devient

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S') &= [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \prod_{n=1}^N \left[ \int d\xi_n \right] \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta\xi_n)^2}{2\varepsilon_{s'}} + \frac{1}{8\varepsilon_{s'}} \left( \frac{g''^2}{g'^2} - \frac{2g'''}{3g'} \right) (\Delta\xi_n)^4 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \varepsilon_{s'} \alpha^2 \left( \frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + l(l+1) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \alpha^2 \left( \frac{\nu^2}{q} + q\epsilon^2 + \beta^2 \right) \frac{1}{\cosh_q^2(\alpha\xi_n)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \varepsilon_{s'} \alpha^2 \left( \epsilon^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - l(l+1) \right) \tanh_q(\alpha\xi_n) \right] \right\}, \quad (3.22) \end{aligned}$$

où les paramètres  $\epsilon$ ,  $\beta$  et  $\nu$  sont définis par

$$\epsilon = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E^2}; \quad \beta = \frac{1}{\alpha} \sqrt{2EV_0 + 2MS_0}; \quad \nu = \frac{1}{\alpha} \sqrt{S_0^2 - V_0^2}. \quad (3.23)$$

Dans les équations (3.21) et (3.22), nous avons utilisé les fonctions hyperboliques déformées introduites pour la première fois par Arai [25]

$$\cosh_q x = \frac{1}{2} (e^x + qe^{-x}); \quad \sinh_q x = \frac{1}{2} (e^x - qe^{-x}), \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}, \quad (3.24)$$

où  $q$  est un paramètre réel.

Notons que le terme en  $(\Delta\xi_n)^4$  apparaissant dans l'action contenue dans l'expression (3.22)

contribue de façon significative à l'intégrale de chemin. Il peut être estimé en utilisant la théorie des perturbations et remplacé par :

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left( \frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ \frac{i}{2\varepsilon_{s'}} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3\varepsilon_{s'}^2. \quad (3.25)$$

Le changement de variables  $u_n = \alpha\xi_n$  et  $\varepsilon_\sigma = \alpha^2\varepsilon_{s'}$  nous permet de mettre la fonction de Green (3.17), pour les états  $l$ , sous la forme :

$$G_l(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_l), \quad (3.26)$$

où

$$G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_l) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_l\sigma) P_{RM}^l(u'', u'; \sigma) \quad (3.27)$$

avec

$$\tilde{E}_l = -\left( \frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + l(l+1) + \frac{1}{4} \right), \quad (3.28)$$

et

$$P_{RM}^l(u'', u'; \sigma) = \int Du(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{u}^2}{2} - V_{RM}^l(u) \right] d\tau \right\} \quad (3.29)$$

est le propagateur associé au potentiel de Rosen-Morse [27] (ou potentiel de Pöschl-Teller modifié général) défini en termes des fonctions hyperboliques déformées ainsi

$$V_{RM}^l(u) = A_l \tanh_q(u) - \frac{B}{\cosh_q^2(u)}; \quad u \in \mathbb{R}. \quad (3.30)$$

Ici, nous avons posé

$$\begin{cases} A_l = \epsilon^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - l(l+1) - \frac{1}{4}; \\ B = \frac{1}{2} \left( q\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q} + \beta^2 - \frac{q}{4} \right). \end{cases} \quad (3.31)$$

Puisque la solution exacte de (3.27) est bien connue, nous pouvons donc écrire directement le résultat [50, 51, 52]

$$\begin{aligned}
G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_l) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{1 - \tanh_q u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh_q u''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left( \frac{1 + \tanh_q u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh_q u''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh_q u_>) \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh_q u_<) \right), \tag{3.32}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé les abréviations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{16} + 2E_{PT'} \right)^{\frac{1}{2}}; \\ E_{PT'} = \frac{1}{2} \left( \frac{\nu^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \epsilon^2 \right) - \frac{1}{32}; \\ M_1 = \epsilon + \delta_{l\pm} + \frac{1}{2}; \quad M_2 = \epsilon - \delta_{l\pm} - \frac{1}{2}, \end{array} \right. \tag{3.33}$$

avec

$$\delta_{l\pm} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{\nu^2}{q^2} + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \tag{3.34}$$

Dans la suite, nous devons prendre  $\delta_l = \delta_{l+}$ , pour éviter la chute de la particule sur le centre [53]. Compte tenu des relations entre les variables  $r$ ,  $\xi$  et  $u$ , la fonction de Green radiale  $G_l(r'', r')$  associée aux potentiels (3.1), pour  $q \geq 1$  et dans l'intervalle  $]r_0, +\infty[$  est alors donnée par

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r') &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \left( q^2 e^{-\alpha(r''+r')} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left[ \left( 1 - qe^{-\alpha r''} \right) \left( 1 - qe^{-\alpha r'} \right) \right]^{\frac{M_1 - M_2 + 1}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - qe^{-\alpha r'} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; qe^{-\alpha r''} \right). \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Le spectre d'énergie s'obtient à partir des pôles de la fonction de Green qui se présentent lorsque

$M_1 - L_E = -n_r$ , dans la fonction d'Euler  $\Gamma(M_1 - L_E)$  où  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . Ils sont donnés par l'équation

$$\epsilon_{n_r, l} = \frac{\beta^2 - q [(n_r + 1)^2 + (2n_r + 1)\delta_l + l(l + 1)]}{2q(n_r + \delta_l + 1)}. \quad (3.36)$$

Ensuite, de (3.36) et en utilisant (3.23), nous trouvons les niveaux d'énergie

$$E_{n_r, l}^{q \geq 1} = \frac{V_0}{2} \frac{\left[ N + l(l + 1) - \frac{2MS_0}{\alpha^2 q} \right]}{q \left[ N + l(l + 1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2 q^2} \right]} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + l(l + 1) + \frac{\nu^2}{q^2}}}{q \left[ N + l(l + 1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2 q^2} \right]} \times \sqrt{q [N + l(l + 1)] [4M(Mq + S_0) - \alpha^2 q (N + l(l + 1))]}, \quad (3.37)$$

où

$$N = (n_r + 1)^2 + (2n_r + 1)\delta_l. \quad (3.38)$$

Le nombre de niveaux discrets est égal au plus grand entier  $n_{r \max}$  qui satisfait à l'inégalité

$$n_{r \max} \leq \left\{ -\frac{1}{2} + \frac{1}{q\alpha} \sqrt{(2Mq + S_0 - V_0)(2Mq + S_0 + V_0)} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{S_0^2 - V_0^2}{\alpha^2 q^2}} \right\}. \quad (3.39)$$

Ici,  $\{k\}$  signifie le plus grand entier plus petit que  $k$ . L'existence des deux signes dans (3.37) est une propriété caractéristique des énergies en mécanique quantique relativiste. Son interprétation est évidente dans le domaine de la théorie quantique des champs. D'autre part, il est évident que, pour les états liés, nous devons imposer la condition que seules les fonctions d'onde  $\Psi_{n_r, l}(r)$  qui sont proportionnelles  ${}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh_q u))$  avec

$$L_E = -\frac{1}{2} + \left( \frac{\nu^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \epsilon^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{et} \quad M_1 \in \mathbb{R}, \quad (3.40)$$

soient permises. Il s'ensuit que

$$-(M + \frac{S_0}{q}) \leq E_{n_r, 0}^{q \geq 1} - \frac{V_0}{q} \leq M + \frac{S_0}{q}, \quad \text{et} \quad -M \leq E_{n_r, 0}^q \leq M. \quad (3.41)$$

Les fonctions d'onde correspondantes aux états liés peuvent être trouvées par approximation de la fonction d'Euler  $\Gamma(M_1 - L_E)$  au voisinage des pôles  $M_1 - L_E \approx -n_r$  :

$$\begin{aligned}
\Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\
&= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!} \frac{2\alpha^2 \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l})}{\tilde{n}(A^2 + 1) \left( \check{E}^2 - \left( E_{n_r, l}^{q \geq 1} \right)^2 \right)},
\end{aligned} \tag{3.42}$$

où

$$\epsilon_{n_r, l} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - \left( E_{n_r, l}^{q \geq 1} \right)^2}, \quad A = \frac{V_0}{\alpha q \tilde{n}}, \quad \tilde{n} = n_r + \delta_l + 1, \tag{3.43}$$

et

$$\check{E} = E + \frac{AM}{(A^2 + 1) \tilde{n}} \left[ \frac{S_0}{\alpha q} - \frac{\alpha}{2M} (N + l(l + 1)) \right]. \tag{3.44}$$

Alors, en utilisant le comportement (3.42) et tenant compte de la relation (2.31), nous remarquons que le second terme dans (3.42) est nul du fait que la fonction  $\Gamma(a)$  est infinie ( $a = -n_r$ ). Donc, il est possible de réécrire la fonction de Green (3.35) sous la forme d'un développement spectral

$$G_l(r'', r') = \sum_{n_r=0}^{n_{r\max}} \frac{u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r'') u_{n_r, l}^{q \geq 1*}(r')}{(A^2 + 1) \left( \check{E}^2 - \left( E_{n_r, l}^{q \geq 1} \right)^2 \right)}, \tag{3.45}$$

où les fonctions d'onde, convenablement normalisées, sont

$$\begin{aligned}
u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) \\
&= \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l}) \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1)}{\tilde{n} n_r! \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(2\epsilon_{n_r, l} + 1)} (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} (qe^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} \\
&\times {}_2F_1(-n_r, \tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1, 2\epsilon_{n_r, l} + 1; qe^{-\alpha r}).
\end{aligned} \tag{3.46}$$

En utilisant le lien entre les fonctions hypergéométriques et les polynômes de Jacobi (voir Gradshteyn et Ryzhik [16], p. 952, Eq. (8.406.1))

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1 \left( -n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-t}{2} \right), \tag{3.47}$$

nous pouvons aussi exprimer (3.47) sous la forme

$$u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r,l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r,l}) n_r! \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r,l} + \delta_l + 1)}{\tilde{n} \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r,l} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} \\ \times (qe^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r,l}} P_l^{(2\epsilon_{n_r,l}, 2\delta_l + 1)}(1 - 2qe^{-\alpha r}). \quad (3.48)$$

Ensuite, nous devons vérifier que les fonctions d'onde radiales (3.48) satisfont les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = 0, \quad (3.49)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = 0. \quad (3.50)$$

En effet, lorsque  $r \rightarrow r_0$ , il est clair que (3.48) remplit la condition d'hermiticité (3.49) de l'opérateur  $\hat{P}_r$  associé à la composante radiale de la quantité de mouvement. Mais, pour  $r \rightarrow \infty$ , nous devons imposer la condition qui fait que seulement les fonctions d'onde (3.48) avec  $\epsilon_{n_r,l} > 0$  remplissent la condition (3.50) si  $n_r$  satisfait la condition (3.39).

### 3.3.2 Deuxième cas : $0 < q < 1$ and $r \in \mathbb{R}^+$ .

L'analyse présentée ci-dessus est valable, mais dans ce cas, le changement de variable (3.20) transforme  $r \in \mathbb{R}^+$  en  $\alpha\xi = u \in ]\frac{1}{2} \ln(1 - q), +\infty[$ . Ceci signifie que le noyau (3.29), pour  $l = 0$ , est le propagateur qui décrit le mouvement d'une particule soumise à un potentiel du type Rosen-Morse  $q$ -déformé défini sur la demi-droite  $u > u_0 = \frac{1}{2} \ln(1 - q)$ . Comme un calcul direct par l'intégrale de chemin n'est pas possible, le problème peut être résolu à l'aide d'une astuce qui consiste à introduire un terme auxiliaire représenté par une fonction  $\delta$  de Dirac dans l'action contenue dans l'équation (3.29) pour former un mur impénétrable [8] au point  $u = u_0 = \frac{1}{2} \ln(1 - q)$ . Alors, la fonction de Green (3.27), pour  $l = 0$ , devient

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P^\delta(u'', u'; \sigma), \quad (3.51)$$

où

$$P^\delta(u'', u'; \sigma) = \int \mathcal{D}u(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{u}^2}{2} - V^\delta(u) \right] d\tau \right\}. \quad (3.52)$$

Cette intégrale de chemin (3.52) peut être interprétée comme étant le propagateur d'une particule soumise à un potentiel de la forme

$$V^\delta(u) = V_{RM}^0(u) - \eta\delta(u - u_0). \quad (3.53)$$

où  $V_{RM}^0(u)$  est l'expression du potentiel (3.30) correspondant à  $l = 0$ . Comme il est tout à fait apparent, vu la forme non triviale du potentiel (3.53), que le calcul par l'intégrale de chemin de l'équation (3.51) ne peut pas être effectué directement. Donc, nous trouvons qu'il convient d'appliquer l'approche des perturbations qui consiste à exprimer  $\exp\left[i\eta \int_{\tau'}^{\tau''} \delta(u - u_0)d\tau\right]$  en série de puissances. Alors, l'équation (3.52) peut s'écrire de cette façon :

$$\begin{aligned} P^\delta(u'', u'; \sigma) &= P_{RM}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\eta)^n}{n!} \prod_{j=1}^n \left[ \int_{\tau'}^{\tau_{j+1}} d\tau_j \int_{-\infty}^{+\infty} du_j \right] \\ &\quad P_{RM}^0(u_1, u'; \tau_1 - \tau') \delta(u_1 - u_0) P_{RM}^0(u_2, u_1; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\quad \times \delta(u_{n-1} - u_0) P_{RM}^0(u_n, u_{n-1}; \tau_n - \tau_{n-1}) \delta(u_n - u_0) \\ &\quad \times P_{RM}^0(u'', u_n; \tau'' - \tau_n) \\ &= P_{RM}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\eta)^n \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau_n \int_{\tau'}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_1 \\ &\quad P_{RM}^0(u_0, u'; \tau_1 - \tau') P_{RM}^0(u_0, u_0; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\quad \times P_{RM}^0(u_0, u_0; \tau_n - \tau_{n-1}) P_{RM}^0(u'', u_0; \tau'' - \tau_n), \end{aligned} \quad (3.54)$$

où nous avons ordonné le temps ainsi  $\tau' = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n < \tau_{n+1} = \tau''$  et  $\sigma = \tau'' - \tau'$ . Afin d'effectuer les intégrations successives sur les variables  $\tau_j$  dans l'équation (3.54), nous insérons (3.54) dans (3.51), et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de Fourier, il est possible d'écrire

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0) G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) - \frac{1}{\eta}}, \quad (3.55)$$

où  $G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0)$  est la fonction de Green associée au potentiel de Rosen-Morse déformé (3.29) pour  $l = 0$ . Ici, les quantités  $\tilde{E}_0$  et  $\delta_0$  sont données par

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4}\right), \\ \delta_0 = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{\nu^2}{q^2} + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (3.56)$$

Si maintenant nous prenons la limite  $\eta \rightarrow -\infty$ , le système physique est contraint de se mouvoir dans le potentiel  $V_{RM}^0(u)$  borné par une barrière infiniment répulsive [8, 9] au point  $u = u_0$ . Dans ce cas, la fonction de Green, pour  $l = 0$ , est alors donnée par

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0), \quad (3.57)$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0) &= \lim_{\eta \rightarrow -\infty} G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) \\ &= G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (3.58), c'est à dire, par l'équation  $G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)$ , ou encore par l'équation transcendante

$${}_2F_1(\delta + \epsilon - \tilde{Q}, \delta + \epsilon + \tilde{Q}, 2\delta; 1 - q) = 0, \quad (3.59)$$

où  $\delta = \delta_0 + 1$  et  $\tilde{Q} = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q}}$ . Cette équation transcendante peut être résolue numériquement pour connaître les niveaux d'énergie discrets de la particule.

En utilisant la relation entre (3.57) et (3.32) pour  $l = 0$ , la formule de transformation de Gauss (2.31) et en revenant à la variable radiale à l'aide de (3.20), nous obtenons, pour les fonctions d'onde correspondantes aux états liés, l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
u_0^{0 < q < 1}(r) &= r \Psi_0^{0 < q < 1}(r) \\
&= N (1 - qe^{-\alpha r})^\delta (qe^{-\alpha r})^\epsilon {}_2F_1(\delta + \epsilon - \tilde{Q}, \delta + \epsilon + \tilde{Q}, 2\delta; 1 - qe^{-\alpha r}),
\end{aligned} \tag{3.60}$$

où  $N$  est un facteur constant.

### 3.4 Potentiels de Woods-Saxon généralisés

Pour  $q < 0$ , les potentiels (3.1) représentent des formes générales du potentiel de Woods-Saxon [33] qui sont définies dans l'intervalle  $\mathbb{R}^+$  et elles peuvent s'écrire sous la forme :

$$V_{WS}^q(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} + q}, \quad S_{WS}^q(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} + q}, \tag{3.61}$$

où le signe moins est absorbé dans le paramètre  $q$  et par conséquent ce dernier devient positif.

Afin de ramener l'intégrale de chemin (3.18), pour  $l = 0$ , à une forme résoluble, nous procédons comme dans le paragraphe précédent. Nous effectuons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow \xi \in \left] \frac{1}{2\alpha} \ln(1 + q), +\infty \left[ \tag{3.62}$$

définie par

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln [\exp(2\alpha\xi) - q], \tag{3.63}$$

et nous introduisons la fonction régularisatrice

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\sinh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi). \tag{3.64}$$

Après quelques calculs simples et semblables à ceux effectués dans le paragraphe ci-dessus, la fonction de Green radiale (3.17) peut s'exprimer en termes de la nouvelle variable  $\xi$  et du nouveau temps  $S'$ . Alors, en changeant  $\alpha\xi$  en  $y = \alpha\xi - \ln \sqrt{q}$  et  $\varepsilon_{s'}$  en  $\alpha^{-2}\varepsilon_\sigma$ , nous pouvons écrire (3.17), pour les états  $s$ , sous la forme suivante :

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0), \quad (3.65)$$

où

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P_{MR}(y'', y'; \sigma), \quad (3.66)$$

et

$$P_{MR}(y'', y'; \sigma) = \int \mathcal{D}y(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{y}^2}{2} + A \coth y - \frac{B}{q \sinh^2 y} \right] d\tau \right\}. \quad (3.67)$$

Les constantes  $\tilde{E}_0$ ,  $A$  et  $B$  sont données par

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4}\right), \\ A = \frac{\nu^2}{q^2} - \epsilon^2 + \frac{1}{4}, \\ B = \frac{1}{2} \left(\frac{\nu^2}{q} + q\epsilon^2 - \beta^2 - \frac{q}{4}\right). \end{cases} \quad (3.68)$$

Le propagateur (3.67) a la même forme que l'intégrale de chemin associée au potentiel  $V_{MR}(y)$  introduit par Manning et Rosen [28] pour discuter les états de vibration des molécules diatomiques. Le potentiel de Manning-Rosen est défini pour  $y \in \mathbb{R}^+$ , mais, dans le cas présent, nous avons converti l'intégrale de chemin pour les potentiels (3.61) en une intégrale de chemin pour le potentiel du type Manning et Rosen au moyen de la transformation  $r \rightarrow r(y)$  qui étend  $\mathbb{R}^+ \rightarrow \left] \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{q}\right), +\infty \right[$ . Ceci signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite  $y > y_0 = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{q}\right)$ . Afin de calculer la fonction de Green, pour  $l = 0$ , nous procédons comme dans le paragraphe précédent et nous obtenons

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{MR}(y'', y_0; \tilde{E}_0)G_{MR}(y_0, y'; \tilde{E}_0)}{G_{MR}(y_0, y_0; \tilde{E}_0)}. \quad (3.69)$$

où  $G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0)$  est la fonction de Green associée au potentiel standard de Manning et Rosen [28]

$$V_{MR}(y) = -A \coth y + \frac{B}{q \sinh^2 y}; \quad y > 0. \quad (3.70)$$

Comme sa solution exacte est connue, nous pouvons alors écrire directement le résultat [50]

$$\begin{aligned} G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\ &\times \left( \frac{2}{1 + \coth y''} \frac{2}{1 + \coth y'} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\ &\times \left( \frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \end{aligned} \quad (3.71)$$

où les abréviations suivantes ont été utilisés

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{2(A - \tilde{E}_0)} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}}, \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} \left( 2\sqrt{\frac{2B}{q} + \frac{1}{4}} \pm \sqrt{-2(A + \tilde{E}_0)} \right) = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}} \pm \epsilon. \end{array} \right. \quad (3.72)$$

Les symboles  $y_{>}$  and  $y_{<}$  représentent  $\max(y'', y')$  and  $\min(y'', y')$  respectivement et  ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z)$  est la fonction hypergéométrique.

Les niveaux d'énergie des états liés sont déterminés par les pôles de l'équation (3.69), c'est à dire, par l'équation  $G_{MR}(y_0, y_0; \tilde{E}) = 0$ , où encore par la condition de quantification suivante qui est une équation transcendante comprenant la fonction hypergéométrique

$${}_2F_1\left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + \delta + Q, 2\epsilon + 1; \frac{q}{q+1}\right) = 0, \quad (3.73)$$

avec

$$\delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}}, \quad Q = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}}. \quad (3.74)$$

En utilisant la fonction de Green (3.71) relative au potentiel de Manning et Rosen et le lien

entre (3.66) et (3.71), nous trouvons que les fonctions d'onde correspondantes aux états liés sont données par

$$U_0(r) = N \left( \frac{1}{e^{\alpha r} + q} \right)^\epsilon \left( \frac{1}{1 + qe^{-\alpha r}} \right)^Q {}_2F_1 \left( 1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + \delta + Q, 2\epsilon + 1; \frac{q}{e^{\alpha r} + q} \right), \quad (3.75)$$

où  $N$  est un facteur constant.

## 3.5 Cas particuliers

### 3.5.1 Premier cas : potentiels de Hulthén standard

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

$$V_1(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - 1}, \quad S_1(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - 1}. \quad (3.76)$$

Le paramètre  $\delta_l$  défini par l'expression (3.34) peut s'écrire

$$\delta_l = -\frac{1}{2} + \sqrt{\nu^2 + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \quad (3.77)$$

Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits respectivement à partir des équations (3.37) et (3.48),

$$E_{n_r, l}^{q=1} = \frac{V_0 \left[ N + l(l+1) - \frac{2MS_0}{\alpha^2} \right]}{2 \left[ N + l(l+1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2} \right]} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + l(l+1) + \nu^2}}{\left[ N + l(l+1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2} \right]} \times \sqrt{[N + l(l+1)] [4M(M + S_0) - \alpha^2 (N + l(l+1))]}, \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned} u_{n_r, l}^{q=1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q=1}(r) \\ &= \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l}) \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1)}{\tilde{n} n_r! \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \frac{1}{\Gamma(2\epsilon_{n_r, l} + 1)} (1 - e^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} (e^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} \\ &\quad \times {}_2F_1(-n_r, \tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1, 2\epsilon_{n_r, l} + 1; e^{-\alpha r}). \end{aligned} \quad (3.79)$$

Dans le cas des ondes s ( $l = 0$ ), ces résultats coïncident avec ceux obtenus également par l'approche des intégrales de chemin dans la Ref. [35] .

### 3.5.2 Deuxième cas : potentiel vecteur de Hulthén généralisé

Quand  $S_0 = 0$  et  $V_0 \neq 0$ , les expressions (3.1) se réduisent au potentiel vecteur de Hulthén déformé. Dans le cas où  $q \geq 1$ , le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits aussi à partir des équations (3.37) et (3.48) ainsi :

$$E_{n_r, l}^{q \geq 1} = \frac{V_0}{2q} \pm \kappa \sqrt{\frac{M^2}{\kappa^2 + 4V_0^2} - \frac{1}{16q^2}}, \quad (3.80)$$

et

$$\begin{aligned} u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) \\ &= \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l}) n_r! \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1)}{\tilde{n} \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} \\ &\quad \times (qe^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} P_l^{(2\epsilon_{n_r, l}, 2\delta_l + 1)}(1 - 2qe^{-\alpha r}), \end{aligned} \quad (3.81)$$

avec  $\kappa = \alpha q (2n_r + 1) + 2\alpha q \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - \frac{V_0^2}{\alpha^2 q^2}}$ .

### 3.5.3 Troisième cas : potentiels de Woods-Saxon

En prenant  $q = e^{\alpha R}$  et en admettant  $\alpha R \gg 1$ , il est possible d'obtenir à partir de (3.61) les potentiels bien connus de Woods-Saxon

$$V_{WS}(r) = -\frac{\tilde{V}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad S_{WS}(r) = -\frac{\tilde{S}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad (3.82)$$

where  $\tilde{V}_0 = V_0 e^{-\alpha R}$  and  $\tilde{S}_0 = S_0 e^{-\alpha R}$ . Le paramètre  $R$  est la largeur du potentiel et  $\alpha^{-1}$  est l'épaisseur de surface.

Dans ce cas, la condition de quantification pour les états s peut être déterminée à l'aide de la formule de transformation de Gauss (2.31) et en notant que  $\frac{q}{q+1} \simeq 1$  pour  $\alpha R \gg 1$ . En

appliquant cette approximation, l'équation (3.73) s'écrit, après quelques calculs simples,

$$\frac{\Gamma(2Q)\Gamma(1 + \epsilon - \delta - Q)\Gamma(\epsilon + \delta - Q)}{\Gamma(-2Q)\Gamma(1 + \epsilon - \delta + Q)\Gamma(\epsilon + \delta + Q)} (e^{-\alpha R})^{-2Q} = -1. \quad (3.83)$$

Afin de simplifier l'analyse de cette équation, nous nous limiterons au cas où  $Q^2 < 0$ , qui conformément à (3.74) implique que  $-M < E < -M + \tilde{S}_0 - \tilde{V}_0$  ou  $M - \tilde{S}_0 - \tilde{V}_0 < E < M$  et donc  $Q$  apparaît comme une quantité purement imaginaire. En posant

$$Q = i\mu \quad (3.84)$$

et en définissant  $\phi_1, \phi_2$  et  $\psi$  ainsi

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma(\epsilon + \delta + i\mu), \\ \phi_2 = \arg \Gamma(\epsilon - \delta + i\mu), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (3.85)$$

nous pouvons réécrire l'équation (3.83), après quelques calculs élémentaires, sous la forme :

$$\exp \left[ 2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left( \frac{\mu}{\epsilon - \delta} \right) \right] (e^{-\alpha R})^{-2i\mu} = -1, \quad (3.86)$$

celle-ci conduit à la condition de quantification suivante :

$$\mu\alpha R + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan \left( \frac{\mu}{\epsilon - \delta} \right) = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (3.87)$$

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

### 3.5.4 Quatrième cas : potentiels exponentiels

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

$$V(r) = -V_0 e^{-\alpha r}; \quad S(r) = -S_0 e^{-\alpha r}, \quad (3.88)$$

avec les paramètres  $V_0, S_0$  et  $\alpha$  définis par  $V_0 = \tilde{V}_0 e^{\alpha r_0}, S_0 = \tilde{S}_0 e^{\alpha r_0}$  et  $\alpha = \frac{\eta}{r_0}$ , où  $\tilde{V}_0$  et  $\tilde{S}_0$  sont les profondeurs des potentiels vecteur et scalaire,  $r_0$  est la distance d'équilibre des deux noyaux de la molécule diatomique.

Dans ce cas, nous pouvons voir à partir des équations (3.74) que

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, \quad Q \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q}, \\ 1 + \epsilon + Q - \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} \\ \epsilon + Q + \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \underset{q \rightarrow 0}{\rightarrow} \infty. \end{array} \right. \quad (3.89)$$

D'autre part, en tenant compte de la formule [53]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1 \left( \alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta} \right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (3.90)$$

il est facile de montrer qu'à la limite  $q \rightarrow 0$ , les fonctions d'onde (3.75) deviennent

$$U_0^{q=0}(r) = N (e^{-\alpha r})^\epsilon \exp(-\nu e^{-\alpha r}) {}_1F_1 \left( \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu}, 2\epsilon + 1; 2\nu e^{-\alpha r} \right). \quad (3.91)$$

Le spectre d'énergie peut être déduit de la condition à la limite au point  $r = 0$ . En considérant  $\alpha r_0 \gg 1$  et en utilisant le comportement asymptotique, nous pouvons voir à partir de (3.91) que la condition de quantification de l'énergie est donnée par :

$$\frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.92)$$

Nous pouvons combiner les expressions (3.23) et (3.92) donnant les niveaux d'énergie :

$$E_{n_r}^{q=0} = \frac{\alpha^2 \nu V_0}{S_0^2} \left[ \lambda_{n_r} \pm \sqrt{\lambda_{n_r}^2 - \frac{V_0^2}{S_0^2} \left( \lambda_{n_r} + \frac{M}{\alpha} \right) \left( \lambda_{n_r} - \frac{M}{\alpha} \right)} \right], \quad (3.93)$$

où

$$\lambda_{n_r} = n_r - \frac{MS_0}{\alpha^2 \nu} + \frac{1}{2}. \quad (3.94)$$

Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus récemment à travers la résolution de l'équation de Klein-Gordon [54] et par application de la méthode d'itération asymptotique [55]. Notons

que les fonctions d'onde (3.91) et le spectre d'énergie (3.93) peuvent être obtenus aussi d'une autre manière. En partant des fonctions d'onde (3.60) et en passant à la limite  $q \rightarrow 0$ , nous pouvons voir que

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, \quad \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q}, \\ \delta + \epsilon - \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} \\ \delta + \epsilon + \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon + \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \underset{q \rightarrow 0}{\rightarrow} \infty. \end{array} \right. \quad (3.95)$$

Ensuite, en utilisant la formule (3.90), nous retrouvons les fonctions d'onde (3.91) et donc l'expression (3.93) du spectre d'énergie. Comme on s'attendait, le spectre d'énergie est une fonction continue par rapport au paramètre  $q$  en passant par la valeur  $q = 0$ .

### 3.5.5 Cinquième cas : potentiels de Coulomb

Lorsque  $q = 1$ , si, de plus  $\alpha$  tend vers zéro, les potentiels (3.1) tendent vers

$$V_c(r) = -\frac{A_1}{r}; \quad S_c(r) = -\frac{A_2}{r}. \quad (3.96)$$

En effectuant les substitutions suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} l \Rightarrow j, \\ \frac{V_0}{\alpha} \Rightarrow A_1, \\ \frac{S_0}{\alpha} \Rightarrow A_2, \\ \delta \Rightarrow \lambda, \\ n_r + 1 \Rightarrow n, \end{array} \right. \quad (3.97)$$

et en faisant tendre  $\alpha$  vers zéro, la formule (3.78) donne en effet :

$$\frac{E_{n,l}}{M} = -\frac{A_1 A_2}{\hat{n}^2 + A_1^2} \pm \left[ \left( \frac{A_1 A_2}{\hat{n}^2 + A_1^2} \right)^2 + \frac{\hat{n}^2 - A_2^2}{\hat{n}^2 + A_1^2} \right], \quad (3.98)$$

où  $\hat{n} = n + \lambda$ . Ce résultat coïncide avec celui obtenu dans le cadre de la variante de Milshtein et Strakhovenko [56] de l'algèbre de Lie  $so(2,1)$ .

Les fonctions d'onde correspondantes sont déduites à partir de (3.81) en prenant en considération la formule de transformation de Gauss (2.31) et en utilisant la formule (3.90). On

obtient finalement :

$$\begin{aligned}
u_{n_r, l}^c(r) &= r\Psi_{n_r, l}^c(r) \\
&= (-1)^{n_r} \left[ \frac{4\kappa^3 \Gamma(n_r + 2\delta_l + 2)}{n_r! (n_r + \delta_l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} (2\kappa r)^{\delta_l} \\
&\quad \times e^{-\kappa r} {}_1F_1(-n_r, 2\delta_l + 2, 2\kappa r),
\end{aligned} \tag{3.99}$$

où  $\kappa = \sqrt{M^2 - E_{n_r, l}^2}$  et  $n_r = 0, 1, 2, \dots, \infty$ .

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde d'une particule chargée en présence d'un potentiel vecteur [35] peuvent être retrouvées lorsque nous posons  $A_2 = 0$ .

# Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement précis par l'approche des intégrales de chemin de deux systèmes dynamiques. Le premier, dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, a concerné l'étude d'une particule soumise à un potentiel diatomique à quatre paramètres et le second, dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, a trait à l'analyse d'une particule de masse  $M$  et de charge  $(-e)$  en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire dépendant d'un même paramètre réel de déformation. La forme du potentiel diatomique ou des potentiels vecteur et scalaire dépend du paramètre de déformation qui délimite la définition du potentiel et modifie par conséquent les conditions aux limites imposées aux solutions du problème. L'expression des fonctions de Green est ramenée par une transformation de coordonnée accompagnée d'une transformation temporelle à celle associée au potentiel de Rosen-Morse ou au potentiel de Manning-Rosen suivant que le paramètre de déformation est positif ou négatif. Pour un paramètre de déformation supérieur ou égal à l'unité, le calcul de l'intégrale de chemin est immédiat. Les fonctions de Green sont obtenues sous forme compacte. Les spectres analytiques d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés sont alors obtenus à partir des pôles de la fonction de Green et de leurs résidus, respectivement. Lorsque le paramètre de déformation est négatif ou compris entre zéro et l'unité, l'évaluation de la fonction de Green n'est pas directe à cause du problème des conditions aux limites de Dirichlet. Dans ces cas, la particule soumise au potentiel de Rosen-Morse ou à celui de Manning-Rosen qui résultent comme conséquence de l'application de la technique de transformation spatio-temporelle, est contrainte à se déplacer sur une demi-droite limitée à un point d'abscisse supérieure à zéro. Pour traduire ces conditions aux limites dans le cadre des intégrales de chemin, il convient d'incorporer un potentiel d'interaction  $\delta$ -fonction de Dirac dans l'expression de l'action. Nous

avons montré que la construction de la fonction de Green peut être faite par l'approche des perturbations. En considérant ensuite la force de la perturbation  $\delta$ -fonction de Dirac infiniment répulsive, on a reproduit la condition d'un mouvement sur une demi-droite. La fonction de Green a été obtenue sous la forme d'une somme de deux termes compacts. Dans les deux cas, les conditions de quantification de l'énergie sont définies par des équations transcendantes impliquant la fonction hypergéométrique qu'il faut traiter numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie. Nous avons également extrait les fonctions d'onde.

Il faut mentionner aussi que nos résultats sont indiscutablement corrects puisque plusieurs cas particuliers bien connus dans la littérature ont été considérés comme preuve. Donc, nous devons écarter les solutions proposées dans les références [23, 36, 37, 38, 39, 40, 41] entièrement.

Pour terminer, il faut souligner que l'application de l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique [23, 38] et la méthode de Nikiforov-Ouvarov [36, 37] ne conviennent pas dans le cas où le paramètre de déformation est négatif ou compris entre zéro et l'unité.

# Bibliographie

- [1] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [2] P. M. A. Dirac, *The principles of quantum mechanics* (Oxford Clarindon press, London, 1958).
- [3] W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys., **33** (1925) 879; M. Born et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys., **34** (1925) 858; M. Born , W. Heisenberg et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys., **35** (1926) 557; P. M. A. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A 109** (1925) 642.
- [4] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [5] I. H. Duru et H. Kleinert, Phys. Lett. **B 84** (1979) 185; Fortschr. Phys. **30** (1982) 401.
- [6] C. Grosche et F. Steiner, *A table of Feynman path integrals*, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1998).
- [7] A. O. Barut et I. H. Duru, Phys. Rev. **A 38** (1988) 5906.
- [8] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, Phys.Rev. **D 22** (1980) 3012.
- [9] M. Carreau, J. Math. Phys. **33** (1992) 4139; M. Carreau, E. Farhi et S. Gutmann, Phys. Rev. **D 42** (1990) 1194.
- [10] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1.
- [11] D. Bauch, Nuovo Cimento **B 85** (1985) 118.
- [12] R. P. Feynman et A. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [13] C. Grosche, J. Phys. A : Math. Gen. **23** (1990) 5205.
- [14] S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Phys. Lett. **A 131** (1988) 8.

- [15] H. Kleinert, *Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics and financial markets* (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).
- [16] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of integrals, series and products* (Academic Press, New York, 1965).
- [17] F. Constantinescu et E. Magyari, *Problems in quantum mechanics* (Pergamon press, Oxford, 1978) p. 399, Eq. (30).
- [18] O. P. Bahethi et M. G. Fuda, J. Math. Phys. **12** (1971) 2076 ; C. S. Lam, Y. P. Varshni, Phys. Rev. **A 4** (1971) 1874 ; H. Haeringen, Phys. Rev. **A 18** (1978) 56 ; B. Durand et L. Durand, Phys. Rev. **D 23** (1981) 1092 ; R. Dutt et P. Varshni, J. Math. Phys. **24** (1983) 2770 ; L. Hall, Phys. Rev. **A 32** (1983) 263.
- [19] J. Lindhard et A. Winther, Nucl. Phys. **A 166** (1971) 413 ; U. Myhrman, J. Math. Phys. **21** (1980) 1732 ; J. Phys. A : Math. Gen. **166** (2001) 4281.
- [20] A.A. Berezin, Phys. Stat. Sol. (**B**) **50** (1972) 71 ; J. Phys. C : Solid State Phys. **12** (1979) L363 ; Phys. Rev. **B 33** (1986) 2122.
- [21] J. Grunniger, J. Chem. Phys. **55** (1971) 3561 ; K. Szalwicz et H.J. Mokhorst, J. Chem. Phys. **75** (1981) 5785 ; G. Malli, Chem. Phys. Lett. **26** (1981) 578.
- [22] J. X. Sun, Acta Phys. Sin. **48** (1999) 1992.
- [23] C. S. Jia, J.Y. Wang, S. He et L. T. Sun, J. Phys. A : Math. Gen. **33** (2000) 6993.
- [24] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. **28A** (1942) 5.
- [25] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. **158** (1991) 63 ; J. Phys. A : Math. Gen. **34** (2001) 4281.
- [26] B. S. Dewitt, Rev. Mod. Phys. **29** (1957) 377 ; D. W. Mc Laughlin et L. S. Schulman, J. Math. Phys. **12** (1971) 2520.
- [27] N. Rosen et P. M. Morse, Phys. Rev. **42** (1932) 210.
- [28] M. F. Manning et N. Rosen, Phys. Rev. **44** (1933) 953.
- [29] L. Infeld et A. Schild, Phys. Rev. **67** (1945) 121.
- [30] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, J. Math. Phys. **32** (1991) 441.
- [31] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, Il Nuovo Cimento **B 113** (1998) 81.

- [32] A. Diaf, A. Chouchaoui et R. J. Lombard, *Ann. Phys. (NY)* **317** (2005) 354.
- [33] S. Flügge, *Practical quantum mechanics* (Springer Verlag, Berlin, 1974).
- [34] F. Dominguez Adame, *Phys. Lett. A* **136** (1986) 175.
- [35] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, *Physica A* **234** (1996) 289.
- [36] M. Simsek et H. Egrifes, *J. Phys. A : Math. Gen.* **37** (2004) 4379.
- [37] H. Egrifes et R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **46** (2007) 935.
- [38] G. Chen, Z. D. Chen et Z. M. Lou, *Phys. Lett. A* **331** (2004) 374.
- [39] E. Ölgar, R. Koç et H. Tütüncüler, *Phys. Scr.* **78** (2008) 015011.
- [40] W. C. Qiang, R. S. Zhou et Y. Gao, *Phys. Lett. A* **371** (2007) 201.
- [41] N. Saad, *Phys. Scr.* **76** (2007) 623.
- [42] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **80** (1950) 440.
- [43] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82** (1951) 664.
- [44] L. S. Schulman, *Techniques and applications of path integration* (Wiley, New York, 1981).
- [45] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Phys. Scr.* **42** (1992) 440.
- [46] B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Il Nuovo Cimento B* **111** (1996) 99.
- [47] M. T. Chefrou, F. Benamira et L. Guechi, *Eur. Phys. J. C* **28** (2003) 395.
- [48] A. Zouache, Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009, Université Mentouri de Constantine.
- [49] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 032301.
- [50] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38** (2005) 2947.
- [51] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **48** (2007) 032102.
- [52] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *Ann. Phys. (NY)* **332** (2007) 2179.
- [53] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [54] G. Chen, *Phys. Lett. A* **339** (2009) 300.
- [55] F. Taskin, I. Boztosun et O. Bayrak, *Int. J. Theor. Phys.* **47** (2008) 1612 .
- [56] A. N. Vaidya et L. E. Silva Souza, arXiv : hep-th/0203133, 2002.

# Annexe



# Unified path integral treatment for generalized Hulthén and Woods–Saxon potentials

F. Benamira, L. Guechi \*, S. Mameri, M.A. Sadoun

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

Received 16 September 2006; accepted 30 January 2007

Available online 6 February 2007

---

## Abstract

A rigorous path integral discussion of the  $s$  states for a diatomic molecule potential with varying shape, which generalizes the Hulthén and the Woods–Saxon potentials, is presented. A closed form of the Green's function is obtained for different shapes of this potential. For  $\lambda \geq 1$  and  $(1/\eta) \ln \lambda < r < \infty$ , the energy spectrum and the normalized wave functions of the bound states are derived. When the deformation parameter  $\lambda$  is  $0 < \lambda < 1$  or  $\lambda < 0$ , it is found that the quantization conditions are transcendental equations that require numerical solutions. The special cases corresponding to a screened potential ( $\lambda = 1$ ), the deformed Woods–Saxon potential ( $\lambda = qe^{\eta R}$ ), and the Morse potential ( $\lambda = 0$ ) are likewise treated.

© 2007 Elsevier Inc. All rights reserved.

*PACS:* 03.65.Ca-Formalism; 03.65.Db-Functional analytical methods

*Keywords:* Generalized Hulthén potential; Generalized Woods–Saxon potential; Morse potential; Path integral; Bound states

---

## 1. Introduction

Central potentials play an essential role in microscopic fields since they are widely used as an approximation of the interaction potential in a number of areas in physics and chemistry, including nuclear [1], atomic [2] and molecular [3] physics and quantum chemistry [4].

---

\* Corresponding author.

*E-mail address:* [Guechilarbi@yahoo.fr](mailto:Guechilarbi@yahoo.fr) (L. Guechi).

Let us mention one of these potentials, the four-parameter potential introduced by Sun in 1999 as an alternative to the Morse potential for fitting the experimental RKR potential curves of a set of diatomic molecule systems including the  $X^1\Sigma_g$  ground state of  ${}^7\text{Li}_2$ , two kinds of metal dimers and six kinds of non-metal diatomic molecules [5]. This potential function has the form:

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

with  $a$ ,  $b$ ,  $\eta$  and  $\lambda$  as the real constants defined by  $a = (2m/\hbar^2)D_e(e^\alpha - \lambda)^2$ ,  $b = (4m/\hbar^2)D_e(e^\alpha - \lambda)$  and  $\eta = \alpha/r_e$ , where  $D_e$  is the depth of the potential well,  $r_e$  is the equilibrium distance of the two nuclei and  $\lambda$  is the shape parameter. If  $\lambda = 0$ , we have the ordinary Morse potential. In the case where  $\lambda > 0$ , the potential (1) may be called “generalized Hulthén potential” and “generalized Woods–Saxon potential” if  $\lambda < 0$ .

A treatment of this potential has been presented recently within the shape invariance approach and the supersymmetric WKB quantization method [6], but it involved several incorrect manipulations so that the obtained solutions for the bound state problem has not proved satisfactory since, on the one hand, the potential (1) has a strong singularity at the point  $r = (1/\eta) \ln \lambda$  and on the other hand the boundary conditions are not fulfilled when  $r \rightarrow 0$  and when  $r \rightarrow (1/\eta) \ln \lambda$ . Since it is easy to see that the connection to supersymmetric quantum mechanics with this potential is not possible whatever the deformation parameter  $\lambda$  may be, we think that it is worthwhile to discuss in detail the solutions for the  $s$  states of the problem in terms of the path integral formalism.

Our study is organized in the following way: In Section 2, we construct the path integral associated with the generalized Hulthén potential ( $\lambda > 0$ ) by distinguishing the cases  $\lambda \geq 1$  and  $0 < \lambda < 1$ . For  $\lambda \geq 1$  and  $(1/\eta) \ln \lambda < r < \infty$ , it is shown that the Green’s function for the potential under consideration is brought back to the  $\lambda$ -deformed Rosen–Morse potential Green’s function by applying only the space–time transformation technique. The analytic solution of the energy spectrum and the corresponding wave functions with a correct normalization factor are derived. When  $0 < \lambda < 1$ , the  $\lambda$ -deformed Rosen–Morse potential is defined on a half-line. In this case, the Green’s function is evaluated in closed form by using the perturbative approach which consists in incorporating a  $\delta$ -function as a perturbation of the standard Rosen–Morse potential and making the strength of this perturbation infinitely repulsive to form an impenetrable barrier. The poles of the Green’s function yield a transcendental equation for the energy levels. In Section 3, the generalized Woods–Saxon potential ( $\lambda < 0$ ) is treated in a similar way. We first convert the path integral relative to this potential into the one of the  $\lambda$ -deformed Manning–Rosen potential on a half-line. We then calculate the Green’s function by means of the  $\delta$ -function perturbation trick and also obtain a transcendental equation for the energy spectrum. A screened potential, which generalizes the Hulthén and the hydrogen atom potentials, the deformed Woods–Saxon potential and the Morse potential are studied as particular cases in Section 4. Section 5 will be a conclusion.

## 2. Generalized Hulthén potential

When the deformation parameter  $\lambda$  is  $\lambda > 0$ , the four-parameter potential energy function (1) represents a general form of the Hulthén potential [7].

Then, the Green’s function for this spherically symmetric potential has the following form:

$$G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) = \frac{1}{r''r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} G_l(r'', r'; E) P_l(\cos \theta), \tag{2}$$

where  $P_l(\cos \theta)$  is the Legendre polynomial with  $\theta = (\vec{r}'', \vec{r}')$ . The radial Green’s function is given by

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dT \left\langle r'' \left| \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} T(H_l - E) \right] \right| r' \right\rangle, \tag{3}$$

where

$$H_l = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r). \tag{4}$$

Our aim is to find the energy levels  $E_{n_r, l}$  and the radial wave functions  $\Psi_{n_r, l}(r) = r^{-1} \chi_{n_r, l}(r)$  by computing (3). Before approaching the path integral evaluation of this radial Green’s function (3) for  $\lambda > 0$ , we have to inspect the variation of the potential  $V_{\text{eff}}(r) = (\hbar^2 l(l+1)/2mr^2) + V(r)$  according to the values of the parameter  $\lambda$ . We distinguish two cases. If  $0 < \lambda < 1$ ,  $V(r)$  is continuous on the whole interval  $\mathbb{R}^+$ . But, if  $\lambda \geq 1$ ,  $V(r)$  has a strong singularity at the point  $r = r_0 = (1/\eta) \ln \lambda$ , and in this case, we have two distinct regions, one is defined by the interval  $]0, r_0[$  and the other by the interval  $]r_0, \infty[$ . This leads us to build the radial Green’s function by path integration in each case.

2.1. Case I:  $\lambda \geq 1$  and  $r_0 < r < \infty$

In this case, we will discuss the potential  $V_{\text{eff}}(r)$  only in the interval  $]r_0, \infty[$  since, in the other interval, the solution cannot be analytically obtained. The potential  $V_{\text{eff}}(r)$  is singular at the point  $r = r_0$ , so that the discrete form of the expression (3) does not exist due to path collapse. To obtain a stable path integral, let us introduce an appropriate regulating function [8] and write the expression (3) in the form of a path integral

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dS P_l(r'', r'; S), \tag{5}$$

where the transformed path integral is given in the canonical form by

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S) &= f_R(r'') f_L(r') \left\langle r'' \left| \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} S f_L(r) \left( \frac{P_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r) - E \right) f_R(r) \right] \right| r' \right\rangle \\ &= f_R(r'') f_L(r') \int Dr(s) \int \frac{DP_r(s)}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left[ P_r \dot{r} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - f_L(r) \left( \frac{P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right) f_R(r) \right] ds \right\} \\ &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi\hbar} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right\}, \end{aligned} \tag{6}$$

with the short-time action

$$A_1^n = (P_r)_n \Delta r_n - \varepsilon_s f_L(r_n) \left( \frac{(P_r)_n^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_n^2} + V(r_n) - E \right) f_R(r_{n-1}) \tag{7}$$

and

$$\varepsilon_s = \frac{S}{N+1} = ds = \frac{dt}{f_L(r_n)f_R(r_{n-1})}; \quad dt = \varepsilon_t = \frac{T}{N+1}. \tag{8}$$

The regulating function has been defined by Kleinert as

$$f(r) = f_L(r)f_R(r) = f^{1-\alpha}(r)f^\alpha(r). \tag{9}$$

In order to simplify the calculation of the kernel  $P_l(r'', r'; S)$ , let us put  $\alpha = 1/2$ , that is to say, we choose the mid-point prescription. This can be justified by the fact that the final result is independent of this parameter. Then, by integrating with respect to the variable  $(P_r)_n$ , we find

$$P_l(r'', r'; S) = [f(r'')f(r')]^{1/4} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right]^{1/2} \times \prod_{n=1}^N \left[ \int \frac{dr_n}{\sqrt{f(r_n)}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right\}, \tag{10}$$

with the short-time action in configuration space given by

$$A_2^n = \frac{m(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_s \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}} - \varepsilon_s \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_n^2} + V(r_n) - E \right) \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}. \tag{11}$$

Thanks to the space transformation  $r \rightarrow \xi$ , defined by

$$r = \frac{1}{\eta} \ln [\exp(2\eta\xi) + \lambda], \tag{12}$$

which maps  $r \in ]r_0, \infty[$ , into  $\xi \in \mathbb{R}$ , and the regulating function

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)} = g'^2(\xi), \tag{13}$$

we may express (10) as

$$P_l(r'', r'; S) = [f(r'')f(r')]^{1/4} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right]^{1/2} \prod_{n=1}^N \left[ \int d\xi_n \right] \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{m(\Delta \xi_n)^2}{2\varepsilon_s} + \frac{m}{8\varepsilon_s} \left( \frac{g''^2}{g'^2} - \frac{2}{3} \frac{g'''}{g'} \right) (\Delta \xi_n)^4 - \varepsilon_s \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m} \frac{l(l+1)}{(\ln(e^{2\eta\xi_n} + \lambda))^2} \frac{e^{2\eta\xi_n}}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi_n)} + \varepsilon_s \left( 2E - \frac{\hbar^2 a}{m\lambda^2} \right) + \varepsilon_s \left( 2E + \frac{\hbar^2 a}{m\lambda^2} \right) \tanh_\lambda(\eta\xi_n) + \varepsilon_s \left( \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda} + b \right) - \lambda E \right) \frac{1}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi_n)} \right] \right\}. \tag{14}$$

Here, we have introduced the deformed hyperbolic functions, which are defined by Arai [9]

$$\sinh_{\lambda}x = \frac{1}{2}(e^x - \lambda e^{-x}), \quad \cosh_{\lambda}x = \frac{1}{2}(e^x + \lambda e^{-x}), \quad \tanh_{\lambda}x = \frac{\sinh_{\lambda}x}{\cosh_{\lambda}x}, \tag{15}$$

where  $\lambda$  is a real positive parameter.

Note that the term of order 4 appearing in the action contained in (14) contributes significantly to the path integral. It can be estimated by using the formula [10]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2 + \beta x^4) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\alpha x^2 + \frac{3\beta}{4\alpha^2}\right) dx, \tag{16}$$

valid for  $\Re\{\alpha\} > 0$ , and  $|\alpha|$  large. This leads to

$$P_l(r'', r'; S) = [f(r'')f(r')]^{1/4} \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[ \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + \tilde{E} - A \tanh_{\lambda}(\eta \xi) + \frac{B}{\cosh_{\lambda}^2(\eta \xi)} - \frac{\hbar^2 \eta^2 l(l+1)}{2m} \frac{e^{2\eta \xi}}{(\ln(e^{2\eta \xi} + \lambda))^2 \cosh_{\lambda}^2(\eta \xi)} \right] \right\}, \tag{17}$$

where we have set

$$\begin{cases} \tilde{E} = 2 \left[ E - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \\ A = -2 \left[ E + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \\ B = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda} + b - \frac{\eta^2 \lambda}{4} \right) - \lambda E. \end{cases} \tag{18}$$

This path integral (17) is at it stands not solvable for the non-zero angular momentum states. In order that the term  $\propto (e^{2\eta \xi})/[(\ln(e^{2\eta \xi} + \lambda))^2 \cosh_{\lambda}^2(\eta \xi)]$  cancels, we must set  $l = 0$ . In this case, the radial Green's function (5) takes the form:

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P_0(r'', r'; S) = [f(r'')f(r')]^{1/4} G_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) \tag{19}$$

where

$$G_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; S) \tag{20}$$

and

$$P_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[ \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - V^{\text{RM}}(\xi) \right] \right\} \tag{21}$$

is just the propagator for the Rosen–Morse potential [11] defined in terms of  $\lambda$ -deformed hyperbolic functions as

$$V^{\text{RM}}(\xi) = A \tanh_{\lambda}(\eta \xi) - \frac{B}{\cosh_{\lambda}^2(\eta \xi)}; \quad \xi \in \mathbb{R}. \tag{22}$$

Since its exact solution is known [12], we can then directly write down the explicit expression for its Green’s function. The explicit expression for the Green’s function relative to this Rosen–Morse potential reads as

$$\begin{aligned}
 G_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; \tilde{E}) &= \frac{m}{\hbar^2} \left[ \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \right] \\
 &\times \left( \frac{1 - \tanh_\lambda(\eta\xi')}{2} \frac{1 - \tanh_\lambda(\eta\xi'')}{2} \right)^{(M_1+M_2)/2} \\
 &\times \left( \frac{1 + \tanh_\lambda(\eta\xi')}{2} \frac{1 + \tanh_\lambda(\eta\xi'')}{2} \right)^{(M_1-M_2)/2} \\
 &\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh_\lambda(\eta\xi_{>})}{2}\right) \\
 &\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh_\lambda(\eta\xi_{<})}{2}\right), \quad (23)
 \end{aligned}$$

where the symbols  $\xi_{>}$  and  $\xi_{<}$  denote  $\max(\xi'', \xi')$  and  $\min(\xi'', \xi')$  respectively.  ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z)$  refer to the hypergeometric function and the following abbreviations have been used

$$\begin{cases}
 L_E = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{a}{\eta^2\lambda^2} + \frac{b}{\eta^2\lambda} - \frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, \\
 M_{1,2} = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2\lambda^2}}.
 \end{cases} \quad (24)$$

The radial Green’s function  $G_0(r'', r'; E)$  associated with the four-parameter potential (1) for  $\lambda \geq 1$  and in the interval  $]r_0, \infty[$  is thus given by

$$\begin{aligned}
 G_0(r'', r'; E) &= \frac{m}{\hbar^2} \left[ \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \right] \frac{[f(r'')f(r')]^{1/4}}{\eta} \\
 &\times [\lambda^2 e^{-\eta(r''+r')}]^{(M_1+M_2)/2} [(1 - \lambda e^{-\eta r''})(1 - \lambda e^{-\eta r'})]^{(M_1-M_2)/2} \\
 &\times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \lambda e^{-\eta r''}) \\
 &\times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - \lambda e^{-\eta r'}). \quad (25)
 \end{aligned}$$

The energy spectrum is obtained from the poles of the radial Green’s function which occur when  $M_1 - L_E = -n_r$ , in the Euler function  $\Gamma(M_1 - L_E)$ , where  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . This yields the discrete energy spectrum

$$E_{n_r}^{\lambda \geq 1} = -\frac{\hbar^2}{8m\lambda^2} \left( \frac{(P + n_r\lambda\eta)^2 - a - b\lambda}{(P + n_r\lambda\eta)} \right)^2, \quad (26)$$

where

$$P = \frac{\lambda\eta}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2\eta^2}} \right). \quad (27)$$

In order to find the wave functions, we approximate the Euler function  $\Gamma(M_1 - L_E)$  near the poles  $M_1 - L_E \approx -n_r$  as follows:

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{\hbar^2 \eta}{m} \frac{Q(P + n_r \lambda \eta - \lambda Q)}{(P + n_r \lambda \eta)(E - E_{n_r}^{\lambda \geq 1})}, \end{aligned} \tag{28}$$

where

$$Q = \frac{(P + n_r \lambda \eta)^2 - a - b \lambda}{2 \lambda (P + n_r \lambda \eta)}, \tag{29}$$

and take into consideration the Gauss’s transformation formula [13]

$$\begin{aligned} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z) &= \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} {}_2F_1(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1; 1 - z) + (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \\ &\quad \times \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} {}_2F_1(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1; 1 - z). \end{aligned} \tag{30}$$

The second term is null because the Euler function  $\Gamma(\alpha)$  is infinite ( $\alpha = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$ ). This permits us to write the contribution of the discrete part to radial Green’s function as

$$G_0(r'', r'; E) = \sum_{n_r=0}^{n_{r\max}} \frac{(\chi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r'))^* \chi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r'')}{E - E_{n_r}^{\lambda \geq 1}}. \tag{31}$$

One finally obtains

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) \\ &= \left[ \frac{-2Q(P + n_r \lambda \eta - \lambda Q)}{(P + n_r \lambda \eta)} \frac{\Gamma\left(n_r + \frac{2P}{\lambda \eta}\right) \Gamma\left(n_r + \frac{2P}{\lambda \eta} - \frac{2Q}{\eta}\right)}{n_r! \Gamma\left(n_r - \frac{2Q}{\eta} + 1\right)} \right]^{1/2} \\ &\quad \times \frac{1}{\Gamma\left(\frac{2P}{\lambda \eta}\right)} (1 - \lambda e^{-\eta r})^{P/\lambda \eta} (\lambda e^{-\eta r})^{-Q/\eta} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + \frac{2P}{\lambda \eta} - \frac{2Q}{\eta}, \frac{2P}{\lambda \eta}; 1 - \lambda e^{-\eta r}\right). \end{aligned} \tag{32}$$

Now, we have to check whether the radial wave functions (32) satisfy the boundary conditions

$$\lim_{r \rightarrow r_0} r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = 0 \tag{33}$$

and

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = 0. \tag{34}$$

When  $r \rightarrow r_0$ , it is clear that (32) fulfills the hermiticity condition (33) of the radial momentum operator  $P_r$ . But, for  $r \rightarrow \infty$ , we have to impose the restriction that only the wave functions (32) with  $Q < 0$  fulfill the condition (34) and therefore it is seen from (29) that  $n_r < (\sqrt{a + b \lambda} - P)/\lambda \eta$ . The allowed values of the radial quantum number  $n_r$  are  $n_r = 0$ ,

1, 2, . . . ,  $n_{r\max}$ . The number of bound states  $n_{r\max}$  is set by  $n_{r\max} = \{(\sqrt{a + b\lambda} - P)/\lambda\eta\}$ , and  $\{v\}$  denotes the largest integer inferior to  $v$ .

2.2. Case 2:  $0 < \lambda < 1$  and  $0 < r < \infty$

The analysis presented above holds, but in this case, the space transformation (12) maps  $r \in \mathbb{R}^+$  into  $\xi \in [(1/2\eta) \ln(1 - \lambda), \infty[$ . This means that the kernel (21) is the propagator describing the motion of a particle subjected to a  $\lambda$ -deformed Rosen–Morse type potential on the half-line  $\xi > (1/2\eta) \ln(1 - \lambda)$ . As a direct path integration is not possible, the problem can be solved by a trick which consists in introducing an auxiliary  $\delta$ -function term into the action of Eq. (21) to form an impenetrable wall [14] at  $\xi = \xi_0 = (1/2\eta) \ln(1 - \lambda)$ . Then, the Green’s function (20) becomes

$$G_0^\delta(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f(r'')f(r')]^{1/4} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E}S\right) P^\delta(\xi'', \xi'; S) \tag{35}$$

$$= [f(r'')f(r')]^{1/4} G_{\text{RM}}^\delta(\xi'', \xi'; \tilde{E}),$$

where

$$G_{\text{RM}}^\delta(\xi'', \xi'; \tilde{E}) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E}S\right) P^\delta(\xi'', \xi'; S) \tag{36}$$

and

$$P_{\text{RM}}^\delta(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - V^\delta(\xi)\right]\right\}. \tag{37}$$

This path integral (37) may be understood as representing the propagator for a particle bounded by a potential of the form:

$$V^\delta(\xi) = V^{\text{RM}}(\xi) - \frac{\alpha}{\eta} \delta(\xi - \xi_0); \quad \xi \in \mathbb{R}, \tag{38}$$

where  $V^{\text{RM}}(\xi)$  is the Rosen–Morse potential (22). As is quite apparent from the non-trivial form of the potential (38), path integration of (37) cannot directly be performed. Therefore, we found that it is convenient to apply the perturbative approach by expanding  $\exp(i\alpha/\hbar\eta) \int_{s'}^{s''} \delta(\xi - \xi_0) ds$  into the power series. This gives the following series expansion [15]

$$P^\delta(\xi'', \xi'; S) = P_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; S) + \sum_{n=1}^\infty \left(\frac{i\alpha}{\hbar\eta}\right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \left[ \int_{s'}^{s_{j+1}} ds_j \int_{-\infty}^\infty d\xi_j \right]$$

$$\times P_{\text{RM}}(\xi_1, \xi'; s_1 - s') \delta(\xi_1 - \xi_0) P_{\text{RM}}(\xi_2, \xi_1; s_2 - s_1)$$

$$\times \dots \times \delta(\xi_{n-1} - \xi_0) P_{\text{RM}}(\xi_n, \xi_{n-1}; s_2 - s_1) \delta(s_n - s_0) P_{\text{RM}}(s'', s_n; S - s_n)$$

$$= P_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; S) + \sum_{n=1}^\infty \left(\frac{i\alpha}{\hbar\eta}\right)^n \int_{s'}^{s''} ds_n \int_{s'}^{s_n} ds_{n-1} \dots \int_{s'}^{s_2} ds_1$$

$$\times P_{\text{RM}}(\xi_0, \xi'; s_1 - s') P_{\text{RM}}(\xi_0, \xi_0; s_2 - s_1) \times \dots$$

$$\times P_{\text{RM}}(\xi_0, \xi_0; s_n - s_{n-1}) P_{\text{RM}}(\xi'', \xi_0; S - s_n), \tag{39}$$

where we have ordered the time as  $s' = s_0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n < s_{n+1} = s''$ . In order to perform the successive integrations over the variables  $s_j$  in (39), we insert (39) into (36), and making use of the convolution theorem of the Fourier transformation, we arrive at

$$G_{\text{RM}}^\delta(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) = G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) - \frac{G_{\text{RM}}(\zeta'', \xi_0; \tilde{E})G_{\text{RM}}(\xi_0, \zeta'; \tilde{E})}{G_{\text{RM}}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}) - \frac{\alpha}{\alpha}}, \tag{40}$$

where  $G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E})$  is the Green's function (23) and it has been assumed that  $G_{\text{RM}}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E})$  effectively exists.

If we now take the limit  $\alpha \rightarrow -\infty$ , the physical system is subjected to move in the potential  $V^{\text{RM}}(\xi)$  bounded by an infinitely repulsive barrier [14,16] at  $\xi = \xi_0$ . Then, the Green's function on the half-line  $\xi > \xi_0$  is given by

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) &= \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} G_{\text{RM}}^\delta(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) \\ &= G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) - \frac{G_{\text{RM}}(\zeta'', \xi_0; \tilde{E})G_{\text{RM}}(\xi_0, \zeta'; \tilde{E})}{G_{\text{RM}}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E})}. \end{aligned} \tag{41}$$

The energy spectrum is determined by the poles of (41), i.e., by the equation  $G_{\text{RM}}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}) = 0$ , or as well by the transcendental equation

$${}_2F_1\left(v + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon, v + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon, 2\frac{P}{\eta\lambda}; 1 - \lambda\right) = 0, \tag{42}$$

with the following notation:

$$v = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, \quad \varepsilon = L_E + \frac{1}{2} = \sqrt{\frac{a}{\eta^2\lambda^2} + \frac{b}{\eta^2\lambda} + v^2}. \tag{43}$$

In general, an analytical solution of this transcendental equation (42) is impossible. One can take into consideration a numerical calculation.

Using the link between (19) and (23), the Gauss's formula (30) and transforming the variable  $\xi$  into the radial variable by (12), we find that the wave functions corresponding to the bound states are given by

$$\begin{aligned} \chi^{0 < \lambda < 1}(r) &= r\psi^{0 < \lambda < 1}(r) \\ &= Ce^{-\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r} (1 - \lambda e^{-\eta r})^{P/\eta\lambda} {}_2F_1\left(v + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon, v + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon, 2v + 1; \lambda e^{-\eta r}\right), \end{aligned} \tag{44}$$

where  $C$  is a constant factor.

### 3. Generalized Woods–Saxon potential

In the case where the range of the deformation parameter  $\lambda$  is  $\lambda < 0$ , the four-parameter potential function (1) is defined in the whole interval  $\mathbb{R}^+$  and it can be written in the following form:

$$V_1(r) = \frac{2m}{\hbar^2}v(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} + \lambda)^2} - \frac{b}{e^{\eta r} + \lambda}, \tag{45}$$

where the minus sign is absorbed in the parameter  $\lambda$  and consequently this latter becomes positive. The form of the potential dictates upon us the following space transformation:

$$r \rightarrow \xi, \quad r \in \mathbb{R}^+, \quad \xi \in \left] \frac{1}{2\eta} \ln(1 + \lambda), \infty \right[ , \quad (46)$$

defined by

$$r = \frac{1}{\eta} \ln [\exp(2\eta\xi) - \lambda], \quad (47)$$

accompanied by the regulating function

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)}. \quad (48)$$

After some simple calculation, we show that the radial Green's function, for the  $s$  states, can be expressed in the following form:

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f(r'')f(r')]^{1/4} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E}S\right) P(\xi'', \xi'; S), \quad (49)$$

where

$$\tilde{E} = 2 \left[ E - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right] \quad (50)$$

and

$$P(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[ \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + A \coth_\lambda(\eta\xi) - \frac{B}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}. \quad (51)$$

We have here put

$$A = 2 \left[ E + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad B = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{a}{\lambda} - b - \frac{\eta^2 \lambda}{4} \right) - \lambda E. \quad (52)$$

Following a similar procedure to that used in Ref. [12], let us define a new variable  $y = \eta\xi - \ln \sqrt{\lambda}$  and use a new pseudo-time  $s' = \eta^2 s$ . With these transformations, the path integral (51) becomes

$$P(\xi'', \xi'; S') = \eta \int Dy(s') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{S'} ds' \left[ \frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{A}{\eta^2} \coth y - \frac{B}{\eta^2 \lambda \sinh^2 y} \right] \right\}. \quad (53)$$

This expression has the same form as the path integral associated with the potential  $V^{\text{MR}}(y)$  introduced by Manning and Rosen [17] to discuss the vibrational states of diatomic molecules. Furthermore,  $V^{\text{MR}}(y)$  has been used for describing the Kepler problem in hyperbolic geometry [18]. The Manning–Rosen potential is defined for  $y \in \mathbb{R}^+$ , but in the present case, we have converted the path integral for the potential (45) into a path integral for a Manning–Rosen like potential by means of the transformation  $r \rightarrow r(y)$  which maps  $\mathbb{R}^+ \rightarrow ] \ln \sqrt{(1 + \lambda)/\lambda}, \infty[$ . This means that the motion takes place on the half-line  $y > \ln \sqrt{(1 + \lambda)/\lambda}$ . We shall therefore consider the path integral problem with the

Manning–Rosen potential  $V^{\text{MR}}(y)$  defined on the half-line  $y > y_0 = \ln \sqrt{(1 + \lambda)/\lambda}$ . To calculate the Green’s function, we proceed similarly as for the previous case and obtain

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(\text{MR})} \left( \xi'', \xi'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) &= \frac{i}{\hbar\eta} \int_0^\infty dS' \exp \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\tilde{E}}{\eta^2} S' \right) P(\xi'', \xi'; S') \\ &= G^{(\text{MR})} \left( y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) - \frac{G^{(\text{MR})} \left( y'', y_0; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) G^{(\text{MR})} \left( y_0, y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right)}{G^{(\text{MR})} \left( y_0, y_0; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right)}, \end{aligned} \tag{54}$$

in which  $G^{(\text{MR})}(y'', y'; \tilde{E}/\eta^2)$  is the Green’s function associated with the standard Manning–Rosen potential. Since its exact solution is known, we can then directly write down the result [8]

$$\begin{aligned} G^{(\text{MR})} \left( y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) &= \frac{m}{\hbar^2 \eta} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\quad \times \left( \frac{2}{1 + \coth y'} \frac{2}{1 + \coth y''} \right)^{(M_1 + M_2 + 1)/2} \\ &\quad \times \left( \frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\ &\quad \times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\ &\quad \times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \end{aligned} \tag{55}$$

where the following abbreviations have been used

$$L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}}, \quad M_{1,2} = \sqrt{\frac{a}{\lambda^2 \eta^2} - \frac{b}{\lambda \eta^2} - \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}. \tag{56}$$

The bound state energy levels are determined by the poles of equation (54) and are given by the following quantization condition which is a transcendental equation involving the hypergeometric function

$${}_2F_1 \left( 1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2} - \frac{P}{\eta \lambda}}, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2} + \frac{P}{\eta \lambda}}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2} + 1}; \frac{\lambda}{1 + \lambda} \right) = 0, \tag{57}$$

where

$$\frac{P}{\eta \lambda} = \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2 \lambda^2}} \right) \tag{58}$$

and

$$\tilde{\beta} = \frac{M_1 + M_2}{2}. \tag{59}$$

The corresponding bound state wave functions to the energy spectrum given by Eq. (57) have the form:

$$\begin{aligned} \chi^{\lambda>0}(r) = r\psi^{\lambda>0}(r) &= N \left( \frac{e^{\eta r}}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\tilde{\beta}} \left( \frac{1}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\sqrt{-(2mE/\hbar^2\eta^2)}} \\ &\times {}_2F_1 \left( 1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{P}{\eta\lambda}}, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} + \frac{P}{\eta\lambda}}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} + 1}; \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right). \end{aligned} \quad (60)$$

#### 4. Particular cases

##### 4.1. First case: screened potential

By setting  $\lambda = 1$  and  $\eta = v$  in the definition (1), we obtain the following potential:

$$V_S(r) = \frac{a}{(e^{vr} - 1)^2} - \frac{b}{e^{vr} - 1}, \quad (61)$$

with  $a$ ,  $b$  and  $v$  as the real positive constants defined by  $a = v^2l(l+1)$ ,  $b = (2mV_0/\hbar^2) - a$ ,  $V_0 = vZe^2$ ,  $Ze$  being the charge of the nucleus. This potential has been proposed by Manning and Rosen to discuss the vibrational states of diatomic molecules [17].

The parameters (27) and (29) can thus be written

$$P = v(l+1) \quad (62)$$

and

$$Q = \frac{vN}{2} - \frac{mZe^2}{\hbar^2N}; \quad N = n_r + l + 1. \quad (63)$$

The discrete energy spectrum and the normalized wave functions of the bound states of the screened potential can be deduced from equations (26) and (32),

$$E_N = -\frac{\hbar^2v^2}{8m} \left( \frac{2mZe^2}{\hbar^2vN} - N \right)^2, \quad (64)$$

$$\begin{aligned} \chi_N^{\lambda=1}(r) &= r\Psi_N^{\lambda=1}(r) \\ &= \left[ \frac{-2Q(N - \frac{Q}{v})}{N} \frac{\Gamma(N+l+1)\Gamma(N - \frac{2Q}{v} + l + 1)}{\Gamma(N-l)\Gamma(N - \frac{2Q}{v} - l)} \right]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(2l+2)} (1 - e^{-vr})^{l+1} e^{Qr} \\ &\times {}_2F_1 \left( 1 + l - N, N - \frac{2Q}{v} + l + 1, 2l + 2; 1 - e^{-vr} \right), \end{aligned} \quad (65)$$

where

$$N = 1, 2, 3, \dots, N_{\max} < \left\{ \sqrt{\frac{2mZe^2}{\hbar^2 v}} \right\}.$$

These results coincide with those obtained: (i) through the resolution of the Schrödinger equation [2]; (ii) for long time, through a path integral on the  $SU(1,1)$  group [19]; (iii) by summing the spectral representation of the energy-dependent Green’s function [20]; and, very recently, (iv) via the path integration on the  $SU(2)$  group [21].

#### 4.2. Second case: deformed Woods–Saxon potential

On making the substitution  $\lambda = qe^{\eta R}$  with  $q > 0$  in the expression (45), we obtain the following potential which is a special form of the deformed Woods–Saxon potential

$$V_{\text{ws}}(r) = \frac{W_0}{(e^{\eta(r-R)} + q)^2} - \frac{V_0}{e^{\eta(r-R)} + q}, \tag{66}$$

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

In this case, the quantization condition for the bound states can be determined by using the Gauss’s transformation formula (30) and noting that  $\lambda/(1 + \lambda) \simeq 1$  for  $\eta R \gg 1$ . Therefore in this approximation, the Eq. (57) can be written as

$$\frac{\Gamma(2\tilde{\beta})\Gamma\left(1 + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{p}{\eta\lambda} - \tilde{\beta}}\right)\Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} + \frac{p}{\eta\lambda} - \tilde{\beta}}\right)}{\Gamma(-2\tilde{\beta})\Gamma\left(1 + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{p}{\eta\lambda} + \tilde{\beta}}\right)\Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} + \frac{p}{\eta\lambda} + \tilde{\beta}}\right)} \left(\frac{e^{-\eta R}}{q}\right)^{-2\tilde{\beta}} = -1. \tag{67}$$

To simplify the discussion of this Eq. (67), we only consider the case where  $\tilde{\beta}^2 < 0$ , so that according to Eq. (59),  $\tilde{\beta}$  turns out to be imaginary. Writing

$$\tilde{\beta} = i\mu, \tag{68}$$

and defining  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ , and  $\psi$  as

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} + \frac{p}{\eta\lambda} + i\mu}\right), \\ \phi_2 = \arg \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{p}{\eta\lambda} + i\mu}\right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \tag{69}$$

we can write (67) in the form

$$\exp \left[ 2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left( \frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{p}{\eta\lambda}}} \right) \right] \left(\frac{e^{-\eta R}}{q}\right)^{-2i\mu} = -1. \tag{70}$$

This leads on to the quantization condition

$$\mu(\eta R + \ln q) + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan \left( \frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{P}{\eta\lambda}}} \right) = (2n + 1) \frac{\pi}{2}, \tag{71}$$

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

If we make the replacements  $a = 0$  and  $q = 1$ , the potential (66) turns to the Woods–Saxon potential [22]. The quantization condition can be deduced from Eq. (67),

$$\mu\eta R + \psi - 2\phi - \arctan \left( \frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}} \right) = (2n + 1) \frac{\pi}{2}, \tag{72}$$

where

$$\begin{cases} \mu = \frac{1}{\eta} \sqrt{V_0 + \frac{2mE}{\hbar^2}}, \\ \phi = \arg \Gamma \left( \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + i\mu \right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \tag{73}$$

and  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . This result is in agreement with that obtained by solving Schrödinger’s equation [22].

### 4.3. Third case: Morse potential

By setting  $\lambda = 0$  in the expression (1), we obtain the so-called radial Morse potential:

$$V_M(r) = ae^{-2\eta r} - be^{-\eta r} \tag{74}$$

with the parameters  $a, b$  and  $\eta$  defined by  $a = (2m/\hbar^2)D_c e^{2\eta r_c}$ ,  $b = (4m/\hbar^2)D_c e^{\eta r_c}$  and  $\eta = \alpha$ .

In this case, it can be seen from Eqs. (27) and (43) that

$$\begin{cases} \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a}}{\eta\lambda}, \\ v + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda} \rightarrow \lambda \rightarrow 0 \infty, \\ v + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}}}. \end{cases} \tag{75}$$

On the other hand, by using the formula [23]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1 \left( \alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta} \right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \tag{76}$$

it is easy to show that, in the limiting case  $\lambda \rightarrow 0$ , the wave functions (44) become

$$\begin{aligned} \chi^{0 < \lambda < 1}(r) &= r\psi(r)^{0 < \lambda < 1}(r) \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} C \exp \left( -\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r \right) \exp \left( -\frac{\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r} \right) \\ &\times {}_1F_1 \left( \frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + 1; \frac{2\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r} \right). \end{aligned} \tag{77}$$

These are indeed the radial wave functions of the Morse potential. The energy spectrum can be deduced from the boundary condition at  $r = 0$ . Considering  $a \gg 1$  and using the asymptotic expansion, we see from (77) that the quantization condition is given by

$$\frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} = -n_r, \tag{78}$$

from which we have

$$E_{n_r} = \frac{\hbar^2\eta^2}{2m} \left( \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - n_r - \frac{1}{2} \right)^2; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \left\{ \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2} \right\}, \tag{79}$$

where  $\{(b/2\eta\sqrt{a}) - (1/2)\}$  denotes the largest integer smaller than  $(b/2\eta\sqrt{a}) - (1/2)$ .

The wave functions (77) and the energy spectrum (79) can be derived also in another way, by starting from the wave functions (60) and proceeding to the limit  $\lambda \rightarrow 0$ , we see that

$$\begin{cases} P \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \sqrt{a}, \\ 1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} - \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, \\ \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda} \rightarrow \infty, \end{cases} \tag{80}$$

and thus, by using the formula (76), we recover the wave functions and the energy spectrum of diatomic molecules in the Morse potential. As is expected, the energy spectrum is a continuous function with respect to the parameter  $\lambda$  by crossing the value  $\lambda = 0$ .

### 5. Conclusion

In this paper, we have discussed the path integral treatment of a four-parameter potential of a diatomic molecule. As we have shown, the path integral for the Green’s function associated with this potential cannot be evaluated for any deformation parameter in a unified manner. For  $\lambda \geq 1$  and  $(1/\eta) \ln \lambda < r < \infty$ , the analytic energy spectrum and the normalized wave functions are found. On the contrary, if  $\lambda \geq 1$  and  $0 < r < (1/\eta) \ln \lambda$ , the path integral is intractable analytically. When  $0 < \lambda < 1$  or  $\lambda < 0$ , the path integral derivation of the Green’s function is facilitated by the incorporation of an additional  $\delta$ -function potential with strength  $\alpha$  as a perturbation and for the motion in the half-lines  $\xi > \xi_0$  or  $y > y_0$ , we consider the limit  $\alpha \rightarrow -\infty$ . In both cases we have demonstrated that the s state energy levels are given by transcendental equations. Our results (Eqs. (26), (42), (57)) are different from those obtained in the framework of the shape invariance approach and by the supersymmetric WKB quantization method [6].

### References

[1] O.P. Bahethi, M.G. Fuda, *J. Math. Phys.* 12 (1971) 2076;  
 C.S. Lam, Y.P. Varshni, *Phys. Rev. A* 4 (1971) 1874;  
 H. Haeringen, *Phys. Rev. A* 18 (1978) 56;  
 B. Durand, L. Durand, *Phys. Rev. D* 23 (1981) 1092;  
 R. Dutt, P. Varshni, *J. Math. Phys.* 24 (1983) 2770;  
 L. Hall, *Phys. Rev. A* 32 (1983) 263.

- [2] J. Lindhard, A. Winther, Nucl. Phys. A 166 (1971) 413;  
U. Myhrman, J. Math. Phys. 21 (1980) 1732;  
J. Phys. A: Math. Gen. 166 (2001) 4281.
- [3] A.A. Berezin, Phys. Stat. Sol. (B) 50 (1972) 71;  
J. Phys. C: Solid State Phys. 12 (1979) L363;  
Phys. Rev. B 33 (1986) 2122.
- [4] J. Grunniger, J. Chem. Phys. 55 (1971) 3561;  
K. Szalwicz, H.J. Mokhorst, J. Chem. Phys. 75 (1981) 5785;  
G. Malli, Chem. Phys. Lett. 26 (1981) 578.
- [5] Jiu-Xun Sun, Acta Phys. Sin. 48 (1999) 1992.
- [6] Chung-Sheng Jia, Jia-Ying Wang, Su He, Liang-Tian Sun, J. Phys. A: Math. Gen. 33 (2000) 6993.
- [7] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. 28A (5) (1942).
- [8] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics Polymer Physics and Financial Markets, fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006.
- [9] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. 158 (1991) 63;  
A. Arai, J. Phys. A: Math. Gen. 34 (2001) 4281.
- [10] B.S. Dewitt, Rev. Mod. Phys. 29 (1957) 377;  
D.W. Mc Laughlin, L.S. Schulman, J. Math. Phys. 12 (1971) 2520.
- [11] N. Rosen, P.M. Morse, Phys. Rev. 42 (1932) 210.
- [12] C. Grosche, J. Phys. A: Math. Gen. 38 (2005) 2947.
- [13] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, Tables of Integrals, Series and Products, Academic Press, New York, 1965.
- [14] T.E. Clark, R. Menikoff, D.H. Sharp, Phys. Rev. D 22 (1980) 3012.
- [15] R.P. Feynman, A. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [16] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 1.
- [17] M.F. Manning, N. Rosen, Phys. Rev. 44 (1933) 953.
- [18] L. Infeld, A. Schild, Phys. Rev. 67 (1945) 121.
- [19] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi, T.F. Hammann, J. Math. Phys. 32 (1991) 441.
- [20] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T.F. Hammann, A. Messouber, Il Nuovo Cimento B 113 (1998) 81.
- [21] A. Diaf, A. Chouchaoui, R.J. Lombard, Ann. Phys. (NY) 317 (2005) 354.
- [22] S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer Verlag, Berlin, 1974.
- [23] L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Quantum Mechanics, Pergamon, Oxford, 1958.

## Path integral solutions for Klein–Gordon particle in vector plus scalar generalized Hulthén and Woods–Saxon potentials

F. Benamira, L. Guechi,<sup>a)</sup> S. Mameri, and M. A. Sadoun

*Département de Physique, Laboratoire de Physique Théorique, Faculté des Sciences Exactes, Université Mentouri, Route d’Ain El Bey, Constantine 25000DZ, Algeria*

(Received 23 October 2009; accepted 8 December 2009; published online 3 March 2010)

The Green’s function for a Klein–Gordon particle under the action of vector plus scalar deformed Hulthén and Woods–Saxon potentials is evaluated by exact path integration. Explicit path integration leads to the Green’s function for different shapes of the potentials. From the singularities of the latter Green’s function, the bound states are extracted. For  $q \geq 1$  and  $(1/\alpha)\ln q < r < \infty$ , the analytic expression of the energy spectrum and the normalized wave functions for the  $l$  states are obtained within the framework of an approximation to the centrifugal term. When the deformation parameter  $q$  is  $0 < q < 1$  or  $q < 0$ , it is found that the quantization conditions are transcendental equations involving the hypergeometric function that require a numerical solution for the  $s$ -state energy levels. Particular cases of these potentials are also discussed briefly. © 2010 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3294769]

### I. INTRODUCTION

This article is devoted to a discussion of the problem of a spinless relativistic particle with charge  $e$  in the presence of a vector potential  $V_q(r)$  and a scalar potential  $S_q(r)$  of the form

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

where  $\alpha$ ,  $V_0$ , and  $S_0$  are positive constants such as  $S_0 > V_0$  and  $q$  is a deformation parameter that can take any real value. These potentials (1) are called generalized Woods–Saxon potentials for  $q < 0$ , exponential potentials for  $q = 0$ , and generalized Hulthén potentials for  $q > 0$ . They are very useful in nuclear, molecular, and atomic physics. The scalar potential is added to the mass term in the Klein–Gordon equation and may be interpreted as an effective position dependent mass. For  $q = 1$ , the potentials (1) reduce to the standard Hulthén potentials<sup>1</sup> and their solution, through the resolution of the  $s$ -wave Klein–Gordon equation<sup>2</sup> and in the framework of path integrals,<sup>3</sup> has been known for a long time. In the past few years, the potentials (1) were investigated by means of different methods. For example, the Klein–Gordon equation with  $V_q(r)$  was solved by using the Nikiforov–Uvarov method.<sup>4</sup> In this connection, we also mention the work<sup>5</sup> on the potential  $S_q(r)$ . Furthermore, the bound-state solutions of the Klein–Gordon equation with the vector and scalar potentials (1) were obtained in the framework of the supersymmetric quantum mechanics<sup>6</sup> and by the asymptotic iteration method<sup>7</sup> for the  $s$  waves, i.e., for the angular momentum  $l = 0$ , and in a quantum mechanics way for the  $l$  waves by using a special approximation for the centrifugal term.<sup>8</sup> The latter approximate solutions were extended to the case of a quantum system in the  $D$ -dimensional space.<sup>9</sup>

<sup>a)</sup>Electronic mail: guechilarbi@yahoo.fr.

We point out, however, certain inconsistencies in the recent studies in Refs. 4–9. Since these authors neglected that the potentials  $V_q(r)$  and  $S_q(r)$  have a strong singularity at  $r=(1/\alpha)\ln q$  when  $q \geq 1$  and they gave solutions for the bound-state problem, which do not always fulfill the boundary conditions, we think that it is worthwhile to study rigorously the complete solution of the problem.

In this paper, we propose to discuss in some detail the problem via the path integral approach.

The plan of the present paper is as follows. In Sec. II, we will shortly describe the polar coordinate path integral for the Green's function associated with a charged spinless particle in the presence of radially symmetric vector and scalar potentials. In Sec. III, we present the path integral evaluation for the generalized Hulthén potentials ( $q > 0$ ) by distinguishing two cases:  $0 < q < 1$  and  $q \geq 1$ . When  $q \geq 1$  and  $(1/\alpha)\ln q < r < \infty$ , it is shown that the radial Green's function relative to the potentials under consideration for a state of orbital momentum  $l$  is brought back to the Green's function for the  $q$ -deformed Rosen–Morse potential by using  $1/r^2 \approx q\alpha^2 e^{\alpha r}/(e^{\alpha r} - q)^2$  to approximate the centrifugal term and applying the space-time transformation technique. The analytic expressions of the energy spectrum and the corresponding wave function with a correct normalization factor for any  $l$  are obtained. For  $0 < q < 1$ , the radial Green's function with  $l=0$  relative to the potentials (1) in the range  $(0, +\infty)$  is transformed into the one of the  $q$ -deformed Rosen–Morse potential, which is defined on the half-line  $\xi > (1/2\alpha)\ln(1-q)$ . Then, we calculate the Green's function by incorporating the  $\delta$ -function perturbation and making the strength of this perturbation infinitely repulsive to constitute an impenetrable barrier. The poles of the Green's function yield a transcendental equation for the energy levels. In Sec. IV, we construct the radial Green's function corresponding likewise to the  $s$  waves in the case of the generalized Woods–Saxon potentials ( $q < 0$ ) by converting the path integral relative to these potentials into the one of the  $q$ -deformed Manning–Rosen potential on the half-line  $\xi > (1/2\alpha)\ln(1+|q|)$ . Here, use is made of the same approach through which we calculated the Green's function associated with the generalized Hulthén potentials for  $0 < q < 1$ , and also only a transcendental equation for the bound  $s$ -state energy levels can be stated. In Sec. V, the standard Hulthén potentials ( $q=1$ ), the Woods–Saxon potentials ( $q=-e^{\alpha R}$ ), and the exponential potentials are studied as particular cases. Section VI will be a conclusion.

## II. GREEN'S FUNCTION

In order to construct the path integral for the problem of a spinless relativistic particle under the action of the potentials (1), let us consider the Green's function corresponding to the Klein–Gordon equation

$$[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2]G(x'', x') = \delta^4(x'' - x'), \quad (2)$$

where  $eA = \begin{pmatrix} V_q(r) \\ 0 \end{pmatrix}$  and  $M$  is the mass of a particle of charge  $e$  on flat (Minkowski) space-time endowed with the metric  $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ . To solve this problem, we start from the Schwinger's integral representation to formally write the Green's function as<sup>10–16</sup>

$$G(x'', x') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle x'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [(P - eA)^2 - (M + S_q)^2] \Lambda \right\} | x' \rangle. \quad (3)$$

Since the potentials (1) are Hulthén- or Woods–Saxon-type potentials, we have a spherically symmetric system which may be conveniently described in polar coordinates. The Green's function (3) can be expanded into partial waves

$$G(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (4)$$

where the radial Green's function is given by

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[ -P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] \Lambda \right\} | r', t' \rangle, \quad (5)$$

and  $P_l(\cos \Theta)$  is the Legendre polynomial with  $\cos \Theta = \cos \theta' \cos \theta'' + \sin \theta' \sin \theta'' \cos(\phi'' - \phi')$ . Following Ref. 17, we can express (5) as a pseudotime-sliced path integral

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'', t'', r', t'; S'), \quad (6)$$

where the transformed propagator is given in the canonical form by

$$\begin{aligned} P_l(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} S' f_L(r) \left[ -P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (S_q + M)^2 \right] f_R(r) \right\} | r', t' \rangle \\ &= f_R(r'') f_L(r') \int \int \mathcal{D}r(s') \mathcal{D}t(s') \int \int \frac{\mathcal{D}P_r(s') \mathcal{D}P_0(s')}{(2\pi)^2} \\ &\quad \times \exp \left\{ i \int_0^{S'} ds' \left[ -P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r) \left( -P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (S_q + M)^2 \right) f_R(r) \right] \right\} \\ &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int \int dr_n dt_n \right] \\ &\quad \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right], \quad (7) \end{aligned}$$

in which we have introduced the regulating functions  $f_L(r)$  and  $f_R(r)$  defined by Kleinert<sup>17</sup> as

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r), \quad (8)$$

where  $\lambda$  is the splitting parameter. The path integral (7) involves the short-time action

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[ -(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (S_q(r_n) + M)^2 \right] f_R(r_{n-1}), \quad (9) \end{aligned}$$

with

$$\varepsilon_{s'} = \frac{S'}{N+1} = ds' = \frac{ds}{f_L(r_n) f_R(r_{n-1})}, \quad ds = \varepsilon_s = \frac{\Lambda}{N+1}. \quad (10)$$

Let us first notice that the integrations on the variables  $t_n$  in (7) produce  $N$  Dirac distributions  $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$ . Thereafter, performing the integrations on  $(P_0)_n$ , one finds that

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \cdots = (P_0)_{N+1} = E. \quad (11)$$

The path integral for  $P_l(r'', t'', r', t'; S')$  is then

$$P_l(r'', t'', r', t'; S') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; S'), \quad (12)$$

where the kernel  $P_l(r'', r'; S')$  is given by

$$P_l(r'', r'; S') = f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right], \quad (13)$$

with

$$\mathcal{A}_2^n = -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[ -(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + (E - V_q(r_n))^2 - (S_q(r_n) + M)^2 \right] f_R(r_{n-1}). \quad (14)$$

Substituting (12) into (6), we notice that the  $t$ -dependent term does not contain the pseudotime variable  $S'$ . Thus, we can rewrite the partial Green's function (6) in the form

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (15)$$

where

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'', r'; S'). \quad (16)$$

In order to simplify the calculation of  $P_l(r'', r'; S')$ , let us put the splitting parameter  $\lambda = \frac{1}{2}$ , that is to say, we choose the midpoint prescription since the final result does not depend on any points. Then, by integrating with respect to the variables  $(P_r)_n$ , we find

$$P_l(r'', r'; S') = \frac{[f(r'')f(r')]^{1/4}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f(r_n)}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_3^n \right\}, \quad (17)$$

with the short-time action in configuration space given by

$$\mathcal{A}_3^n = \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'} \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left( \left[ M - \frac{S_0}{e^{\alpha r_n} - q} \right]^2 - \left[ E + \frac{V_0}{e^{\alpha r_n} - q} \right]^2 + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right) \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}. \quad (18)$$

This path integral (17) depends on the arbitrary real deformation parameter  $q$  and cannot be evaluated exactly because of the presence of the centrifugal term. However, it is easy to show that the expression  $q\alpha^2 e^{\alpha r} / (e^{\alpha r} - q)^2$  can be used as a good approximation of the centrifugal term  $1/r^2$  when the parameter  $q \geq 1$ . Indeed, this condition on the parameter  $q$  can be obtained, in an elementary way, by Taylor's expansion of  $q\alpha^2 e^{\alpha r} / (e^{\alpha r} - q)^2$ , or more directly, by plotting  $1/(\alpha r)^2$  and  $e^{\alpha r} / (e^{\alpha r} - q)^2$  as functions of  $\alpha r$  for some characteristic values of  $q$  in Fig. 1. This figure shows that these two expressions have a similar behavior in the interval  $]0, +\infty[$  in the case where  $q \geq 1$ .

In the following, the evaluation of the radial Green's function (16) can be done by distinguishing four cases.

### III. GENERALIZED HULTHÉN POTENTIALS

When the deformation parameter  $q$  is positive, the potentials (1) represent general forms of the Hulthén potential.<sup>1</sup> If  $0 < q < 1$ , the potentials (1) are continuous on the whole interval  $\mathbb{R}^+$ , but, if  $q \geq 1$ , they have a strong singularity at the point  $r = r_0 = (1/\alpha) \ln q$ , creating an impenetrable barrier,

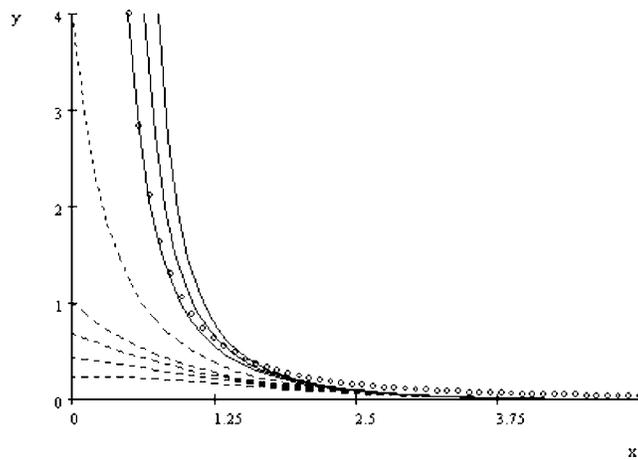


FIG. 1. Solid curves:  $q=1, 1.2, 1.4$ . Dashed curves:  $q=-2, -1, -0.5, -0.2, 0, 0.5$ . Circle curve:  $1/(ar)^2$ .

and in this case, we have two distinct regions, one is defined by the interval  $]0, r_0[$  and the other by the interval  $]r_0, +\infty[$ . This leads us to build the radial Green's function (16) by path integration in each case.

#### A. First case: $q \geq 1$ and $r_0 < r < +\infty$

In this case, we will discuss the path integral for the potentials (1) only in the interval  $]r_0, +\infty[$  since, in the other interval, the solution cannot be analytically obtained. In order to construct the path integral for a state of orbital momentum  $l$ , we first use  $1/r^2 \approx q\alpha^2 e^{ar}/(e^{ar}-q)^2$  as an approximation for  $1/r^2$  in the centrifugal term and we next perform the following space transformation:

$$r \in ]r_0, +\infty[ \rightarrow \xi \in ]-\infty, +\infty[$$

defined by

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln[\exp(2\alpha\xi) + q], \quad (19)$$

accompanied by the appropriate regulating function

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\cosh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi). \quad (20)$$

Under these transformations, the kernel (17) becomes

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S') &= [f(r'')f(r')]^{1/4} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \prod_{n=1}^N \left[ \int d\xi_n \right] \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta\xi_n)^2}{2\varepsilon_{s'}} + \frac{1}{8\varepsilon_{s'}} \left( \left( \frac{g''}{g'} \right)^2 - \frac{2g'''}{3g'} \right) (\Delta\xi_n)^4 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \varepsilon_{s'} \alpha^2 \left( \frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + l(l+1) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\varepsilon_{s'} \alpha^2}{2} \left( q\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q} + \beta^2 \right) \frac{1}{\cosh_q^2(\alpha\xi_n)} \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\left. -\varepsilon_{s'}\alpha^2\left(\varepsilon^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - l(l+1)\right)\tanh_q(\alpha\xi_n)\right\}, \quad (21)$$

where

$$\varepsilon = \frac{1}{\alpha}\sqrt{M^2 - E^2}, \quad \beta = \frac{1}{\alpha}\sqrt{2EV_0 + 2MS_0}, \quad \nu = \frac{1}{\alpha}\sqrt{S_0^2 - V_0^2}. \quad (22)$$

In Eqs. (20) and (21), we have used the deformed hyperbolic functions introduced for the first time by Arai<sup>18</sup>

$$\cosh_q x = \frac{1}{2}(e^x + qe^{-x}), \quad \sinh_q x = \frac{1}{2}(e^x - qe^{-x}), \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}, \quad (23)$$

where  $q$  is a real positive parameter.

Note that the term in  $(\Delta\xi_n)^4$  appearing in the action contained in Eq. (21) contributes significantly to the path integral. It can be estimated by using the formula<sup>19</sup> and replaced by

$$\langle(\Delta\xi_n)^4\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta\xi_n)(\Delta\xi_n)^4 \left(\frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{i}{2\varepsilon_{s'}}(\Delta\xi_n)^2\right] = -3\varepsilon_{s'}^2. \quad (24)$$

After changing  $\alpha\xi_n$  into  $u_n$  and  $\varepsilon_{s'}$  into  $\alpha^{-2}\varepsilon_\sigma$ , the radial Green's function (16), for the  $l$  states, is found to be

$$G_l(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha}[f(r'')f(r')]^{1/4}G_{\text{RM}}^l(u'', u'; \tilde{E}_l), \quad (25)$$

where

$$G_{\text{RM}}^l(u'', u'; \tilde{E}_l) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_l\sigma)P_{\text{RM}}^l(u'', u'; \sigma), \quad (26)$$

with

$$\tilde{E}_l = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \varepsilon^2 + l(l+1) + \frac{1}{4}\right) \quad (27)$$

and

$$P_{\text{RM}}^l(u'', u'; \sigma) = \int \mathcal{D}u(\tau) \exp\left\{i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - V_{\text{RM}}^l(u)\right] d\tau\right\} \quad (28)$$

is the propagator for the Rosen–Morse potential<sup>20</sup> (or general modified Pöschl–Teller potential) defined in terms of  $q$ -deformed hyperbolic functions as

$$V_{\text{RM}}^l(u) = A_l \tanh_q u - \frac{B}{\cosh_q^2 u}, \quad u \in \mathbb{R}. \quad (29)$$

Here, we have set

$$\begin{cases} A_l = \varepsilon^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - l(l+1) - \frac{1}{4} \\ B = \frac{1}{2}\left(q\varepsilon^2 + \frac{\nu^2}{q} + \beta^2 - \frac{q}{4}\right). \end{cases} \quad (30)$$

Since its exact solution is known, we can then directly write down the result<sup>21–23</sup>

$$\begin{aligned}
G_{\text{RM}}^l(u'', u'; \tilde{E}_l) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{1 - \tanh_q u'}{2} \frac{1 - \tanh_q u''}{2} \right)^{(M_1 + M_2)/2} \\
&\times \left( \frac{1 + \tanh_q u'}{2} \frac{1 + \tanh_q u''}{2} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\
&\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh_q u_{>}}{2}\right) \\
&\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh_q u_{<}}{2}\right), \quad (31)
\end{aligned}$$

where the following abbreviations have been used

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \left( \frac{1}{16} + 2E_{\text{PT}'} \right)^{1/2} \\ E_{\text{PT}'} = \frac{1}{2} \left( \frac{v^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \epsilon^2 \right) - \frac{1}{32} \\ M_1 = \epsilon + \delta_{l\pm} + \frac{1}{2}, \quad M_2 = \epsilon - \delta_{l\pm} - \frac{1}{2}, \end{array} \right. \quad (32)$$

with

$$\delta_{l\pm} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{v^2}{q^2} + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \quad (33)$$

Subsequently, we have to take  $\delta_l = \delta_{l+}$  to avoid “the fall to the center.”<sup>24</sup> The radial Green’s function  $G_l(r'', r')$  associated with the potentials (1) for  $q \geq 1$  and in the interval  $]r_0, +\infty[$  is then given by

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r') &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} (q^2 e^{-\alpha(r''+r')})^{(M_1+M_2)/2} [(1 - qe^{-\alpha r''}) \\
&\times (1 - qe^{-\alpha r'})]^{(M_1 - M_2 + 1)/2} {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; qe^{-\alpha r''}) \\
&\times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - qe^{-\alpha r'}). \quad (34)
\end{aligned}$$

The energy spectrum is obtained from the poles of the Green’s function which occur when  $M_1 - L_E = -n_r$ , in the Euler function  $\Gamma(M_1 - L_E)$  where  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . They are given through the equation

$$\epsilon_{n_r, l} = \frac{\beta^2 - q[(n_r + 1)^2 + (2n_r + 1)\delta_l + l(l + 1)]}{2q(n_r + \delta_l + 1)}. \quad (35)$$

Now, from (35) and using (22), we find the energy spectrum

$$E_{n_r, l}^{q \geq 1} = \frac{V_0}{2} \frac{\left[ N + l(l+1) - \frac{2MS_0}{\alpha^2 q} \right]}{q[N + l(l+1)] + \frac{S_0^2}{\alpha^2 q^2}} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + l(l+1) + \frac{v^2}{q^2}}}{q[N + l(l+1)] + \frac{S_0^2}{\alpha^2 q^2}} \\ \times \sqrt{q[N + l(l+1)][4M(Mq + S_0) - \alpha^2 q(N + l(l+1))]}, \quad (36)$$

where

$$N = (n_r + 1)^2 + (2n_r + 1)\delta_l, \quad (37)$$

for which the value of  $n_{r \max}$  is set by

$$n_{r \max} \leq \left\{ -\frac{1}{2} + \frac{1}{\alpha q} \sqrt{(2Mq + S_0 + V_0)(2Mq + S_0 - V_0)} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{S_0^2 - V_0^2}{\alpha^2 q^2}} \right\}, \quad (38)$$

Here,  $\{k\}$  means the largest integer smaller than  $k$ . The existence of the two signs in (36) is a characteristic property of the energies in relativistic quantum mechanics. Its interpretation is straightforward within the domain of quantum field theory. On the other hand, it is obvious that, for the bound states, we have to impose the restriction that only the wave functions  $\Psi_{n_r, l}(r)$  which are proportional to  ${}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1, \frac{1}{2}(1 - \tanh_q u))$  with

$$L_E = -\frac{1}{2} + \left( \frac{v^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \epsilon^2 \right)^{1/2} \quad \text{and} \quad M_1 \in \mathbb{R}, \quad (39)$$

are allowed. It then follows that

$$-M - \frac{S_0}{q} \leq E_{n_r, l}^{q \geq 1} - \frac{V_0}{q} \leq M + \frac{S_0}{q} \quad \text{and} \quad -M \leq E_{n_r, l}^{q \geq 1} \leq M. \quad (40)$$

The wave functions corresponding to the bound states can be found by approximation of the Euler function  $\Gamma(M_1 - L_E)$  near the poles  $M_1 - L_E \approx -n_r$ ,

$$\Gamma(M_1 - L_E) \approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} = \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!} \frac{2\alpha^2 \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l})}{\tilde{n}(A^2 + 1)(\check{E}^2 - (E_{n_r, l}^{q \geq 1})^2)}, \quad (41)$$

where

$$\epsilon_{n_r, l} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r, l}^2}, \quad A = \frac{V_0}{\alpha q \tilde{n}}, \quad \tilde{n} = n_r + \delta_l + 1, \quad (42)$$

and

$$\check{E} = E + \frac{AM}{(A^2 + 1)\tilde{n}} \left[ \frac{S_0}{\alpha q} - \frac{\alpha}{2M} (N + l(l+1)) \right]. \quad (43)$$

Then, using the behavior (41) and taking into consideration the relation [Ref. 25, p. 1043, Eq. (9.131.2)],

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) + (1-z)^{c-a-b} \\ \times \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \quad (44)$$

we notice that the second term in (44) is null because the Euler function  $\Gamma(a)$  is infinite ( $a =$

$-n_r \leq 0$ ). Thus, we are allowed to rewrite the Green's function (34) in the form

$$G_l(r'', r') = \sum_{n_r=0}^{n_r \max} \frac{u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r'') u_{n_r, l}^{q \geq 1*}(r')}{(A^2 + 1)(\tilde{E}^2 - (E_{n_r, l}^{q \geq 1})^2)}, \quad (45)$$

where the wave functions, properly normalized, are

$$u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) = r \Psi_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) = \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l}) \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1)}{\tilde{n} n_r! \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1)} \right]^{1/2} \\ \times \frac{1}{\Gamma(2\epsilon_{n_r, l} + 1)} (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} (qe^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} {}_2F_1(-n_r, \tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1, 2\epsilon_{n_r, l} + 1; qe^{-\alpha r}). \quad (46)$$

Using the relation between the hypergeometric functions and the Jacobi polynomials [Ref. 25, p. 952, Eq. (8.406.1)]

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1\left(-n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-t}{2}\right), \quad (47)$$

we can also express (46) in the form

$$u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) = \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l}) n_r! \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1)}{\tilde{n} \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1)} \right]^{1/2} (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} \\ \times (qe^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} P_l^{(2\epsilon_{n_r, l}, 2\delta_l + 1)}(1 - 2qe^{-\alpha r}). \quad (48)$$

Now, we have to check whether the radial wave function (48) satisfies the boundary conditions

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) = 0 \quad (49)$$

and

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) = 0. \quad (50)$$

When  $r \rightarrow r_0$ , it is clear that (48) fulfills the Hermiticity condition (49) of the radial momentum operator  $\hat{P}_r$ . However, for  $r \rightarrow \infty$ , we have to impose the restriction that only the wave function (48) with  $\epsilon_{n_r, l} > 0$  fulfills condition (50) if  $n_r$  satisfies condition (38).

## B. Second case: $0 < q < 1$ and $r \in \mathbb{R}^+$

The analysis presented above holds, but in this case, the coordinate transformation (19) maps  $r \in \mathbb{R}^+$  into  $\alpha \xi = u \in ]\frac{1}{2} \ln(1-q), +\infty[$ . This means that the kernel (28), for  $l=0$ , is the propagator describing the motion of a particle subjected to a  $q$ -deformed Rosen–Morse-type potential on the half-line  $u > u_0 = \frac{1}{2} \ln(1-q)$ . As direct path integration is not possible, the problem can be solved by a trick which consists in introducing an auxiliary  $\delta$ -function term into the action contained in Eq. (28) to form an impenetrable wall<sup>26</sup> at  $u = u_0 = \frac{1}{2} \ln(1-q)$ . Then, the Green's function (26), for  $l=0$ , becomes

$$G_{\text{RM}}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0 \sigma) P^\delta(u'', u'; \sigma), \quad (51)$$

where

$$P^\delta(u'', u'; \sigma) = \int \mathcal{D}u(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{u}^2}{2} - V^\delta(u) \right] d\tau \right\}. \quad (52)$$

This path integral (52) may be understood as representing the propagator for a particle bounded by a potential of the form

$$V^\delta(u) = V_{\text{RM}}^0(u) - \eta \delta(u - u_0). \quad (53)$$

As is quite apparent from the nontrivial form of the potential (53), path integration of (51) cannot directly be performed. Therefore, we found that it is convenient to apply the perturbation approach, which consists of expressing  $\exp[i\eta \int_{\tau'}^{\tau''} \delta(u - u_0) d\tau]$  in the power series. Then, Eq. (52) can be written as

$$\begin{aligned} P^\delta(u'', u'; \sigma) &= P_{\text{RM}}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\eta)^n}{n!} \prod_{j=1}^n \left[ \int_{\tau'}^{\tau_{j+1}} d\tau_j \int_{-\infty}^{+\infty} du_j \right] P_{\text{RM}}^0(u_1, u'; \tau_1 - \tau') \delta(u_1 - u_0) \\ &\quad \times P_{\text{RM}}^0(u_2, u_1; \tau_2 - \tau_1) \\ &\quad \times \cdots \times \delta(u_{n-1} - u_0) P_{\text{RM}}^0(u_n, u_{n-1}; \tau_n - \tau_{n-1}) \delta(u_n - u_0) \\ &\quad \times P_{\text{RM}}^0(u'', u_n; \tau'' - \tau_n) \\ &= P_{\text{RM}}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\eta)^n \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau_n \int_{\tau'}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \cdots \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_1 \\ &\quad \times P_{\text{RM}}^0(u_0, u'; \tau_1 - \tau') P_{\text{RM}}^0(u_0, u_0; \tau_2 - \tau_1) \\ &\quad \times \cdots \times P_{\text{RM}}^0(u_0, u_0; \tau_n - \tau_{n-1}) P_{\text{RM}}^0(u'', u_0; \tau'' - \tau_n), \end{aligned} \quad (54)$$

where we have ordered the time as  $\tau' = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \cdots < \tau_n < \tau_{n+1} = \tau''$  and  $\sigma = \tau'' - \tau'$ . In order to perform the successive integrations over the variables  $\tau_j$  in Eq. (54), we insert (54) into (51), and making use of the convolution theorem of the Fourier transformation, it is possible to write

$$G_{\text{RM}}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{\text{RM}}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{\text{RM}}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0) G_{\text{RM}}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{\text{RM}}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) - \frac{1}{\eta}}, \quad (55)$$

in which  $G_{\text{RM}}^0(u'', u'; \tilde{E}_0)$  is the Green's function associated with the deformed Rosen–Morse potential (29) for  $l=0$ . Here, the quantities  $\tilde{E}_0$  and  $\delta_0$  are given by

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = - \left( \frac{v^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4} \right) \\ \delta_0 = - \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{v^2}{q^2} + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (56)$$

If we now take the limit  $\eta \rightarrow -\infty$ , the physical system is subjected to move in the potential  $V_{\text{RM}}^0(u)$  bounded by an infinitely repulsive barrier<sup>11,26</sup> at  $u = u_0$ . In this case, the Green's function, for  $l=0$ , is then given by

$$G_0(r'', r') = - \frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{1/4} \tilde{G}_{\text{RM}}(u'', u'; \tilde{E}_0), \quad (57)$$

where

$$\tilde{G}_{\text{RM}}(u'', u'; \tilde{E}_0) = \lim_{\eta \rightarrow -\infty} G_{\text{RM}}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{\text{RM}}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{\text{RM}}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{\text{RM}}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{\text{RM}}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)}. \quad (58)$$

The energy spectrum is determined by the poles of the expression (58), i.e., by the equation  $G_{\text{RM}}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)$ , or as well by the transcendental equation,

$${}_2F_1(\delta + \epsilon - \tilde{Q}, \delta + \epsilon + \tilde{Q}, 2\delta; 1 - q) = 0, \quad (59)$$

where  $\delta = \delta_0 + 1$  and  $\tilde{Q} = \sqrt{\epsilon^2 + \nu^2/q^2 + \beta^2/q}$ . This transcendental equation can be solved numerically.

Using the link between (57) and (31) for  $l=0$ , the Gauss' transformation formula (44) and transforming the variable  $u = \alpha\xi$  into the radial variable by (19), we obtain, for the wave functions corresponding to the bound states, the following expression:

$$u_0^{0 < q < 1}(r) = r\Psi_0^{0 < q < 1}(r) = N(1 - qe^{-\alpha r})^\delta (qe^{-\alpha r})^\epsilon {}_2F_1(\delta + \epsilon - \tilde{Q}, \delta + \epsilon + \tilde{Q}, 2\delta; 1 - qe^{-\alpha r}), \quad (60)$$

where  $N$  is a constant factor.

#### IV. GENERALIZED WOODS–SAXON POTENTIALS

For  $q < 0$ , the potentials (1) represent general forms of the Woods–Saxon potential,<sup>27</sup> which are defined in the interval  $\mathbb{R}^+$  and they can be written in the form

$$V_{\text{WS}}^q(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} + q}, \quad S_{\text{WS}}^q(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} + q}, \quad (61)$$

where the minus sign is absorbed in the parameter  $q$  and, consequently, this latter becomes positive.

To bring the path integral (17), for  $l=0$ , into a solvable form, we proceed similarly as in Sec. III. We perform the following coordinate transformation:

$$r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow \xi \in \left] \frac{1}{2\alpha} \ln(1 + q), +\infty[ \quad (62)$$

defined by

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln[\exp(2\alpha\xi) - q], \quad (63)$$

and we introduce the regulating function

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\sinh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi). \quad (64)$$

After calculations similar to those made in the above section, the radial Green's function (16) can be expressed in terms of the new variable  $\xi$  and the new time  $s'$ . Then, changing  $\alpha\xi$  into  $y = \alpha\xi - \ln\sqrt{q}$  and  $\epsilon_{s'}$  into  $\alpha^{-2}\epsilon_{\sigma}$ , we can write (16), for the  $s$  states, in the following form:

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{1/4} \tilde{G}_{\text{MR}}^0(y'', y'; \tilde{E}_0), \quad (65)$$

where

$$\tilde{G}_{\text{MR}}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P_{\text{MR}}(y'', y'; \sigma) \quad (66)$$

and

$$P_{\text{MR}}(y'', y'; \sigma) = \int \mathcal{D}y(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{y}^2}{2} + A \coth y - \frac{B}{q \sinh^2 y} \right] d\tau \right\}. \quad (67)$$

The constants  $\tilde{E}_0$ ,  $A$ , and  $B$  are given by

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4}\right) \\ A = \frac{\nu^2}{q^2} - \epsilon^2 + \frac{1}{4} \\ B = \frac{1}{2} \left( \frac{\nu^2}{q} + q\epsilon^2 - \beta^2 - \frac{q}{4} \right). \end{cases} \quad (68)$$

The propagator (67) has the same form as the path integral associated with the potential  $V_{\text{MR}}(y)$  introduced by Manning and Rosen<sup>28</sup> to discuss the vibrational states of diatomic molecules. The Manning–Rosen potential is defined for  $y \in \mathbb{R}^+$ , but in the present case, we have converted the path integral for the potentials (61) into a path integral for a Manning–Rosen-type potential by means of the transformation  $r \rightarrow r(y)$ , which maps  $\mathbb{R}^+ \rightarrow ]\frac{1}{2}\ln(1+1/q), +\infty[$ . This means that the motion of the particle takes place on the half-line  $y > y_0 = \frac{1}{2}\ln(1+1/q)$ . To calculate the Green's function, for  $l=0$ , we proceed similarly as in subsection (B) and obtain

$$\tilde{G}_{\text{MR}}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = G_{\text{MR}}(y'', y'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{\text{MR}}(y'', y_0; \tilde{E}_0)G_{\text{MR}}(y_0, y'; \tilde{E}_0)}{G_{\text{MR}}(y_0, y_0; \tilde{E}_0)}, \quad (69)$$

in which  $G_{\text{MR}}(y'', y'; \tilde{E}_0)$  is the Green's function associated with the standard Manning–Rosen potential<sup>28</sup>

$$V_{\text{MR}}(y) = -A \coth y + \frac{B}{q \sinh^2 y}, \quad y > 0. \quad (70)$$

Since its exact solution is known, we can then directly write down the result<sup>21</sup>

$$\begin{aligned} G_{\text{MR}}(y'', y'; \tilde{E}_0) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \left( \frac{2}{1 + \coth y''} \frac{2}{1 + \coth y'} \right)^{(M_1 + M_2 + 1)/2} \\ &\times \left( \frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{(M_1 - M_2)/2} {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 \right. \\ &\left. + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \end{aligned} \quad (71)$$

where the symbols  $y_{>}$  and  $y_{<}$  denote  $\max(y'', y')$  and  $\min(y'', y')$ , respectively.  ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z)$  is the hypergeometric function and the following abbreviations have been used

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{2(A - \tilde{E}_0)} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}} \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} \left( 2 \sqrt{\frac{2B}{q} + \frac{1}{4}} \pm \sqrt{-2(A + \tilde{E}_0)} \right) = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}} \pm \epsilon. \end{cases} \quad (72)$$

The bound-state energy levels are determined by the poles of Eq. (69), i.e., by the equation  $G_{\text{MR}}(y_0, y_0; \tilde{E}_0) = 0$ , or as well by the following quantization condition which is a transcendental equation involving the hypergeometric function:

$${}_2F_1\left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + \delta + Q, 2\epsilon + 1; \frac{q}{q+1}\right) = 0, \quad (73)$$

with

$$\delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{v^2}{q^2}}, \quad Q = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{v^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}}. \quad (74)$$

Using the Green's function (71) of the Manning–Rosen potential and the link between (65) and (71), we find that the wave functions corresponding to the bound states are given by

$$u_0^{q < 0}(r) = N \left( \frac{1}{e^{\alpha r} + q} \right)^\epsilon \left( \frac{1}{1 + qe^{-\alpha r}} \right)^Q {}_2F_1\left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + \delta + Q, 2\epsilon + 1; \frac{q}{e^{\alpha r} + q}\right), \quad (75)$$

where  $N$  is a constant factor.

## V. PARTICULAR CASES

### A. First case: Standard Hulthén potentials

By setting  $q=1$  in the definition (1), we obtain the standard Hulthén potentials

$$V_1(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - 1}, \quad S_1(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - 1}. \quad (76)$$

The parameter  $\delta_l$  defined by expression (33) can be written

$$\delta_l = -\frac{1}{2} + \sqrt{v^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}. \quad (77)$$

The discrete energy spectrum and the normalized wave functions of the bound states can be deduced from Eqs. (36) and (46),

$$E_{n_r, l}^{q=1} = \frac{V_0}{2} \left[ \frac{N + l(l+1) - \frac{2MS_0}{\alpha^2}}{N + l(l+1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2}} \right] \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + l(l+1) + v^2}}{N + l(l+1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2}} \times \sqrt{[N + l(l+1)][4M(M + S_0) - \alpha^2(N + l(l+1))]}, \quad (78)$$

$$u_{n_r, l}^{q=1}(r) = r \Psi_{n_r, l}^{q=1}(r) = \left[ \frac{2\alpha \epsilon_{n_r, l} (\tilde{n} + \epsilon_{n_r, l}) \Gamma(\tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\epsilon_{n_r, l} + 1)}{\tilde{n} n_r! \Gamma(\tilde{n} + \delta_l + 1)} \right]^{1/2} \times \frac{1}{\Gamma(2\epsilon_{n_r, l} + 1)} (1 - e^{-\alpha r})^{\delta_l + 1} (e^{-\alpha r})^{\epsilon_{n_r, l}} {}_2F_1(-n_r, \tilde{n} + 2\epsilon_{n_r, l} + \delta_l + 1, 2\epsilon_{n_r, l} + 1; e^{-\alpha r}). \quad (79)$$

For  $l=0$ , these results coincide with those obtained in Ref. 3.

### B. Second case: Woods–Saxon potentials

By taking  $q = e^{\alpha R}$  and  $\alpha R \gg 1$ , it is possible to obtain from (61) the well known Woods–Saxon potentials

$$V_{\text{WS}}(r) = -\frac{\tilde{V}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad S_{\text{WS}}(r) = -\frac{\tilde{S}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad (80)$$

where  $\tilde{V}_0 = V_0 e^{-\alpha R}$  and  $\tilde{S}_0 = S_0 e^{-\alpha R}$ . The parameter  $R$  is the width of the potential and  $\alpha^{-1}$  is the surface thickness.

In this case, the quantization condition for the  $s$  states can be determined by using the Gauss's transformation formula (44) and noting that  $q/(q+1) \approx 1$  for  $\alpha R \gg 1$ . Thus, Eq. (73) can be written as

$$\frac{\Gamma(2Q)\Gamma(1+\epsilon-\delta-Q)\Gamma(\epsilon+\delta-Q)}{\Gamma(-2Q)\Gamma(1+\epsilon-\delta+Q)\Gamma(\epsilon+\delta+Q)}(e^{-\alpha R})^{-2Q} = -1. \quad (81)$$

In order to simplify the discussion of Eq. (81), we only consider the case where  $Q^2 < 0$ , which according to (74) implies that  $-M < E < -M + \tilde{S}_0 - \tilde{V}_0$  or  $M - \tilde{S}_0 - \tilde{V}_0 < E < M$ , and hence that  $Q$  turns out to be pure imaginary. Writing

$$Q = i\mu \quad (82)$$

and defining  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ , and  $\psi$  as

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma(\epsilon + \delta + i\mu) \\ \phi_2 = \arg \Gamma(\epsilon - \delta + i\mu) \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (83)$$

we can rewrite (81) in the form of

$$\exp\left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan\left(\frac{\mu}{\epsilon - \delta}\right)\right](e^{-\alpha R})^{-2i\mu} = -1. \quad (84)$$

This leads on to the quantization condition

$$\mu\alpha R + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan\left(\frac{\mu}{\epsilon - \delta}\right) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad (85)$$

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

### C. Third case: Exponential potentials

By setting  $q=0$  in expressions (1), we obtain vector and scalar exponential-type potentials given as follows:

$$V(r) = -V_0 e^{-\alpha r}, \quad S(r) = -S_0 e^{-\alpha r}, \quad (86)$$

with the parameters  $V_0$ ,  $S_0$ , and  $\alpha$  defined by  $V_0 = \tilde{V}_0 e^{\alpha r_0}$ ,  $S_0 = \tilde{S}_0 e^{\alpha r_0}$ , and  $\alpha = \eta/r_0$ , where  $\tilde{V}_0$  and  $\tilde{S}_0$  are the depths of the vector and scalar potentials, and  $r_0$  is the equilibrium distance of the two nuclei of the diatomic molecule.

In this case, it can be seen from Eqs. (74) that

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, \quad Q \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q} \\ 1 + \epsilon + Q - \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} \\ \epsilon + Q + \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \rightarrow \infty. \end{array} \right. \quad (87)$$

On the other hand, by using the formula<sup>24</sup>

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (88)$$

it is easy to show that, in the limiting case  $q \rightarrow 0$ , the wave functions (75) become

$$u_0^{q=0}(r) = N(e^{-\alpha r})^\epsilon \exp(-\nu e^{-\alpha r}) {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu}, 2\epsilon + 1; 2\nu e^{-\alpha r}\right). \quad (89)$$

The energy spectrum can be deduced from the boundary condition at  $r=0$ . Considering  $\alpha r_0 \gg 1$  and using the asymptotic expansion, we see from (89) that the quantization condition is given by

$$\frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (90)$$

Taking into account Eqs. (22) and (90), the energy levels are written as

$$E_{n_r}^{q=0} = \frac{\alpha^2 \nu V_0}{S_0^2} \left[ \lambda_{n_r} \pm \sqrt{\lambda_{n_r}^2 - \frac{V_0^2}{S_0^2} \left(\lambda_{n_r} + \frac{M}{\alpha}\right) \left(\lambda_{n_r} - \frac{M}{\alpha}\right)} \right], \quad (91)$$

where

$$\lambda_{n_r} = n_r - \frac{MS_0}{\alpha^2 \nu} + \frac{1}{2}. \quad (92)$$

These results are in agreement with those recently obtained through resolution of Klein–Gordon equation<sup>29</sup> and by applying the asymptotic iteration method.<sup>30</sup> Note that the wave functions (89) and the energy spectrum (91) can be derived also in another way. By starting from the wave functions (60) and proceeding to the limiting case  $q \rightarrow 0$ , we see that

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, \quad \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q} \\ \delta + \epsilon - \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} \\ \delta + \epsilon + \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon + \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \rightarrow \infty. \end{array} \right. \quad (93)$$

Next using formula (88), we recover the wave functions (89) and thus the expression (91) of the energy spectrum. As is expected, the energy spectrum is a continuous function with respect to the parameter  $q$  by crossing the value  $q=0$ .

## VI. CONCLUSION

In this article, the complete solution of the path integral of the relativistic spinless particle with charge  $e$  in the presence of vector and scalar deformed Hulthén and Woods–Saxon potentials has been presented. As we have shown, the path integral for the Green's function associated with

these potentials cannot be evaluated for any deformation parameter  $q$  in a unified manner because of the singularity at  $r=(1/\alpha)\ln q$  and the limiting case  $q=0$ . When  $q \geq 1$  and  $(1/\alpha)\ln q < r < +\infty$ , the radial Green's function for any  $l$  state is directly calculated via a combination of an approximation to the centrifugal term and a suitably chosen space-time transformation. The analytic approximate energy spectrum and the normalized wave functions of the bound states are then obtained from the poles of the Green's function and their residues, respectively. For  $0 < q < 1$  or  $q < 0$ , the path integral evaluation of the radial Green's function is based on the incorporation of an additional  $\delta$ -function potential as a perturbation which has the effect of an impenetrable wall at a given point when the strength is infinite repulsive. In both cases, we have demonstrated that the  $s$  state energy levels are given by transcendental equations involving the hypergeometric function. Three particular cases are considered. They constitute a consistency check for the correctness of our results. The solutions obtained in Refs. 4–9 are at best valid for  $q \geq 1$  and  $(1/\alpha)\ln q < r < +\infty$ . We also point out that the potentials (1) are only supersymmetric and shape invariant when  $q=0$  or  $q \geq 1$  and  $(1/\alpha)\ln q < r < +\infty$ , as shown in Ref. 31.

- <sup>1</sup>L. Hulthén, *Ark Mat., Astron. Fys.* **28A**, 5 (1942).
- <sup>2</sup>F. Domínguez-Adame, *Phys. Lett. A* **136**, 175 (1989).
- <sup>3</sup>L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann, and A. Messouber, *Physica A* **234**, 529 (1996).
- <sup>4</sup>M. Simsek and H. Egrifes, *J. Phys. A* **37**, 4379 (2004).
- <sup>5</sup>H. Egrifes and R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **46**, 935 (2007).
- <sup>6</sup>G. Chen, Z. D. Chen, and Z. M. Lou, *Phys. Lett. A* **331**, 374 (2004).
- <sup>7</sup>E. Olğar, R. Koç, and H. Tütüncüler, *Phys. Scr.* **78**, 015011 (2008).
- <sup>8</sup>W. C. Qiang, R. S. Zhou, and Y. Gao, *Phys. Lett. A* **371**, 201 (2007).
- <sup>9</sup>N. Saad, *Phys. Scr.* **76**, 623 (2007).
- <sup>10</sup>J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 914 (1951).
- <sup>11</sup>R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **80**, 440 (1950).
- <sup>12</sup>R. P. Feynman and A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York, 1965).
- <sup>13</sup>L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- <sup>14</sup>T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi, and T. F. Hammann, *Phys. Scr.* **46**, 289 (1992).
- <sup>15</sup>B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi, and T. F. Hammann, *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis., B* **111**, 99 (1996).
- <sup>16</sup>M. T. Chefrour, F. Benamira, and L. Guechi, *Eur. Phys. J. C* **28**, 395 (2003).
- <sup>17</sup>H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets*, 4th ed. (World Scientific, Singapore, 2006).
- <sup>18</sup>A. Arai, *J. Math. Anal. Appl.* **158**, 63 (1991); *J. Phys. A* **34**, 4281 (2001).
- <sup>19</sup>B. S. Dewitt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957); D. W. McLaughlin and L. S. Schulman, *J. Math. Phys.* **12**, 2520 (1971).
- <sup>20</sup>N. Rosen and P. M. Morse, *Phys. Rev.* **42**, 210 (1932).
- <sup>21</sup>C. Grosche, *J. Phys. A* **38**, 2947 (2005).
- <sup>22</sup>F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri, and M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **48**, 032102 (2007).
- <sup>23</sup>F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri, and M. A. Sadoun, *Ann. Phys.* **322**, 2179 (2007).
- <sup>24</sup>L. D. Landau and E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- <sup>25</sup>I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic, New York, 1965).
- <sup>26</sup>T. E. Clark, R. Menikoff, and D. H. Sharp, *Phys. Rev. D* **22**, 3012 (1980).
- <sup>27</sup>R. D. Woods and D. S. Saxon, *Phys. Rev.* **95**, 577 (1954).
- <sup>28</sup>M. F. Manning and N. Rosen, *Phys. Rev.* **44**, 953 (1933).
- <sup>29</sup>G. Chen, *Phys. Lett. A* **339**, 300 (2005).
- <sup>30</sup>F. Taskin, I. Boztosun, and O. Bayrak, *Int. J. Theor. Phys.* **47**, 1612 (2008).
- <sup>31</sup>F. Benamira, L. Guechi, and A. Zouache, *Phys. Lett. A* **367**, 498 (2007).