

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

N° d'ordre :

Série :

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

Etude approfondie de certains systèmes déformés non relativistes et
relativistes par l'intégrale de chemin

Par

Mohamed Améziane SADOUN

Soutenue le / / 2012

devant le Jury :

Président :	F. Benamira	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
Rapporteur :	L. Guechi	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
Examineurs :	A. Bounames	Prof.	Univ. F. Abbas-Jijel
	M. T. Meftah	Prof.	Univ. Ouargla
	S. R. Zouzou	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
	K. Boudjema	M. C. A	Univ. Khenchela

Table des matières

Introduction	3
1 Formalisme général des intégrales de chemin	6
1.1 Introduction	6
1.2 Intégrales de chemin en coordonnées polaires dans un espace à d dimensions . . .	6
1.3 Méthode des perturbations	11
2 Potentiel diatomique déformé à quatre paramètres	14
2.1 Introduction	14
2.2 Potentiel de Hulthén général	16
2.2.1 Premier cas : $\lambda \geq 1$ et $r_0 < r < \infty$	17
2.2.2 Deuxième cas : $0 < \lambda < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$	21
2.3 Potentiel de Woods-Saxon général	24
2.4 Cas particuliers :	27
2.4.1 Premier cas : potentiel de Hulthén standard	27
2.4.2 Deuxième cas : potentiel écranté	27
2.4.3 Troisième cas : potentiel de Woods-Saxon déformé	28
2.4.4 Quatrième cas : potentiel de Morse	31
3 Potentiel de Hulthén déformé dans un espace à d dimensions	33
3.1 Introduction	33
3.2 Construction de la fonction de Green	34
3.3 Etats liés	37

3.4	Etats de diffusion	39
3.5	Fonction de diffusion	41
4	Particule de Klein-Gordon dans des potentiels vecteur et scalaire de Hulthén et Woods-Saxon généralisés dans un espace à d dimensions	43
4.1	Introduction	43
4.2	Fonction de Green	45
4.3	Potentiels de Hulthén généralisés	49
4.3.1	Premier cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < +\infty$	49
4.3.2	Deuxième cas : $0 < q < 1$ and $r \in \mathbb{R}^+$	56
4.4	Potentiels de Woods-Saxon generalisés	58
4.5	Cas particuliers	61
4.5.1	Premier cas : potentiels de Hulthén standard	61
4.5.2	Deuxième cas : potentiels de Woods-Saxon	62
4.5.3	Troisième cas : potentiels exponentiels	63
4.5.4	Quatrième cas : potentiels de Coulomb	65
	Conclusion	67
	Bibliographie	69
	Annexe	73

Introduction

Le formalisme des intégrales de chemin de Feynman [1] nous offre une nouvelle approche pour résoudre des problèmes de la mécanique quantique. Cette approche est donc, considérée comme une méthode alternative à la mécanique ondulatoire de Schrödinger [2] et à la mécanique des matrices de Heisenberg [3] qui sont deux formulations équivalentes de la mécanique quantique proposées presque simultanément entre les années 1923 et 1927. Cette méthode se présente de façon tout à fait différente. Elle est basée sur la connaissance du Lagrangien classique du système étudié. Elle possède plusieurs avantages en comparaison aux autres méthodes basées sur le Hamiltonien du système. Le champ d'application de l'approche des intégrales de chemin s'étend du domaine non-relativiste au domaine relativiste incluant les théories de champs. Le concept de base de l'approche de l'intégrale de chemin de Feynman est le propagateur qui, comme la fonction de Green, contient toutes les informations sur le système étudié. Cette approche comparée aux autres méthodes présente un grand avantage qui réside dans le fait que le calcul explicite du propagateur ou de la fonction de Green permet de déterminer simultanément le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées à partir du développement spectral. De plus, cette méthode convient à la fois, au traitement des problèmes indépendants du temps et ceux dépendants du temps. Ceci est un autre avantage par rapport aux autres approches.

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 de systèmes à un grand nombre de degrés de liberté où un formalisme du type équation de Schrödinger est beaucoup moins utile.

L'objet de ce travail concerne l'application de l'approche des intégrales de chemin de Feynman à divers systèmes dynamiques à symétrie sphérique intéressant à la fois la physique théo-

rique et la chimie quantique. Dans certains cas, ces systèmes obéissent aux conditions aux limites de Dirichlet [4, 5, 6, 7], c'est à dire, des systèmes qui exigent des conditions aux limites à une distance finie de l'origine des coordonnées qu'il faut imposer lors de la construction de la fonction de Green.

Ce mémoire est subdivisé en quatre chapitres. Dans le chapitre 1, nous présentons des généralités sur le formalisme des intégrales de chemin en coordonnées polaires dans un espace euclidien à d dimensions suivi d'un rappel succinct sur l'introduction d'une fonction régulatrice pour rendre l'intégrale de chemin stable et calculable plus un exposé élémentaire sur la méthode de développement de l'intégrale de chemin contenant un potentiel additionnel $\tilde{V}(x) = -\gamma\delta(x-a)$ en une série de perturbations par rapport à un potentiel principal donné $V(x)$ [8, 9, 7, 10]. Dans le chapitre 2, nous étudions en détail les états liés d'un système quantique dans un potentiel à quatre paramètres, qui est un potentiel à symétrie sphérique pouvant servir comme modèle de description des interactions interatomiques dans certaines molécules diatomiques. La dépendance du potentiel d'un paramètre λ qui caractérise la forme, ne permet pas un traitement quantique de ce problème de façon unifiée quelque soit la valeur réelle de λ . Chaque cas sera considéré à part. Dans le chapitre 3, nous traitons le problème d'une particule qui se déplace sous l'influence d'un potentiel de Hulthén déformé dans un espace à d dimensions. Le dernier chapitre concerne l'étude des états liés d'une particule chargée de charge $(-e)$ et 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 ceux du potentiel de Hulthén et des potentiels vecteur et scalaire, lorsque le paramètre de déformation est supérieur ou égal à l'unité, nous établissons la fonction de Green pour l'onde de moment cinétique l_d sous forme compacte. Nous déduisons de ce résultat le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde convenablement normalisées. Concernant le potentiel de Hulthén déformé, nous examinons aussi les états de diffusion. Nous déterminons le déphasage et la fonction de diffusion associés à l'onde l_d . Pour un paramètre de déformation négatif ou compris entre zéro et l'unité, nous sommes devant un problème de mécanique quantique avec des conditions aux limites dites de Dirichlet représentées par des demi-droites. Ces conditions aux limites sont prises en compte dans l'intégrale de chemin au moyen d'un artifice qui consiste à introduire un potentiel perturbatif décrit par une fonction δ de Dirac dans l'expression de l'action. La fonction de Green relative aux ondes s ($l = 0$)

sera construite sous la forme d'une somme de deux termes compacts à partir de laquelle nous obtenons la condition de quantification de l'énergie et les fonctions d'onde. Nous terminons ce mémoire par une conclusion.

Ce travail de recherche original a donné lieu à trois publications internationales qu'on trouvera en annexe.

Chapitre 1

Formalisme général des intégrales de chemin

1.1 Introduction

Afin d'acquérir une certaine pratique des intégrales de chemin de Feynman [1] en coordonnées polaires avant d'aborder l'étude d'un ensemble de systèmes quantiques gouvernés par des potentiels à symétrie sphérique dépendant d'un paramètre réel de déformation, nous allons donner, dans un premier paragraphe, un aperçu sur la construction du propagateur en coordonnées polaires dans un espace à d dimensions. Dans le deuxième paragraphe, nous exposons succinctement la méthode des perturbations dans le cadre des intégrales de chemin qui va nous servir dans l'étude de certains cas obéissant aux conditions aux limites de Dirichlet [4].

1.2 Intégrales de chemin en coordonnées polaires dans un espace à d dimensions

Les potentiels centraux jouent un rôle très important dans le domaine microscopique, car ils sont souvent utilisés comme approximation de certains potentiels d'interaction en physique et en chimie, entre autres en physique nucléaire, physique atomique et moléculaire et en chimie quantique. Dans ce qui suit, nous allons construire le propagateur relatif à une particule en mouvement dans un espace à d dimensions sous l'influence d'un potentiel $V(\mathbf{x})$. Dans la

représentation canonique, il est défini en coordonnées cartésiennes par l'intégrale de chemin de Feynman [8] de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) &= \int_{\mathbf{x}(t')=\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}(t'')=\mathbf{x}''} \mathfrak{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}) \right) dt \right] \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\epsilon\hbar} \right)^{Nd/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{\mathfrak{R}^d} d\mathbf{x}_k \\
&\quad \times \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{im}{2\epsilon\hbar} (\mathbf{x}_j^2 + \mathbf{x}_{j-1}^2 - 2\mathbf{x}_j \cdot \mathbf{x}_{j-1}) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(\mathbf{x}_j) \right]. \quad (1.1)
\end{aligned}$$

Considérons le cas où $V(\mathbf{x})$ est une fonction de $|\mathbf{x}|$; ($V(|\mathbf{x}|) = V(r)$) et introduisons les coordonnées polaires définies par

$$\begin{cases}
x^1 = r \cos \theta^1 \\
x^2 = r \sin \theta^1 \cos \theta^2 \\
x^3 = r \sin \theta^1 \sin \theta^2 \cos \theta^3 \\
\dots \\
x^{d-1} = r \sin \theta^1 \sin \theta^2 \dots \sin \theta^{d-2} \cos \phi \\
x^d = r \sin \theta^1 \sin \theta^2 \dots \sin \theta^{d-2} \sin \phi
\end{cases} \quad (1.2)$$

où $0 \leq \theta^\nu \leq \pi$ ($\nu = 1, 2, \dots, d-2$), $0 \leq \phi \equiv \theta^{d-1} \leq 2\pi$ et $r = \sum_{\nu=1}^d (x^\nu)^{1/2} \geq 0$.

Utilisons maintenant, le théorème d'addition

$$\cos \psi^{(1,2)} = \cos \theta_1^{(1)} \cos \theta_1^{(2)} + \sum_{m=1}^{d-2} \cos \theta_{m+1}^{(1)} \cos \theta_{m+1}^{(2)} \prod_{n=1}^m \sin \theta_n^{(1)} \sin \theta_n^{(2)} + \prod_{n=1}^{d-1} \sin \theta_n^{(1)} \sin \theta_n^{(2)}, \quad (1.3)$$

où $\psi^{(1,2)}$ est l'angle entre de vecteurs $\mathbf{x}^{(1)}$ et $\mathbf{x}^{(2)}$ tel que $\mathbf{x}^{(1)} \cdot \mathbf{x}^{(2)} = r^{(1)}r^{(2)} \cos \psi^{(1,2)}$. Pour $d = 3$, l'expression (1.3) se réduit à

$$\cos \psi^{(1,2)} = \cos \theta^{(1)} \cos \theta^{(2)} + \sin \theta^{(1)} \sin \theta^{(2)} \cos (\phi^{(1)} - \phi^{(2)}). \quad (1.4)$$

Le tenseur métrique et son déterminant, en coordonnées polaires pour un espace à d dimen-

sions, sont donnés par

$$(g_{ab}) = \text{diag} (1, r^2, r^2 \sin^2 \theta_1, \dots, r^2 \sin^2 \theta_1 \dots \sin^2 \theta_{d-2}), \quad (1.5)$$

$$g = \det (g_{ab}) = \left(r^{d-1} \prod_{k=1}^{d-1} (\sin \theta_k)^{d-k-1} \right)^2. \quad (1.6)$$

La mesure $d\mathbf{x}$ s'exprime comme suit :

$$d\mathbf{x} = r^{d-1} dr d\bar{\Omega} = r^{d-1} \prod_{k=1}^{d-1} (\sin \theta_k)^{d-k-1} dr d\theta_k. \quad (1.7)$$

En coordonnées polaires, l'intégrale de chemin (1.1) à d dimensions se récrit

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; T) &= K^d(r'', \bar{\Omega}'', r', \bar{\Omega}'; T) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\epsilon\hbar} \right)^{Nd/2} \prod_{k=1}^{N-1} \int_0^\infty r_k^{d-1} dr_k \int d\bar{\Omega}_k \\ &\quad \times \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{im}{2\epsilon\hbar} \left(r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} \cos \psi^{(j,j-1)} \right) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(r_j) \right]. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Pour effectuer le calcul intégral sur les variables angulaires, nous pouvons employer la formule de développement de Gegenbauer [11],

$$e^{z \cos \psi} = \left(\frac{z}{2} \right)^{-\nu} \Gamma(\nu) \sum_{l=0}^{\infty} (l + \nu) I_{l+\nu}(z) C_l^\nu(\cos \psi); \quad (\nu \neq 0, -1, -2, \dots), \quad (1.9)$$

où $C_l^\nu(\cos \psi)$ représente un polynôme de Gegenbauer et $I_{l+\nu}(z)$ est une fonction de Bessel modifiée. En posant $\nu = \frac{1}{2}$, nous avons la relation de développement dans un espace à trois dimensions en fonction des polynômes de Legendre (voir Ref.[12], p. 980, Eq. (8.534))

$$e^{z \cos \psi} = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) I_{l+\frac{1}{2}}(z) P_l(\cos \psi). \quad (1.10)$$

Le théorème d'addition de M harmoniques hypersphériques orthonormales S_l^μ , linéairement

indépendantes de degré l , prend la forme

$$\sum_{\mu=1}^M S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}^{(1)}) S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}^{(2)}) = \frac{1}{\Omega(d)} \frac{2l+d-2}{d-2} C_l^{\frac{d-2}{2}}(\cos \psi^{(1,2)}), \quad (1.11)$$

où $M = (2l+d-2)(l+d-3)!/l!(d-3)!$ et $\boldsymbol{\Omega} = \frac{\mathbf{x}}{r}$ est un vecteur unitaire dans l'espace \mathfrak{R}^d . La relation d'orthonormalisation pour ces harmoniques hypersphériques est donnée par

$$\int d\boldsymbol{\Omega} S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}) S_{l'}^{\mu'}(\boldsymbol{\Omega}) = \delta_{ll'} \delta_{\mu\mu'}. \quad (1.12)$$

La combinaison de (1.9) et (1.11) permet d'obtenir la formule de développement suivante :

$$e^{z(\boldsymbol{\Omega}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\Omega}^{(2)})} = e^{z \cos \psi^{(1,2)}} = 2\pi \left(\frac{\pi}{2z}\right)^{\frac{d-2}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^M S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}^{(1)}) S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}^{(2)}) I_{l+\frac{d-2}{2}}(z). \quad (1.13)$$

En effectuant l'intégration sur les variables angulaires, l'intégrale de chemin (1.8) devient alors

$$\begin{aligned} K(r'', \boldsymbol{\Omega}'', r', \boldsymbol{\Omega}'; T) &= (r' r'')^{-\frac{d-2}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^M S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}') S_l^\mu(\boldsymbol{\Omega}'') \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i\varepsilon \hbar}\right)^N \prod_{k=1}^{N-1} \int_0^\infty r_k dr_k \\ &\times \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{im}{2\varepsilon \hbar} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(r_j) \right] I_{l+\frac{d}{2}-1} \left(\frac{m}{i\varepsilon \hbar} r_j r_{j-1} \right). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Nous remarquons que la partie radiale de l'intégrale de chemin est séparée de la partie angulaire. Par conséquent, l'expression (1.14) s'écrit simplement

$$K(r'', \boldsymbol{\Omega}'', r', \boldsymbol{\Omega}'; T) = \frac{(r' r'')^{\frac{1-d}{2}}}{\Omega(d)} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+d-2}{d-2} C_l^{\frac{d-2}{2}}(\cos \psi^{(','')}) K_l^{(d)}(r'', r'; T), \quad (1.15)$$

où le propagateur radial $K_l^{(d)}(r'', r'; T)$ est donné par

$$K_l^{(d)}(r'', r'; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\epsilon\hbar} \right)^{N/2} \prod_{n=1}^{N-1} \int_0^\infty dr_n \prod_{j=1}^N \mu_l^{(d)} \left[\frac{mr_j r_{j-1}}{i\epsilon\hbar} \right] \\ \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\epsilon} (r_j - r_{j-1})^2 - \epsilon V(r_j) \right) \right], \quad (1.16)$$

avec la mesure fonctionnelle

$$\mu_l^{(d)} \left[\frac{mr_j r_{j-1}}{i\epsilon\hbar} \right] = \sqrt{2\pi z_j} e^{-z_j} I_{l+\frac{d-2}{2}} \left(\frac{mr_j r_{j-1}}{i\epsilon\hbar} \right). \quad (1.17)$$

Dans la littérature, on utilise souvent la forme asymptotique des fonctions de Bessel modifiées donnée par

$$I_\nu(z) \simeq (2\pi z)^{-\frac{1}{2}} e^{z - (\nu^2 - \frac{1}{4})/2z}; \quad (|z| \gg 1, \quad \text{Re}(z) > 0). \quad (1.18)$$

L'expression (1.17) devient alors

$$\mu_{l_d}^{(d)}[z_j] \underset{\epsilon \rightarrow 0}{\simeq} \exp \left[-\frac{i\epsilon\hbar}{2mr_j r_{j-1}} l_d(l_d + 1) \right] \quad (1.19)$$

avec $l_d = l + \frac{d-3}{2}$, $d \geq 2$ et $K_{l_d}^{(d)}(r'', r'; T)$ prend la forme

$$K_{l_d}^{(d)}(r'', r'; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\epsilon\hbar} \right)^{N/2} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \dots \int_0^\infty dr_{N-1} \\ \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\epsilon} (r_j - r_{j-1})^2 - \frac{\epsilon\hbar^2 l_d(l_d + 1)}{2m r_j r_{j-1}} - \epsilon V(r_j) \right) \right], \quad (1.20)$$

qui s'écrit encore sous forme compacte ainsi

$$K_{l_d}^{(d)}(r'', r'; T) = \int_{r(t')=r'}^{r(t'')=r''} \mathfrak{D}r(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2 l_d(l_d + 1)}{2m r^2} - V(r) \right] dt \right\}. \quad (1.21)$$

Supposons que le potentiel $V(r)$ est aussi compliqué (potentiel avec singularité) qu'une évaluation directe de l'intégrale de chemin ne soit pas possible. Cependant, il est nécessaire d'effectuer une transformation de coordonnée $r \rightarrow \xi$ représentée par $r = g(\xi)$; accompagnée d'une transformation temporelle $t \rightarrow s$ définie par $dt = f(r) ds$ où $f(r)$ est une fonction régulatrice appropriée. Sous ces transformations, l'intégrale de chemin (1.20) devient

$$\begin{aligned}
K_{l_d}^{(d)}(r'', r'; T) &= [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\epsilon\hbar} \right)^{N/2} \prod_{j=1}^{N-1} \int \frac{dr_j}{\sqrt{f(r_j)}} \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\epsilon} \frac{(\Delta r_j)^2}{\sqrt{f(r_j) f(r_{j-1})}} \right. \right. \\
&\left. \left. - \left(\frac{\epsilon\hbar^2 l_d(l_d+1)}{2m r_j r_{j-1}} - \epsilon V(r_j) \right) \sqrt{f(r_j) f(r_{j-1})} \right] \right\}. \quad (1.22)
\end{aligned}$$

1.3 Méthode des perturbations

La méthode des perturbations, en mécanique quantique standard basée sur les formulations de Schrödinger ou de Heisenberg, est largement utilisée dans la résolution de certains problèmes quantiques. Cependant, cette méthode peut être aussi utilisée dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin de manière beaucoup plus simple et avec plus d'efficacité. Dans ce paragraphe nous allons présenter un rappel sur la technique des perturbations qui sera utilisée ultérieurement. Pour cela, considérons un potentiel $W(x) = V(x) + \tilde{V}(x)$ assez compliqué qu'un calcul direct de l'intégrale de chemin ne soit pas possible et tel que $V(x)$ est un potentiel dont l'intégrale de chemin est supposée connue. Nous écrivons alors le propagateur comme suit

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - W(x) \right] dt \right\} \\
&= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) - \tilde{V}(x) \right] dt \right\} \quad (1.23)
\end{aligned}$$

avec

$$K^{(V)}(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\}. \quad (1.24)$$

La méthode des perturbations consiste d'abord en un développement en série de puissances du terme contenant $\tilde{V}(x)$ de l'intégrale de chemin ($\tilde{V}(x)$ est considéré comme une perturbation). Nous obtenons ainsi

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \int_{\mathfrak{R}^D} d^D x_j \int_{t'}^{t''} dt_j \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; T) \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \cdots \\
&\quad \cdots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; T - t_n) \\
&= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \int_{t'}^{t_{j+1}} dt_j \int_{\mathfrak{R}^D} d^D x_j \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; T) \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \cdots \\
&\quad \cdots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; T - t_n),
\end{aligned} \tag{1.25}$$

où nous avons ordonné les variables temporelles de la manière suivante : $t' = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{n+1} = t''$.

La fonction de Green peut être obtenue en passant par les transformées suivantes :

$$\begin{aligned}
G(x'', x'; E) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dT \exp\left(i\frac{ET}{\hbar}\right) K(x'', x'; T), \\
G^{(V)}(x'', x'; E) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dT \exp\left(i\frac{ET}{\hbar}\right) K^{(V)}(x'', x'; T).
\end{aligned} \tag{1.26}$$

Considérons maintenant le potentiel $W(x)$ ayant la forme particulière

$$W(x) = V(x) - \gamma \delta(x - a), \tag{1.27}$$

où δ représente la fonction de Dirac. est obtenue En suivant les étapes décrites ci-dessus et en utilisant le théorème de convolution des transformations de Fourier, on trouve pour la fonction de Green relative au potentiel (1.27) l'expression suivante :

$$G^{(\delta)}(x'', x'; E) = G^{(V)}(x'', x'; E) - \frac{G^{(V)}(x'', a; E) G^{(V)}(a, x'; E)}{G^{(V)}(a, a; E) - \frac{1}{\gamma}}. \tag{1.28}$$

Ici, nous supposons que la fonction de Green $G^{(V)}(a, a; E)$ existe effectivement, et par conséquent les niveaux d'énergie sont obtenus à partir des solutions de l'équation

$$G^{(V)}(a, a; E_n^{(\delta)}) = \frac{1}{\gamma} \quad (1.29)$$

qui est en général une équation transcendante.

Chapitre 2

Potentiel diatomique déformé à quatre paramètres

2.1 Introduction

Le potentiel à quatre paramètres, introduit en 1999 par Sun [13] comme une fonction potentielle destinée à remplacer le potentiel de Morse [14] en vue de son application dans la description des interactions inter atomiques dans certaines molécules diatomiques, est l'un de ces potentiels à symétrie sphérique que nous nous proposons de traiter dans ce chapitre. En effet, le potentiel à quatre paramètres s'écrit sous la forme suivante

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} v(r), \quad (2.1)$$

avec

$$v(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} - \lambda)^2} - \frac{b}{(e^{\eta r} - \lambda)}, \quad (2.2)$$

où a , b , η sont des constantes réelles définies respectivement par : $a = \frac{2m}{\hbar^2} D_e (e^{\eta r_e} - \lambda)^2$, $b = \frac{4m}{\hbar^2} D_e (e^{\eta r_e} - \lambda)$, D_e est la profondeur du puits de potentiel, r_e est la distance entre les deux noyaux de la molécule diatomique à la position d'équilibre. λ est un paramètre réel qui caractérise la forme du potentiel. Lorsque $\lambda = 0$, l'expression du potentiel (2.2) se confond avec le potentiel radial de Morse. Pour $\lambda > 0$, ce potentiel est appelé potentiel de Hulthén général

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

L'intérêt pour reprendre rigoureusement l'étude de ce potentiel est apparu à la suite de la présentation récente d'un traitement dans le cadre de la mécanique quantique supersymétrique en se servant de la propriété d'invariance de forme du potentiel et par la méthode de quantification WKB en supersymétrie [15]. Il faut signaler que ce traitement n'est pas entièrement correct puisque, d'une part, le potentiel (2.2) présente une forte singularité au point $r = (1/\eta) \ln \lambda$, lorsque $\lambda > 0$ et d'autre part, les fonctions d'onde obtenues ne remplissent pas les conditions aux limites lorsque $r \rightarrow 0$ et $r \rightarrow (1/\eta) \ln \lambda$. Comme il est clair que la méthode de la supersymétrie en mécanique quantique ne s'applique que dans deux cas ($\lambda = 0$ et $\lambda \geq 1$), nous nous proposons de discuter en détail les solutions du problème des états liés en employant l'approche de l'intégrale de chemin.

Le plan de notre discussion est le suivant : dans le second paragraphe, nous allons construire l'intégrale de chemin associée au potentiel de Hulthén général ($\lambda > 0$) en distinguant deux cas selon les valeurs du paramètre de déformation λ . Pour $\lambda \geq 1$ et dans l'intervalle $](1/\eta) \ln \lambda, \infty[$, nous calculons la fonction de Green pour un état de moment cinétique l en adoptant une approximation appropriée pour le potentiel centrifuge et en ramenant l'intégrale de chemin associée au potentiel effectif à celle du potentiel de Rosen-Morse λ -déformé [16] au moyen de la technique spatio-temporelle de Duru-Kleinert [17, 18]. Les énergies du spectre discret $E_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}$ et les fonctions d'onde réduites $\chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}(r)$ convenablement normalisées sont extraites respectivement à partir des pôles de la fonction de Green et de leurs résidus. Lorsque $0 < \lambda < 1$ et $r \in]0, \infty[$, le potentiel de Rosen-Morse λ -déformé est défini sur la demi-droite $\xi > \frac{1}{2\eta} \ln(1 - \lambda)$. Dans ce cas, nous nous bornerons à l'évaluation de la fonction de Green relative aux états $s(l = 0)$ puisque l'approximation adoptée pour le potentiel centrifuge dans le cas précédent n'est plus valable. La démarche de calcul de la fonction de Green est basée sur la théorie des perturbations qui consiste à introduire une fonction δ de Dirac comme une perturbation du potentiel standard de Rosen-Morse et en rendant la force de cette perturbation infiniment repulsive afin de former une barrière impénétrable. Les singularités de la fonction de Green donnent une équation transcendante qui permet de connaître par un calcul numérique les niveaux d'énergie discrets. Les fonctions d'onde non normalisées sont également obtenues. Dans le troisième paragraphe, l'intégrale de chemin relative au potentiel de Woods-Saxon général ($\lambda < 0$) est construite à son

tour de façon similaire au cas précédent en la convertissant à celle du potentiel de Manning-Rosen λ -déformé [19] défini sur la demi-droite $\xi > \frac{1}{2\eta} \ln(1 + \lambda)$. La condition qui permet de déterminer le spectre d'énergie et les fonctions d'onde non normalisées sont données. Enfin, dans le dernier paragraphe nous discuterons quatre cas particuliers : Le potentiel de Hulthén standard, le potentiel écranté, le potentiel de Woods-Saxon déformé et le potentiel radial de Morse.

2.2 Potentiel de Hulthén général

Lorsque le paramètre de déformation est positif, la fonction potentielle (2.2) est une généralisation du potentiel de Hulthén déformé. Pour trouver le spectre d'énergie exact et les fonctions d'onde des états liés, nous pouvons utiliser le formalisme des intégrales de chemin comme approche alternative à la technique de l'invariance de forme et à l'approximation WKB super symétrique.

On commence par construire la fonction de Green des ondes de moment cinétique l ,

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{1}{r'' r'} \int_0^\infty dS P_l(r'', r'; S). \quad (2.3)$$

Suivant la procédure décrite dans le deuxième paragraphe du premier chapitre, le noyau $P_l(r'', r'; S)$ dans un espace à trois dimensions est donné par :

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S) &= [f_R(r'') f_L(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \prod_{j=1}^N \left[\int \frac{dr_j}{\sqrt{f(r_j)}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m(\Delta r_j)^2}{2\varepsilon_s \sqrt{f(r_j) f(r_{j-1})}} \right. \right. \\ &\left. \left. - \varepsilon_s (V_{eff}(r_j) - E) \sqrt{f(r_j) f(r_{j-1})} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

avec

$$V_{eff}(r_j) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_j^2} + V(r_j) \quad (2.5)$$

Signalons d'abord qu'un calcul exact de la fonction de Green radiale (2.3) est impossible à cause du terme potentiel centrifuge. Cependant, nous pouvons prendre une forme approchée

de $V_{eff}(r_j)$ de façon à obtenir une intégrale maniable. Comme $V(r)$ dépend du paramètre de déformation λ , nous distinguons deux cas lorsque $\lambda > 0$. Si $\lambda \geq 1$, $V(r)$ a une forte singularité au point $r = r_0 = (1/\eta) \ln \lambda$ et dans ce cas, il existe deux régions distinctes, la première est déterminée par l'intervalle $]0; r_0[$ et la seconde par l'intervalle $]r_0; +\infty[$. Si $0 < \lambda < 1$, $V(r)$ est continu dans tout l'intervalle \mathbb{R}^+ . Dans ces situations, nous sommes conduits à construire la fonction de Green radiale en envisageant chaque cas.

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

Dans ce cas, le calcul de la fonction de Green des ondes de moment cinétique l est faisable en adoptant l'expression $\frac{\lambda \eta^2 e^{\eta r}}{(e^{\eta r} - \lambda)^2}$ comme approximation du terme $\frac{1}{r^2}$ contenu dans le potentiel centrifuge lorsque $\eta r \ll 1$ et en effectuant ensuite la transformation spatiale $r \rightarrow \xi, r \in]r_0; +\infty[$ et $\xi \in]-\infty, +\infty[$, définie par :

$$r = \frac{1}{\eta} \ln [\exp (2\eta\xi) + \lambda], \quad (2.6)$$

accompagnée de la fonction régulatrice

$$f [r (\xi)] = \frac{\exp (2\eta\xi)}{\cosh_\lambda^2 (\eta\xi)} = [g' (\xi)]^2. \quad (2.7)$$

Sous ces transformations, le développement de la mesure et de l'action autour du point moyen fait apparaître un terme en $(\Delta\xi_j)^4$ qui contribue significativement à l'intégrale de chemin. Il peut être remplacé en utilisant la formule :

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon_s} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3 \left(\frac{\hbar\varepsilon_s}{m} \right)^2. \quad (2.8)$$

Finalement, la fonction de Green (2.3) peut s'écrire ainsi

$$G_l (r'', r'; E) = [f (r'') f (r')]^{\frac{1}{4}} \int_0^\infty dS \exp \left(\frac{i}{\hbar} E_{RM} S \right) P_{RM} (\xi'', \xi'; S), \quad (2.9)$$

où

$$E_{RM} = 2 \left[E - \frac{\eta^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{a}{\lambda^2 \eta^2} + \frac{1}{4} \right) - l(l+1) \right] \right] \quad (2.10)$$

et

$$\begin{aligned}
P_{RM}(\xi'', \xi'; S) &= \int \mathfrak{D}\xi(S) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 2 \left(E + \frac{\eta^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{1}{4} \right) + l(l+1) \right] \right) \tanh_\lambda(\eta\xi) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left[\frac{\eta^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda \eta^2} + \frac{b}{\eta^2} - \frac{\lambda}{4} \right) - \lambda E \right] \frac{1}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}. \quad (2.11)
\end{aligned}$$

Ce noyau représente l'intégrale de chemin associée au potentiel de Rosen-Morse [16] exprimé en termes des fonctions hyperboliques déformées définies par [20] :

$$\cosh_\lambda x = \frac{1}{2} (e^x + \lambda e^{-x}), \quad \sinh_\lambda x = \frac{1}{2} (e^x - \lambda e^{-x}), \quad \tanh_\lambda x = \frac{\sinh_\lambda x}{\cosh_\lambda x}, \quad (2.12)$$

où λ est un paramètre réel. Pour ramener les fonctions hyperboliques déformées aux fonctions hyperboliques habituelles, nous effectuons les transformations spatiale et temporelle suivantes :

$$\begin{cases} \xi = \frac{y}{\eta} \rightarrow u = y - \frac{1}{2} \ln \lambda, \\ ds = \frac{d\tau}{\eta^2} \quad \text{ou} \quad S = \frac{\Lambda}{\eta^2}. \end{cases} \quad (2.13)$$

Sous ces transformations, la fonction de Green (2.9) devient

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{[f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\eta r'' r'} G_{RM} \left(u'', u'; \frac{E}{\eta^2} \right), \quad (2.14)$$

où

$$\begin{aligned}
G_{RM} \left(u'', u'; \frac{E}{\eta^2} \right) &= \int_0^\infty d\Lambda \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{E}{\eta^2} \Lambda \right) \int \mathfrak{D}u(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^\Lambda d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{u}^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{2}{\eta^2} \left(E + \frac{\eta^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{1}{4} \right) + l(l+1) \right] \right) \tanh u \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda^2 \eta^2} + \frac{b}{\lambda \eta^2} - \frac{1}{4} \right) - E \right] \frac{1}{\cosh^2 u} \right] \right\} \quad (2.15)
\end{aligned}$$

est la fonction de Green relative au potentiel de Rosen-Morse ordinaire analysé par différents

auteurs dans le cadre de l'intégrale de chemin [21, 22, 23] . Le résultat est pour $\theta'' < \theta'$:

$$G_{RM}(u'', u'; E) = \frac{m}{i\hbar} \Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E - M_1 + 1) d_{M_1, M_2}^{L_E}(\theta'' - \pi) d_{M_1, M_2}^{L_E*}(\theta') , \quad (2.16)$$

où $d_{M_1, M_2}^{L_E}(\theta)$ est la fonction de Wigner, avec $\tanh u = -\cos \theta, \theta \in (0, \pi)$. Les indices L_E, M_1 et M_2 sont définis par :

$$L_E = -\frac{1}{2} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2} + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda}}, \quad (2.17)$$

$$M_1 = \sqrt{l(l+1) + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{1}{4}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}}, \quad (2.18)$$

$$M_2 = \sqrt{l(l+1) + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{1}{4}} - \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}}. \quad (2.19)$$

Le spectre d'énergie pour les états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (2.16). Ces pôles sont justement ceux de la fonction $\Gamma(M_1 - L_E)$ qui se présentent quand

$$M_1 - L_E = -n_r, \quad (2.20)$$

pour $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$.

En tenant compte des équations (2.17), (2.18) et (2.20), nous trouvons les niveaux d'énergie

$$E_{n_r, l}^{\lambda \geq 1} = -\frac{\eta^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{(n_r + P_l)^2 - \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} - \frac{b}{\eta^2 \lambda}}{(n_r + P_l)} \right)^2, \quad (2.21)$$

avec

$$P_l = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2}} \right). \quad (2.22)$$

Pour déterminer les fonctions d'onde, effectuons l'approximation de la fonction $\Gamma(M_1 - L_E)$ au voisinage des pôles (2.20) ainsi

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{\eta^2 \hbar^2}{m} \frac{Q(n_r + P_l - Q)}{(n_r + P_l)(E - E_{n_r, l})}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

avec

$$Q = \frac{1}{2} \frac{(n_r + P_l)^2 - \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} - \frac{b}{\eta^2 \lambda}}{(n_r + P_l)}, \quad (2.24)$$

et utilisons la propriété de symétrie de la fonction de Wigner [24] :

$$d_{M_1, M_2}^{L_E}(\theta) = (-1)^{L_E - M_1} d_{M_1, -M_2}^{L_E}(\theta - \pi). \quad (2.25)$$

Ceci nous permet d'écrire la partie discrète de la fonction de Green (2.9) sous forme d'un développement spectral :

$$\begin{aligned} G_l(r'', r'; E) &= -i\hbar \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{r''r'} \sum_{n_r=1}^{n_r \max} \eta \frac{Q(n_r + P_l - Q)}{n_r!(n_r + P_l)(E - E_{n_r, l})} \\ &\quad \times d_{-\frac{1}{2} + n_r + P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}, \frac{1}{2} - P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}}^{-\frac{1}{2} + n_r + P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}}(\theta'') d_{-\frac{1}{2} + P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}, \frac{1}{2} - P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}}^{-\frac{1}{2} + n_r + P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}}(\theta') \\ &= i\hbar \sum_{n_r=1}^{n_r \max} \frac{\chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1*}(r') \chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}(r'')}{E - E_{n_r, l}}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

où les fonctions d'onde $\chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}(r)$, convenablement normalisées, sont

$$\chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}(r) = \left[-\frac{Q(n_r + P_l - Q)}{n_r!(n_r + P_l)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{f^{\frac{1}{4}}(r)}{r} d_{-\frac{1}{2} + P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}, \frac{1}{2} - P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}}^{-\frac{1}{2} + n_r + P_l - \frac{Q}{\eta\lambda}}(\theta). \quad (2.27)$$

En utilisant la relation entre les fonctions de Wigner et les fonctions hypergéométriques [24] :

$$\begin{aligned} d_{M_1, M_2}^{L_E}(\theta) &= \left[\frac{\Gamma(L_E + M_1 + 1)\Gamma(L_E - M_2 + 1)}{\Gamma(L_E - M_1 + 1)\Gamma(L_E + M_2 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \frac{1}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \left(\frac{1 - \cos \theta}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \left(\frac{1 + \cos \theta}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\ &\quad \times {}_2F_1 \left(-L_E + M_1, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 - \cos \theta}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.28)$$

et en revenant à la variable initiale, nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}(r) &= \left[\frac{-Q(n_r + P_l - Q) \Gamma(n_r + 2P_l) \Gamma\left(n_r + 2P_l - \frac{2Q}{\eta\lambda}\right)}{(n_r + P_l) n_r! \Gamma\left(n_r - \frac{2Q}{\eta\lambda} + 1\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \frac{1}{\Gamma(2P_l)} (1 - \lambda e^{-\eta r})^{P_l} (\lambda e^{-\eta r})^{-\frac{Q}{\eta\lambda}} \\ &\times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + 2P_l - \frac{2Q}{\eta\lambda}, 2P_l; 1 - \lambda e^{-\eta r}\right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Afin que $\chi_{n_r, l}^{\lambda \geq 1}(r)$ reste finie lorsque $r \rightarrow \infty$, nous devons imposer la condition $Q < 0$. Alors, compte tenu de (2.24) et (2.21), la valeur de $n_{r \max}$ dans (2.26) est égale à

$$n_{r \max} = \left\{ -\sqrt{\frac{1}{4} + \frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + l(l+1)} + \frac{1}{\eta\lambda} \sqrt{a + \lambda b} \right\}. \quad (2.30)$$

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

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

Dans ce cas, l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas précédent n'est plus valable. Nous allons donc nous limiter à l'évaluation de l'intégrale de chemin pour les états s ($l = 0$). De plus, l'analyse présentée ci-dessus ne convient pas du fait que le changement de coordonnées précédent transforme la coordonnée $r \in \mathbb{R}^+$ en une coordonnée $\xi \in \left] \frac{1}{2\eta} \ln(1 - \lambda), +\infty \right[$. Le problème quantique dans ce cas est celui d'une particule en mouvement dans le potentiel de Rosen-Morse λ -déformé sur la demi-droite $\xi > \frac{1}{2\eta} \ln(1 - \lambda)$. Comme une évaluation directe du propagateur pour $l = 0$ n'est pas possible, le problème peut être résolu, suivant la méthode des perturbations décrite dans le premier chapitre, à l'aide d'un artifice de calcul qui consiste à adjoindre au potentiel décrit précédemment, un terme potentiel auxiliaire défini par une fonction δ de Dirac dans l'action contenue dans l'équation (2.4) pour former une barrière impénétrable [4] localisée au point $\xi = \xi_0 = \frac{1}{2\eta} \ln(1 - \lambda)$. L'expression de

la fonction de Green (2.14) pour $l = 0$, devient alors

$$\begin{aligned} G_{RM}^\delta(r'', r'; E) &= \frac{i}{\hbar} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{E}{\eta^2} S\right) P_{RM}^\delta(\xi'', \xi'; S) \\ &= [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}^\delta\left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2}\right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

où

$$G_{RM}^\delta\left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2}\right) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{E}{\eta^2} S\right) P_{RM}^\delta(\xi'', \xi'; S) \quad (2.32)$$

et

$$P_{RM}^\delta(\xi'', \xi'; S) = \int \mathcal{D}\xi(S) \exp\left\{i \int_0^S \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - V_{RM}^\delta(\xi)\right] ds\right\} \quad (2.33)$$

est le propagateur associé à une particule placée dans le potentiel

$$V_{RM}^\delta(\xi) = V_{RM}(\xi) - \frac{\alpha}{\eta} \delta(\xi - \xi_0); \quad \xi \in \mathbb{R}, \quad (2.34)$$

où $V_{RM}(\xi)$ est le potentiel de Rosen-Morse ordinaire.

L'expression de la fonction de Green (2.31), tous calculs faits, s'écrit

$$G_{RM}^\delta\left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2}\right) = G_{RM}\left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2}\right) - \frac{G_{RM}\left(\xi'', \xi_0; \frac{E}{\eta^2}\right) G_{RM}\left(\xi_0, \xi'; \frac{E}{\eta^2}\right)}{G_{RM}\left(\xi_0, \xi_0; \frac{E}{\eta^2}\right) - \frac{1}{\alpha}}, \quad (2.35)$$

dans laquelle $G_{RM}\left(\xi'', \xi'; \tilde{E}\right)$ est la fonction de Green (2.15). Notons que nous devons admettre que la fonction $G_{RM}\left(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}\right)$ existe effectivement. Lorsque $\alpha \rightarrow -\infty$, la particule est forcée de se déplacer sous l'effet du potentiel V_{RM} limité par une barrière répulsive localisée en $\xi = \xi_0$. Alors, la fonction de Green relative au mouvement de la particule sur la demi-droite $\xi > \xi_0$ a

pour expression :

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_{RM} \left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2} \right) &= \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} G_{RM}^{\delta} \left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2} \right) \\
&= G_{RM} \left(\xi'', \xi'; \frac{E}{\eta^2} \right) - \frac{G_{RM} \left(\xi'', \xi_0; \frac{E}{\eta^2} \right) G_{RM} \left(\xi_0, \xi'; \frac{E}{\eta^2} \right)}{G_{RM} \left(\xi_0, \xi_0; \frac{E}{\eta^2} \right)}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Le spectre de l'énergie est déterminé à partir des pôles de (2.36), c'est à dire, par l'équation $G_{RM} \left(\xi_0, \xi_0; \frac{E}{\eta^2} \right) = 0$, ou aussi bien par l'équation transcendante

$${}_2F_1(\nu + P_0 - \varepsilon, \nu + P_0 - \varepsilon, 2P_0; 1 - \lambda) = 0, \tag{2.37}$$

avec les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nu = \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}}, \\ P_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4a}{\eta^2 \lambda^2} + 1}, \\ \varepsilon = L_E + \frac{1}{2} = \sqrt{\frac{a}{\lambda^2 \eta^2} + \frac{b}{\lambda \eta^2} + \nu^2}. \end{array} \right. \tag{2.38}$$

En général, une solution analytique de l'équation (2.37) est pratiquement impossible, c'est pourquoi on fait souvent appel aux méthodes numériques. Les fonctions d'onde correspondantes aux états liés sont obtenues en utilisant le lien entre (2.36) et la fonction de Green (2.14), la relation de passage des fonctions de Wigner aux fonctions hypergéométriques (2.28) et le changement de variables (2.6) permettant le passage de la variable ξ à la variable radiale r . Nous obtenons l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\chi^{0 < \lambda < 1}(r) &= r \Psi^{0 < \lambda < 1}(r) \\
&= C \exp \left(-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r \right) (1 - \lambda e^{-\eta r})^{P_0} \\
&\quad \times {}_2F_1(\nu + P_0 - \varepsilon, \nu + P_0 - \varepsilon, 2\nu + 1; \lambda e^{-\eta r}),
\end{aligned} \tag{2.39}$$

où C est un facteur constant.

2.3 Potentiel de Woods-Saxon général

Dans le cas où λ est négatif, le potentiel (2.1) est défini dans \mathbb{R}^+ et peut être réécrit comme suit :

$$V(r) = \frac{2m}{\hbar^2} v(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} + \lambda)^2} - \frac{b}{(e^{\eta r} + \lambda)}, \quad (2.40)$$

où nous avons fait absorber le signe moins dans le paramètre λ qui, par conséquent, devient positif.

La forme du potentiel (2.40) impose le changement de la coordonnée d'espace

$$r \rightarrow \xi, \quad r \in \mathbb{R}^+, \quad \xi \in \left] \frac{1}{2\eta} \ln(1 + \lambda), +\infty \right[, \quad (2.41)$$

défini par

$$r = \frac{1}{\eta} \ln[\exp(2\eta\xi) - \lambda], \quad (2.42)$$

accompagné par la fonction de transformation

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)}. \quad (2.43)$$

Après quelques calculs élémentaires, nous pouvons mettre la fonction de Green radiale, pour les états s , sous la forme :

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P(\xi'', \xi'; S), \quad (2.44)$$

où

$$\tilde{E} = 2 \left[E - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right] \quad (2.45)$$

et

$$P(\xi'', \xi'; S) = \int \mathcal{D}\xi(S) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + A \coth_\lambda(\eta\xi) - \frac{B}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}. \quad (2.46)$$

Les paramètres A et B ont les valeurs suivantes :

$$A = 2 \left[E + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad B = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda} - b - \frac{\eta^2 \lambda}{4} \right) - \lambda E. \quad (2.47)$$

En passant des fonctions hyperboliques déformées aux fonctions hyperboliques ordinaires à l'aide du changement $y = \eta\xi - \ln \sqrt{\lambda}$, et en introduisant la nouvelle variable temps $s' = \eta^2 s$, l'intégrale de chemin (2.46) devient

$$P(\xi'', \xi'; S) = \eta \int \mathcal{D}y(S') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{S'} ds' \left[\frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{A}{\eta^2} \coth y - \frac{B}{\eta^2 \lambda \sinh y} \right] \right\}. \quad (2.48)$$

Cette expression n'est autre que le propagateur relatif au potentiel $V_{MR}(y)$ de Manning-Rosen [19] proposé pour analyser les états liés de certaines molécules diatomiques. Comme le potentiel de Manning-Rosen est défini dans \mathbb{R}^+ et que dans notre cas ce potentiel est défini dans l'intervalle $]\frac{1}{2} \ln(1 + \frac{1}{\lambda}), \infty[$, l'intégrale de chemin est à calculer sur la demi-droite $y > \frac{1}{2} \ln(1 + \frac{1}{\lambda})$. En procédant de la même manière que dans le cas précédent, nous montrons, par une méthode analogue que

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{MR} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) &= \frac{i}{\eta \hbar} \int_0^\infty dS' \exp \left(\frac{i \tilde{E}}{\hbar \eta^2} S' \right) P(y'', y'; S') \\ &= G_{MR} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) - \frac{G_{MR} \left(y'', y_0; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) G_{MR} \left(y_0, y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right)}{G_{MR} \left(y_0, y_0; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right)}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

expression dans laquelle $G_{MR} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right)$ représente la fonction de Green associée au potentiel de Manning-Rosen standard, dont le résultat, bien connue dans la littérature [22, 25], est donné

par la formule

$$\begin{aligned}
G_{MR} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) &= \frac{m}{\eta \hbar^2} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{2}{1 + \coth y'} \frac{2}{1 + \coth y''} \right)^{(M_1 + M_2 + 1)/2} \\
&\times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \tag{2.50}
\end{aligned}$$

où nous avons posé :

$$L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}}, \quad M_{1,2} = \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2} + \frac{a}{\lambda^2 \eta^2} - \frac{b}{\lambda}} \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}}. \tag{2.51}$$

Les niveaux d'énergie correspondants aux états liés sont obtenus à partir des pôles de la fonction de Green (2.49). Ils sont donnés par l'équation transcendante suivante :

$${}_2F_1 \left(1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + P_0, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + 1; \frac{\lambda}{1 + \lambda} \right) = 0, \tag{2.52}$$

où

$$P_0 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}} \right), \quad \tilde{\beta} = \frac{M_1 + M_2}{2}. \tag{2.53}$$

Les fonctions d'onde correspondantes aux états liés ont la forme :

$$\begin{aligned}
\chi^{\lambda > 0}(r) &= r \Psi^{\lambda > 0}(r) = N \left(\frac{e^{\eta r}}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\tilde{\beta}} \left(\frac{1}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\sqrt{-(2mE/\eta^2 \hbar^2)}} \\
&\times {}_2F_1 \left(1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + P_0, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + 1; \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right). \tag{2.54}
\end{aligned}$$

2.4 Cas particuliers :

2.4.1 Premier cas : potentiel de Hulthén standard

En posant $a = 0$, $b = 2mV_0/\hbar^2$ et $\lambda = 1$ dans l'expression (2.2), nous obtenons le potentiel de Hulthén standard :

$$V(r) = -\frac{V_0}{e^{\eta r} - 1}. \quad (2.55)$$

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états l sont alors

$$E_{N,l} = -\frac{\hbar^2 \eta^2}{8m} \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2 \eta^2 N} - N \right)^2, \quad N = 1, 2, 3, \dots, \left\{ \frac{\sqrt{2mV_0}}{\eta \hbar} \right\}, \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned} \chi_{N,l}^{\lambda=1}(r) &= \left[\frac{-P_N(N-P_N)}{N} \frac{\Gamma(N+l+1)\Gamma\left(N+l-\frac{2P_N}{\eta}+1\right)}{n_r! \Gamma\left(N-l-\frac{2P_N}{\eta}\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \frac{1}{(2l+1)!} (1-e^{-\eta r})^{l+1} (\lambda e^{-\eta r})^{-\frac{P_N}{\eta}} \\ &\times {}_2F_1\left(l-N+1, N+l-\frac{2P_N}{\eta}+1, 2l+2; 1-e^{-\eta r}\right). \end{aligned} \quad (2.57)$$

avec $P_N = \frac{1}{2} \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2 \eta^2 N} - N \right)$, $N = n_r + p_l$ et $p_l = l + 1$. Pour $l = 0$, notons que ces résultats coïncident avec ceux de la littérature [26, 27, 29].

2.4.2 Deuxième cas : potentiel écranté

En posant $\lambda = 1$ et $\eta = \alpha$ dans l'expression (2.1), nous obtenons le potentiel écranté,

$$V(r) = \frac{a}{(e^{\alpha r} - 1)^2} - \frac{b}{(e^{\alpha r} - 1)}, \quad (2.58)$$

où a , b et α sont des constantes réelles et positives définies par $a = \alpha^2 l(l+1)$, $b = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - a$, $V_0 = \alpha Z e^2$, $Z e$ étant la charge des noyaux. Ce potentiel a été proposé par Manning et Rosen pour discuter les états de vibrations des molécules diatomiques [19]. Les paramètres (2.22) et

(2.24) peuvent s'écrire alors

$$P = \alpha(l+1), \quad Q = \frac{\alpha N}{2} - \frac{mZe^2}{N\hbar^2}; \quad N = n_r + l + 1. \quad (2.59)$$

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits respectivement à partir des équations (2.21) et (2.29),

$$E_N = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \left(\frac{2mZe^2}{\alpha \hbar^2 N} - N \right)^2, \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned} \chi_{N,l}^{\lambda=1}(r) &= \left[\frac{-2Q \left(N - \frac{Q}{\alpha} \right) \Gamma(N+l+1) \Gamma\left(N - \frac{2Q}{\alpha} + l + 1\right)}{N \Gamma(N-l) \Gamma\left(N - \frac{2Q}{\alpha} - l\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \\ &\times (1 - e^{-\eta r})^{l+1} e^{Qr} {}_2F_1\left(l+1-N, N - \frac{2Q}{\alpha} + l + 1, 2l+2; 1 - e^{-\eta r}\right), \end{aligned} \quad (2.61)$$

où

$$N = 1, 2, 3, \dots, N_{\max} < \left\{ \sqrt{\frac{2mZe^2}{\alpha \hbar^2}} \right\}. \quad (2.62)$$

Ces résultats coïncident avec ceux obtenus : (i) par la résolution de l'équation de Schrödinger [28]; (ii) depuis longtemps, au moyen de l'intégrale de chemin sur la variété du groupe $SU(1,1)$ [27] (iii) par sommation de la représentation spectrale de la fonction de Green dépendant de l'énergie [29] et, très récemment, (iv) par l'intermédiaire de l'intégration des chemins sur la variété du groupe compact $SU(2)$ [30].

2.4.3 Troisième cas : potentiel de Woods-Saxon déformé

En remplaçant λ par $qe^{\eta R}$ avec $q > 0$ dans l'expression (2.40), nous obtenons une forme spéciale du potentiel de Woods-Saxon déformé

$$V_{WS}(r) = \frac{W_0}{(e^{\eta(r-R)} + q)^2} - \frac{V_0}{e^{\eta(r-R)} + q}, \quad (2.63)$$

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

Dans ce cas, pour obtenir la condition de quantification de l'énergie des états liés, faisons le changement de variable

$$x = \frac{1}{e^{\eta(r-R)} + q}, \quad (2.64)$$

dans (2.54). Ce qui conduit à la forme très simple :

$$\begin{aligned} \chi^{\lambda>0}(r) &= N(1-qx)^{\tilde{\beta}}(qx)^{\sqrt{-(2mE/\eta^2\hbar^2)}} \\ &\times {}_2F_1\left(1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}} - P_0, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}} + P_0, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}} + 1; qx\right). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Lorsque $x \rightarrow 0$ (c'est à dire lorsque $r \rightarrow \infty$), la fonction d'onde $\chi^{\lambda>0}(r)$ se comporte comme

$$\chi^{\lambda>0}(r \rightarrow \infty) \rightarrow \exp\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}}R\right) \exp\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}}r\right). \quad (2.66)$$

Ce comportement asymptotique est correct puisque, pour des raisons physiques, la fonction d'onde $\chi^{\lambda>0}(r)$ doit être bornée à l'infini. Comme il n'est pas possible de déterminer les niveaux d'énergie du spectre discret à partir de cette expression, examinons le comportement de $\chi^{\lambda>0}(r)$ lorsque $x \rightarrow 1$ (c'est à dire lorsque $r \rightarrow 0$). En nous servant de la formule de transformation de Gauss (voir Ref. [12] , p.1043 , Eq. (9.131.2))

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) + (1-z)^{c-a-b} \\ &\times \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \end{aligned} \quad (2.67)$$

on voit que

$$\begin{aligned} \chi^{\lambda>0}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} N \Gamma \left(1 + 2\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} \right) & \left[\frac{\Gamma(-2\tilde{\beta})}{\Gamma(1 - \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0) \Gamma(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + P_0 - \tilde{\beta})} \right. \\ & \left. + \frac{\Gamma(2\tilde{\beta})}{\Gamma(1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0) \Gamma(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + P_0 + \tilde{\beta})} (1 - qx)^{-2\tilde{\beta}} \right]. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Pour simplifier la discussion de cette expression, remarquons que $\tilde{\beta}^2 < 0$, alors nous pouvons poser

$$\tilde{\beta} = i\mu, \quad (2.69)$$

et au voisinage de $r = 0$, on a, à l'approximation d'ordre zéro

$$1 - qx \approx \frac{1}{q} e^{-\eta R}. \quad (2.70)$$

En définissant ϕ_1, ϕ_2 et ψ tels que

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma \left(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} + P_0 + i\mu \right), \\ \phi_2 = \arg \Gamma \left(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0 + i\mu \right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (2.71)$$

et en appliquant à l'expression (2.68) la condition $\lim_{r \rightarrow 0} \chi^{\lambda>0}(r) = 0$, le spectre d'énergie peut être déterminé à partir de l'équation

$$\left(\frac{1}{q} e^{-\eta R} \right)^{i\mu} + \exp \left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0} \right) \right] \left(\frac{1}{q} e^{-\eta R} \right)^{-i\mu} = 0 \quad (2.72)$$

ou aussi bien

$$\cos \left[\mu(\eta R + \ln q) + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan \left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2 \hbar^2}} - P_0} \right) \right] = 0. \quad (2.73)$$

Autrement dit

$$\mu(\eta R + \ln q) + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan\left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2} - P_0}}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \quad (2.74)$$

avec $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Ainsi établie, cette équation nous fournit la relation entre l'énergie E et les paramètres W_0 , V_0 et q du potentiel.

En posant $a = 0$ et $q = 1$, le potentiel (2.63) se réduit au potentiel standard de Woods-Saxon [31]. La condition de quantification (2.74) s'écrit alors

$$\mu\eta R + \psi - 2\phi - \arctan\left(\frac{\mu}{\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}}}\right) = (2n + 1)\frac{\pi}{2}, \quad (2.75)$$

où

$$\begin{cases} \mu = \frac{1}{\eta}\sqrt{V_0 + \frac{2mE}{\hbar^2}}, \\ \phi = \arg \Gamma\left(\sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2}} + i\mu\right), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (2.76)$$

et $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Ces résultats sont identiques à ceux obtenus par la résolution de l'équation de Schrödinger [31].

2.4.4 Quatrième cas : potentiel de Morse

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

$$V_M(r) = ae^{-2\eta r} - be^{-\eta r}, \quad (2.77)$$

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

Dans ce cas, on peut voir facilement des équations (2.22) et (2.38) que

$$\begin{cases} P_0 \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a}}{\eta\lambda}, \\ \nu + P_0 + \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \infty, \\ \nu + P_0 + \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \sqrt{-\frac{2mE}{\eta^2\hbar^2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}}}. \end{cases} \quad (2.78)$$

D'autre part, en utilisant la formule

$$\lim_{b \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(a, b, c; \frac{z}{b}\right) = {}_1F_1(a, c; z), \quad (2.79)$$

il est facile de montrer que pour $\lambda \rightarrow 0$, la fonction d'onde (2.39) prend la forme

$$\begin{aligned} \chi^{0 < \lambda < 1}(r) &= r \Psi^{0 < \lambda < 1}(r) \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} C \exp\left(-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r}\right) \\ &\times {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} + 1; \frac{2\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r}\right). \end{aligned} \quad (2.80)$$

L'expression obtenue représente effectivement les fonctions d'onde radiales relatives au potentiel de Morse. Le spectre d'énergie correspondant peut être déduit à partir de la condition à la limite $r = 0$. En considérant $a \gg 1$ et en utilisant l'expansion asymptotique, la condition de quantification est donnée par

$$\frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = -n_r. \quad (2.81)$$

Ce qui donne

$$E_{n_r} = \frac{\eta^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2} - n_r\right)^2; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \left\{\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2}\right\}, \quad (2.82)$$

où $\left\{\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2}\right\}$ signifie le plus grand entier inférieur à $\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2}$.

Chapitre 3

Potentiel de Hulthén déformé dans un espace à d dimensions

3.1 Introduction

Il y a une littérature très abondante sur l'utilisation du potentiel de Hulthén [32, 71] comme une bonne approximation du potentiel d'interaction entre deux corps dans plusieurs branches de la physique entre autres la physique nucléaire [34], la physique atomique [28, 35, 36, 37, 38, 39] et la physique moléculaire [40]. Le problème des états liés et des états de diffusion avec le nombre quantique orbital $l = 0$ a été étudié à l'aide de différentes techniques telles que l'approche d'intégration des chemins sur la variété du groupe compact $SU(2)$ [26] et celle du groupe non compact $SU(1,1)$ [27], la méthode algébrique basée sur la structure du groupe $SO(2,1)$ [41], le formalisme de la mécanique quantique supersymétrique dans le cadre de la méthode des variations [42], la supersymétrie et la propriété d'invariance de forme [43] et la méthode d'itération asymptotique [44]. Le traitement des états liés d'ordre $l \neq 0$ a été également proposé par plusieurs auteurs en travaillant avec une approximation adéquate du terme potentiel centrifuge dans le cadre de diverses méthodes [41, 45, 46, 47, 48, 49, 50]. Dans un espace à d dimensions, les solutions des états l en adoptant une approximation de forme exponentielle ont été obtenues en utilisant successivement la méthode conventionnelle de Nikiforov-Uvarov [51], l'approche d'une nouvelle règle de quantification [52] et la règle de quantification améliorée [53].

Dans ce chapitre, nous nous proposons d'analyser le problème d'une particule mobile dans un espace à d dimensions sous l'effet du potentiel de Hulthén déformé défini par l'expression

$$V(r) = -\frac{Z\alpha e^2}{e^{\alpha r} - q}, \quad (3.1)$$

où α est le paramètre écran, Z est une constante positive qui peut être confondue avec le nombre atomique lorsqu'il s'agit d'un phénomène atomique et q est le paramètre réel de déformation.

Nous allons appliquer dans ce qui suit l'approche de l'intégrale de chemin pour construire la fonction de Green partielle associée à l'onde l . Nous passerons ensuite à l'étude des états liés et des états de diffusion pour $q > 1$. Nous calculerons enfin les déphasages et la fonction de diffusion.

3.2 Construction de la fonction de Green

Dans un espace euclidien à d dimensions, la fonction de Green radiale, qui est la transformée de Fourier du propagateur (1.22) pour un potentiel à symétrie sphérique, s'écrit

$$\begin{aligned} G_{l_d}^{(d)}(r'', r'; E) &= \frac{1}{(r'' r')^{\frac{d-1}{2}}} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} E S\right) K_l^{(d)}(r'', r'; S) \\ &= \frac{1}{(r'' r')^{\frac{d-1}{2}}} \int_0^\infty dS P_l^{(d)}(r'', r'; S), \end{aligned} \quad (3.2)$$

où le noyau $P_{l_d}^{(d)}(r'', r'; S)$ est donné explicitement par :

$$\begin{aligned} P_{l_d}^{(d)}(r'', r'; S) &= [f_R(r'') f_L(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \prod_{j=1}^N \left[\int \frac{dr_j}{\sqrt{f(r_j)}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m (\Delta r_j)^2}{2\varepsilon_s \sqrt{f(r_j) f(r_{j-1})}} \right. \right. \\ &\left. \left. - \varepsilon_s \left(\frac{\hbar^2 l_d (l_d + 1)^2}{2m r_j^2} + V(r_j) - E \right) \sqrt{f(r_j) f(r_{j-1})} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

avec $l_d = l + \frac{d-3}{2}$, $d \geq 2$.

Pour le potentiel de Hulthén déformé (3.1), en prenant en considération l'approximation du terme potentiel centrifuge employée dans le chapitre précédent dans le cas où $q \geq 1$, et en effectuant la transformation spatiale $r \rightarrow \xi, r \in]\frac{1}{\alpha} \ln q; +\infty[$ et $\xi \in]-\infty, +\infty[$, définie par :

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln [\exp (2\alpha\xi) + q], \quad (3.4)$$

accompagnée de la fonction régularisatrice

$$f [r (\xi)] = \frac{\exp (2\alpha\xi)}{\cosh_q^2 (\alpha\xi)} = [g' (\xi)]^2, \quad (3.5)$$

la fonction de Green radiale (3.2) se met sous la forme :

$$G_l^{(d)} (r'', r'; E) = \frac{[f (r'') f (r')]^{\frac{1}{4}}}{(r'' r')^{\frac{d-1}{2}}} \int_0^\infty dS \exp \left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S \right) P_{RM} (\xi'', \xi'; S), \quad (3.6)$$

où l'énergie \tilde{E} est donnée par :

$$\tilde{E} = 2E - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} \left(l_d + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (3.7)$$

et

$$P_{RM} (\xi'', \xi'; S) = \int \mathfrak{D}\xi (S) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + \tilde{E} \tanh_q (\alpha\xi) + \left(Z\alpha e^2 - q \left(E + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \right) \right) \frac{1}{\cosh_q^2 (\alpha\xi)} \right] \right\}. \quad (3.8)$$

Notons qu'après un développement de la mesure et de l'action autour du point moyen, le terme en $(\Delta\xi_j)^4$ est évalué en utilisant la relation :

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^\infty d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon_{s'}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{2\hbar\varepsilon_{s'}} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3 \left(\frac{\hbar}{m\varepsilon_{s'}} \right)^2. \quad (3.9)$$

Le noyau (3.8) représente l'intégrale de chemin associée au potentiel de Rosen-Morse [16]

affecté du paramètre de déformation réel q . Pour exprimer les fonctions hyperboliques déformées en termes des fonctions hyperboliques habituelles, nous opérons le changement de variable et la transformation temporelle suivants :

$$\begin{aligned}\xi = \frac{y}{\alpha} &\rightarrow u = y - \ln \sqrt{q}, \\ ds = \frac{d\tau}{\alpha^2} &\text{ ou } S = \frac{\Lambda}{\alpha^2}.\end{aligned}\quad (3.10)$$

Sous ces transformations de coordonnées et d'échelle temporelle, la fonction de Green (3.6) devient

$$G_l^{(d)}(r'', r'; E) = \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\alpha (r''r')^{\frac{d-1}{2}}} G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}), \quad (3.11)$$

dans laquelle $G_{RM}(u'', u'; \tilde{E})$ est donnée par :

$$\begin{aligned}G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}) &= \int_0^\infty d\Lambda \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Lambda \frac{\tilde{E}}{\alpha^2}\right) \int \mathcal{D}u(\tau) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^\Lambda d\tau \left[\frac{m}{2} \dot{u}^2\right.\right. \\ &\quad \left.\left. + \frac{\tilde{E}}{\alpha^2} \tanh u + \frac{1}{\alpha^2} \left[\frac{Z\alpha e^2}{q} - \left(E + \frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m}\right)\right] \frac{1}{\cosh^2 u}\right]\right\}.\end{aligned}\quad (3.12)$$

C'est la fonction de Green relative au potentiel de Rosen-Morse standard. Son expression sous forme compacte est bien connue dans la littérature [22]. Elle s'écrit

$$G_{RM}(u'', u'; E) = \frac{m}{i\hbar} \Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E - M_1 + 1) d_{M_1, M_2}^{L_E}(\vartheta'' - \pi) d_{M_1, M_2}^{L_E*}(\vartheta'); \quad \vartheta'' < \vartheta', \quad (3.13)$$

où $d_{m_1, m_2}^{L_E}(\vartheta)$ est la fonction de Wigner [24], avec $\tanh u = -\cos \vartheta, \vartheta \in (0, \pi)$. Les indices L_E, M_1 et M_2 sont définis par :

$$L_E = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \alpha^2} \left(\frac{\alpha Z e^2}{q} - E\right)}, \quad (3.14)$$

$$M_1 = \frac{1}{2} + l_d + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2}}, \quad (3.15)$$

$$M_2 = -\frac{1}{2} - l_d + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2}}. \quad (3.16)$$

3.3 Etats liés

Le spectre d'énergie pour les états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (3.13). Ces pôles sont justement ceux de la fonction $\Gamma(M_1 - L_E)$ qui se présentent quand

$$M_1 - L_E = -n_r \quad (3.17)$$

pour $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$.

En tenant compte des équations (3.14), (3.15) et (3.17) les niveaux d'énergie s'écrivent ainsi

$$E_{n_r, l}^{q \geq 1} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \left(\frac{2mZe^2}{q\hbar^2 \alpha N} - N \right)^2, \quad (3.18)$$

où $N = n_r + l_d + 1$ est le nombre quantique principal. Pour trouver les fonctions d'onde, effectuons l'approximation de la fonction $\Gamma(M_1 - L_E)$ au voisinage des pôles (3.17)

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!} \frac{\hbar^2 \alpha^2}{mN} \frac{\kappa(\kappa + N)}{\left(E - E_{N, l}^{q \geq 1}\right)}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

où

$$\kappa = \frac{1}{2} \left(\frac{2mZe^2}{q\hbar^2 \alpha N} - N \right). \quad (3.20)$$

L'utilisation de la propriété de symétrie des fonctions de Wigner permet d'écrire la fonction de Green (3.13) sous la forme suivante

$$\begin{aligned} G_l^{(d)}(r'', r'; E) &= i\hbar \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{(r''r')^{\frac{d-1}{2}}} \sum_{N=l_d+1}^{N_{\max}} \frac{\alpha\kappa(\kappa + N)}{n_r! N \left(E - E_{N, l}^{q \geq 1}\right)} \\ &\quad \times \Gamma(L_E - M_1 + 1) d_{M_1, M_2}^{L_E}(\vartheta'') d_{M_1, M_2}^{L_E^*}(\vartheta') \\ &= i\hbar \sum_{N=l_d+1}^{N_{\max}} \frac{\chi_{N, l_d}^{q \geq 1*}(r') \chi_{N, l_d}^{q \geq 1}(r'')}{E - E_{N, l_d}}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Ainsi, nous obtenons les fonctions d'onde en termes des fonctions de Wigner

$$\chi_{N,l_d}^{q \geq 1}(r) = \frac{f^{\frac{1}{4}}(r)}{(r)^{\frac{d-1}{2}}} \left[\frac{\alpha \kappa (\kappa + N)}{N} \right]^{\frac{1}{2}} d_{\frac{1}{2}+l_d+\kappa, -\frac{1}{2}-l_d+\kappa}^{-\frac{1}{2}+N+\kappa}(\vartheta). \quad (3.22)$$

Enfin, en utilisant le lien entre les fonctions de Wigner et les fonctions hypergéométriques, les fonctions d'ondes relatives au potentiel de Hulthén déformé dans un espace à d dimensions prennent la forme suivante :

$$\begin{aligned} \chi_{N,l_d}^{q \geq 1}(r) &= \frac{1}{(r)^{\frac{d-1}{2}}} \left[\frac{2\alpha \kappa (\kappa + N)}{N} \frac{\Gamma(N + 2\kappa + l_d + 1) \Gamma(N + l_d + 1)}{\Gamma(N - 1) \Gamma(N + 2\kappa - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \frac{1}{\Gamma(2l_d + 2)} (qe^{-\alpha r})^\kappa (1 - qe^{-\alpha r})^{l_d+1} \\ &\times {}_2F_1(-N + l_d + 1, N + 2\kappa + l_d + 1, 2l_d + 2; 1 - qe^{-\alpha r}). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Afin que la fonction $\chi_{N,l_d}^{q \geq 1}(r)$ reste finie pour $r \rightarrow \infty$, on doit imposer la condition $\kappa > 0$. Alors, compte tenu de (3.20), la valeur de N dans (3.18) est donnée par :

$$N_{\max} = \left\{ \frac{e}{\hbar} \sqrt{\frac{2mZ}{q\alpha}} \right\}. \quad (3.24)$$

Ici $\{k\}$ signifie le plus grand entier inférieur à k . Dans un espace à trois dimensions et lorsque $q = 1$, ce résultat coïncide avec ceux obtenus par la méthode d'intégration des chemins sur la variété du groupe non compact $SU(1, 1)$ [27] et par sommation de la représentation spectrale de la fonction de Green [29]. En posant $q = 1$, $l = 0$ et en se limitant à l'espace à trois dimensions ($d = 3$), nous obtenons les résultats suivants pour le spectre d'énergie et les fonctions d'onde

$$E_{n_r} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{8m} \left(\frac{2mZe^2}{q\hbar^2 \alpha (n_r + 1)} - (n_r + 1) \right)^2, \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned}
r\chi_{n_r}(r) &= \left[\frac{2\alpha\kappa'(n_r+1+\kappa')}{(n_r+1)} \frac{\Gamma(n_r+2\kappa'+2)\Gamma(n_r+2)}{\Gamma(n_r+2\kappa'+2)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times (e^{-\alpha r})^{\kappa'} (1-e^{-\alpha r}) {}_2F_1(-n_r, n_r+2\kappa'+2, 2; 1-e^{-\alpha r}).
\end{aligned} \tag{3.26}$$

où $n_{\max} = \left\{ -1 + \frac{\epsilon}{\hbar} \sqrt{\frac{2mZ}{q\alpha}} \right\}$ et $\kappa' = \frac{1}{2} \left[\frac{2mZe^2}{\alpha\hbar^2(n_r+1)} - (n_r+1) \right]$.

Ces résultats sont identiques avec ceux obtenus par l'approche d'intégration des chemins sur la variété du groupe compact $SU(2)$ [26].

3.4 Etats de diffusion

Pour évaluer la contribution du spectre continu à la fonction de Green, exprimons (3.11) sous la forme intégrale

$$\begin{aligned}
G_l^{(d)}(r'', r'; E) &= \frac{\hbar}{2\pi\alpha} \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{(r''r')^{\frac{d-1}{2}}} \oint_C \frac{zdz}{E+i0 - \frac{\hbar^2 z^2}{2m}} \\
&\times \Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E - M_1 + 1) d_{M_1, -M_2}^{L_E}(\vartheta'' - \pi) d_{M_1, M_2}^{L_E*}(\vartheta'),
\end{aligned} \tag{3.27}$$

où le contour C est un demi-cercle dans le demi-plan supérieur. En tenant compte du comportement asymptotique des fonctions $d_{M_1, M_2}^{L_E}(\vartheta)$, il est facile de montrer que l'intégrale (3.27) se réduit à

$$\begin{aligned}
G_l^{(d)}(r'', r'; E) &= -\frac{\hbar}{2\pi\alpha} \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{(r''r')^{\frac{d-1}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{kdk}{E+i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \\
&\times \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{s}{2} + M_1\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{s}{2} - M_1\right) d_{M_1, -M_2}^{\frac{s-1}{2}}(\vartheta'') d_{M_1, M_2}^{\frac{s-1}{2}*}(\vartheta'),
\end{aligned} \tag{3.28}$$

où nous avons posé

$$\begin{cases} s = 2 \left[\frac{2mZe^2}{q\hbar^2\alpha} - \frac{k^2}{\alpha^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ M_1 = \frac{1}{2} + l_d + \kappa = \frac{1}{2} + l_d + i\frac{k}{\alpha}, \\ M_2 = -\frac{1}{2} - l_d + \kappa = -\frac{1}{2} - l_d + i\frac{k}{\alpha}, \end{cases} \tag{3.29}$$

Ensuite, en utilisant la continuation analytique de la relation [24]

$$d_{M_1, M_2}^{-L-1}(\vartheta) = d_{M_2, M_1}^L(\vartheta), \quad (3.30)$$

et les propriétés de symétrie suivantes [24] des fonctions $d_{M_1, M_2}^L(\vartheta)$:

$$d_{-M_1, -M_2}^L(\vartheta) = (-)^{M_2 - M_1} d_{M_2, M_1}^L(\vartheta), \quad (3.31)$$

$$d_{M_2, M_1}^L(\vartheta) = (-)^{M_2 - M_1} d_{M_1, M_2}^L(\vartheta), \quad (3.32)$$

nous pouvons montrer que

$$\begin{aligned} g_{l_d}(r'', r'; E) &= (r'' r')^{\frac{d-1}{2}} [f(r'') f(r')]^{-\frac{1}{4}} G_l(r'', r'; E) \\ &= (-1)^{l_d} \frac{\hbar}{2\pi\alpha} \int_0^{+\infty} \frac{k dk}{E + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} e^{i\pi(\frac{1}{2} - \frac{ik}{\alpha})} \\ &\quad \times \left[\Gamma\left(1 + l_d - \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}\right) \Gamma\left(-l_d + \frac{s}{2} - \frac{ik}{\alpha}\right) - e^{-2\frac{k\pi}{\alpha}} \Gamma\left(1 + l_d - \frac{s}{2} - \frac{ik}{\alpha}\right) \right. \\ &\quad \left. \times \Gamma\left(-l_d + \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}\right) \right] d_{M_1, -M_2}^{\frac{s-1}{2}}(\vartheta'') d_{M_1, M_2}^{\frac{s-1}{2}*}(\vartheta'), \end{aligned} \quad (3.33)$$

A l'aide de la formule de transformation de Gauss (voir Ref. [12], p. 1043, Eq. (9.132.2))

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c) \Gamma(b-a)}{\Gamma(b) \Gamma(c-a)} (-z)^{-a} {}_2F_1\left(a, a-c+1, a-b+1; \frac{1}{z}\right) + \\ &\quad \frac{\Gamma(c) \Gamma(a-b)}{\Gamma(a) \Gamma(c-b)} (-z)^{-b} {}_2F_1\left(b, b-c+1, b-a+1; \frac{1}{z}\right), \end{aligned} \quad (3.34)$$

avec la portée de validité $|\arg(-z)| < \pi$, $a - b \neq \pm m$, $m = 0, 1, 2, 3, \dots$, appliquée à

$$\begin{cases} a = 1 + l_d - \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}, \\ b = 1 + l_d - \frac{s}{2} - \frac{ik}{\alpha}, \quad z = 1, \end{cases} \quad (3.35)$$

et la relation

$${}_2F_1(a, b, c; 1) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}, \quad (3.36)$$

valable pour $\text{Re}(c) > \text{Re}(a+b)$, nous pouvons simplifier l'expression entre crochets dans l'équation (3.33) pour arriver finalement à

$$\begin{aligned} G_l(r'', r'; E) &= \frac{i\hbar [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{4\pi (r''r')^{\frac{d-1}{2}}} \int_0^{+\infty} \frac{dk}{E + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \\ &\times \left| \frac{\Gamma(1+l_d - \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}) \Gamma(-l_d + \frac{s}{2} - \frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{2ik}{\alpha})} \right|^2 d_{M_1, -M_2}^{\frac{s-1}{2}}(\vartheta'') d_{M_1, M_2}^{\frac{s-1}{2}*}(\vartheta') \\ &= \frac{i\hbar}{(r''r')^{\frac{d-1}{2}}} \int_0^{+\infty} dk \frac{\chi_{k, l_d}^*(r') \chi_{k, l_d}(r'')}{E + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

où les fonctions d'onde, convenablement normalisées, sont

$$\begin{aligned} \chi_{k, l}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left| \frac{\Gamma(1+l_d - \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}) \Gamma(-l_d + \frac{s}{2} - \frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{2ik}{\alpha})} \right| f^{\frac{1}{4}}(r) d_{M_1, M_2}^{\frac{s-1}{2}}(\vartheta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left| \frac{\Gamma(1+l_d - \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}) \Gamma(-l_d + \frac{s}{2} - \frac{ik}{\alpha})}{\Gamma(\frac{2ik}{\alpha})} \right| \frac{1}{\Gamma(2l_d + 2)} e^{-ikr} \\ &\times (1 - qe^{-\alpha r})^{l_d+1} {}_2F_1\left(1+l_d - \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}, 1+l_d + \frac{s}{2} + \frac{ik}{\alpha}, 2l_d + 2; 1 - qe^{-\alpha r}\right), \end{aligned} \quad (3.38)$$

avec $E_{k, l_d} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

3.5 Fonction de diffusion

La fonction de diffusion S_{l_d} associée à l'onde partielle l_d est obtenue à partir du comportement asymptotique de la fonction d'onde $\chi_{k, l_d}(r)$. En utilisant la formule de transformation de Gauss (2.67), nous pouvons récrire (3.38) ainsi

$$\begin{aligned}
\chi_{k,l_d}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left| \frac{\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(-l_d+\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(\frac{2ik}{\alpha}\right)} \right| (1-qe^{-\alpha r})^{l_d+1} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(2l_d+2)} \left\{ \frac{\Gamma\left(-\frac{2ik}{\alpha}\right)e^{-ikr}}{\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}\right)} \right. \\
&\times {}_2F_1\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}, 1+l_d+\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}, 1+\frac{2ik}{\alpha}+1; qe^{-r/b}\right) \\
&+ \frac{\Gamma\left(\frac{2ik}{\alpha}\right)e^{ikr}}{\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)} \\
&\left. \times {}_2F_1\left(1+l_d+\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}, 1+l_d-\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}, 1-\frac{2ik}{\alpha}; qe^{-\alpha r}\right) \right\}. \quad (3.39)
\end{aligned}$$

Si nous faisons tendre $r \rightarrow \infty$ dans (3.39) et compte tenu du fait que les deux fonctions hyperg om etriques tendent vers l'unit e lorsque $r \rightarrow \infty$, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\chi_{k,l_d}(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos\left(kr + \arg \frac{\Gamma\left(\frac{2ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)}\right) \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr + \frac{\pi}{2} + \arg \frac{\Gamma\left(\frac{2ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)}\right). \quad (3.40)
\end{aligned}$$

En effet, cette expression asymptotique de $\chi_{k,l_d}(r)$ pour des valeurs grandes de r s' crit encore

$$\chi_{k,l_d}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr + -\frac{l_d\pi}{2} + \delta_{l_d}\right), \quad (3.41)$$

o  le d phasage δ_{l_d} est donn  par :

$$\delta_{l_d} = (l_d+1)\frac{\pi}{2} + \arg \frac{\Gamma\left(\frac{2ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)}. \quad (3.42)$$

On obtient ainsi la fonction de diffusion

$$\begin{aligned}
S_{l_d} &= e^{2i\delta_{l_d}} \\
&= (-1)^{l_d+1} \frac{\Gamma\left(\frac{2ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}-\frac{ik}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(-\frac{2ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d-\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)\Gamma\left(1+l_d+\frac{s}{2}+\frac{ik}{\alpha}\right)}. \quad (3.43)
\end{aligned}$$

Chapitre 4

Particule de Klein-Gordon dans des potentiels vecteur et scalaire de Hulthén et Woods-Saxon généralisés dans un espace à d dimensions

4.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de résoudre dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin, le problème des états liés d'un système quantique constitué d'une particule relativiste chargée de charge $(-e)$, sans spin et de masse M qui se déplace dans un espace à d dimensions et sous l'action d'un champ central représenté par un potentiel vecteur $V_q(r)$ et un potentiel scalaire $S_q(r)$ de la forme :

$$V_q(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - q}; \quad S_q(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - q}, \quad (4.1)$$

où V_0 , S_0 et α sont des constantes réelles et positives telles que $S_0 > V_0$ et q est un paramètre de déformation qui peut prendre toute valeur réelle. Ces potentiels épousent la forme d'un potentiel de Woods-Saxon généralisé pour $q < 0$. Pour $q = 0$, ils prennent une forme de potentiels exponentiels et enfin, les potentiels (4.1) sont appelés potentiels de Hulthén généralisés pour $q > 0$. Ils jouent un rôle important dans plusieurs branches de la physique (nucléaire, atomique

et moléculaire) et en chimie quantique.

Dans un espace à trois dimensions, les potentiels (4.1) ont été étudiés récemment au moyen de différentes méthodes. Nous pouvons mentionner, par exemple, la résolution de l'équation de Klein-Gordon avec $V_q(r)$ par la méthode de Nikiforov-Ouvarov [54]. Dans la même approche, nous pouvons citer aussi le travail [55] sur l'analyse du potentiel $S_q(r)$. On pourra également trouver des études de l'équation de Klein-Gordon relatives aux états liés avec les potentiels vecteur et scalaire (4.1) à l'aide de la mécanique quantique supersymétrique [56] et par la méthode d'itération asymptotique [57] pour les ondes s et en mécanique quantique standard pour les ondes l en adoptant une approximation appropriée pour le terme potentiel centrifuge [58]. Ces potentiels ont été également analysés dans une approche basée sur l'intégrale de chemin de Feynman [59].

Dans un espace à d dimensions, deux tentatives de résolution de l'équation de Klein-Gordon avec les potentiels (4.1), sont apparues dans deux articles publiés récemment [60, 61]. Néanmoins, il faut noter que les résultats de ces deux études sont partiellement satisfaisants. Par conséquent, un traitement détaillé et complet de ce problème mérite d'être réalisé.

Dans un premier paragraphe, nous explicitons l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée aux potentiels (4.1) dans un espace à d dimensions en coordonnées polaires. Nous traitons les potentiels de Hulthén généralisés ($q > 0$) dans un second paragraphe 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 sans difficultés que la fonction de Green radiale associée à l'onde l_q est calculable en choisissant une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge. Nous en déduisons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées. Pour $0 < q < 1$, comme l'approximation employée précédemment ne convient pas, nous nous bornerons à la construction de la fonction de Green relative aux ondes s ($l = 0$). Les pôles de la fonction de Green fournissent une équation transcendante qui exige un calcul numérique pour connaître les niveaux d'énergie. Dans un troisième paragraphe, nous établissons la fonction de Green correspondante également aux ondes s dans le cas des potentiels de Woods-Saxon généralisés ($q < 0$). Dans un dernier paragraphe, nous discuterons certains cas particuliers pour vérifier la justesse de nos résultats.

4.2 Fonction de Green

Pour résoudre le problème des potentiels (4.1) à l'aide des intégrales de chemin, considérons la fonction de Green solution de l'équation de Klein-Gordon à $(d + 1)$ dimensions

$$[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2] G^d(x'', x') = \delta^{d+1}(x'' - x'), \quad (4.2)$$

où $eA = \begin{pmatrix} V_q(r) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$, $V_q(r)$ et $S_q(r)$ sont respectivement le potentiel vecteur et le potentiel scalaire et M est la masse d'une particule de charge $(-e)$ dans l'espace-temps de Minkowski muni de la métrique $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, \dots, -1)$ ($\mu, \nu = 1, 2, \dots, d + 1$) telle que $x^2 = x_1^2 - \sum_{\nu=2}^{d+1} x_\nu^2$.

La construction de la solution de l'équation (4.2) peut être abordée en partant de la représentation intégrale de Schwinger qui consiste à écrire la fonction de Green sous la forme [27, 62, 63, 64, 65, 67] :

$$G(x'', x') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \left\langle x'' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2} [(P - eA)^2 - (M + S_q)^2] \Lambda \right\} \right| x' \right\rangle. \quad (4.3)$$

Comme les potentiels (4.1) sont du type Hulthén ou Woods-Saxon possédant la symétrie sphérique, ce sont les coordonnées polaires qui sont le mieux adaptées pour le traitement de ce problème. La fonction de Green (4.3) peut donc être développée sur la base des ondes sphériques sous la forme :

$$G(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{(r'' r')^{\frac{d-1}{2}}} \sum_{l_d=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^M S_{l_d}^\mu(\widehat{\Omega}'') S_{l_d}^\mu(\widehat{\Omega}') G_{l_d}(r'', t'', r', t'). \quad (4.4)$$

Ici $\widehat{\Omega} = \frac{\vec{x}}{r}$ est un vecteur unité à d dimensions et $S_{l_d}^\mu(\widehat{\Omega})$ représente des harmoniques hypersphériques orthonormées de degré l_d [68, 69]. Le préfacteur dans (4.4) correspond au passage de la fonction d'onde radiale $R_{n_r, l_d}(r)$ à la fonction d'onde réduite $u_{n_r, l_d}^q(r) = r^{\frac{d-1}{2}} R_{n_r, l_d}(r)$. La fonction de Green radiale est donnée par :

$$G_{l_d}(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l_d(l_d + 1)}{r^2} - (M + S_q)^2] \Lambda \right\} | r', t' \rangle, \quad (4.5)$$

avec $l_d = l + \frac{d-3}{2}$, $d \geq 2$.

En vue de trouver les valeurs propres E_{n_r, l_d}^q de l'énergie et les fonctions d'onde $u_{n_r, l_d}^q(r)$, nous allons entreprendre la construction de la fonction de Green (4.5) par la méthode de l'intégrale de chemin de Feynman. Les potentiels (4.1) sont singuliers aux points $r = 0$ et $r = \frac{1}{\alpha} \ln q$ lorsque $q \geq 1$. Donc la forme discrète de l'expression (4.5) n'existe pas à cause de l'affaissement des chemins. Pour obtenir une intégrale de chemin stable, nous pouvons introduire une fonction régulatrice appropriée suivant la référence [22] et nous pouvons écrire (4.5) sous la forme d'une intégrale de chemin ainsi :

$$G_{l_d}(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S'), \quad (4.6)$$

où le noyau $P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S')$ désigne l'intégrale de chemin transformée que nous définissons explicitement sous forme canonique compacte par :

$$\begin{aligned} P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} S' f_L(r) [-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l_d(l_d + 1)}{r^2} - (M + S_q)^2] f_R(r) \right\} | r', t' \rangle \\ &= f_R(r'') f_L(r') \int Dr(s') Dt(s') \int \frac{DP_r(s') DP_0(s')}{(2\pi)^2} \\ &\quad \times \exp \left\{ i \int_0^{S'} \left[-P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r') (-P_r^2 + (P_0 - V)^2 - \frac{l_d(l_d + 1)}{r^2} - (M + S)^2) \right] f_R(r) ds' \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Sous forme discrète, le noyau $P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S')$ s'écrit :

$$P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S') = f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n dt_n \right] \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right], \quad (4.8)$$

dans lequel nous avons introduit les fonctions régulatrices $f_L(r)$ et $f_R(r)$ définies par Kleinert [22] ainsi :

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r), \quad (4.9)$$

où λ est le paramètre de dédoublement. L'intégrale de chemin (4.8) comprend l'action élémentaire

$$A_1^n = -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[-(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2 \right] f_R(r_{n-1}), \quad (4.10)$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_{s'} = \frac{S'}{N+1} = ds' = \frac{ds}{f_L(r_n) f_R(r_{n-1})}, \quad d\tau = \varepsilon_\tau = \frac{\Lambda}{N+1}. \quad (4.11)$$

Pour évaluer (4.8), nous remarquons d'abord que le calcul des intégrales sur les variables t_n dans l'expression (4.8) donne N distributions de Dirac $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$. En intégrant ensuite sur les $(P_0)_n$, on en déduit aisément que

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots (P_0)_{N+1} = E. \quad (4.12)$$

Le propagateur $P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S')$ se met donc sous la forme

$$P_{l_d}(r'', t'', r', t'; S') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] P_{l_d}(r'', r'; S'), \quad (4.13)$$

où le noyau $P_{l_d}(r'', r'; S')$ est donné par :

$$P_{l_d}(r'', r'; S') = f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right], \quad (4.14)$$

avec l'action élémentaire

$$A_2^n = -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[-(P_r)_n^2 - \frac{l_d(l_d+1)}{r_n^2} + (E - V_q(r_n))^2 - (M - S_q(r_n))^2 \right] f_R(r_{n-1}). \quad (4.15)$$

Par substitution de l'expression (4.13) dans (4.6), nous remarquons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle S' . Donc, nous pouvons récrire la fonction de Green partielle (4.6) sous la forme

$$G_{l_d}(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] G_{l_d}(r'', r'), \quad (4.16)$$

avec

$$G_{l_d}(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} dS' P_{l_d}(r'', r'; S'). \quad (4.17)$$

Pour faciliter l'évaluation du noyau $P_{l_d}(r'', r'; S')$, posons le paramètre de dédoublement $\lambda = \frac{1}{2}$, c'est à dire, nous pouvons choisir un développement limité de l'action et de la mesure autour du point moyen puisque le résultat final est indépendant du paramètre de fractionnement λ [22]. Alors, en effectuant l'intégration par rapport aux variables $(P_r)_n$, nous obtenons

$$P_{l_d}(r'', r'; S') = \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f(r_n)}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right\}, \quad (4.18)$$

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

$$\begin{aligned}
A_2^n &= \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'}\sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left[\left(M - \frac{S_0}{e^{\alpha r_n} - q} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. - \left(E + \frac{S_0}{e^{\alpha r_n} - q} \right)^2 + \frac{l_d(l_d + 1)}{r_n^2} \right] \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}. \tag{4.19}
\end{aligned}$$

Notons que l'intégrale de chemin (4.18) dépend du paramètre réel arbitraire de déformation q . De plus, elle ne peut pas être évaluée exactement à cause de la présence du terme centrifuge contenu dans l'expression de l'action lorsque nous nous intéressons à l'étude des ondes l_d . Cependant, il a été montré [59, 70] que l'expression $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} + \frac{\alpha^2}{12}$ 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 (4.17) en distinguant quatre cas.

4.3 Potentiels de Hulthén généralisés

Lorsque le paramètre de déformation q est positif, les potentiels (4.1) sont des formes générales du potentiel de Hulthén [71]. Si $0 < q < 1$, les potentiels (4.1) 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 infranchissable, 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 amène à construire la fonction de Green radiale (4.17) par l'intégrale des chemins dans chaque cas.

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

Dans ce cas, nous allons calculer l'intégrale de chemin pour les potentiels (4.1) uniquement dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ puisque, dans l'autre intervalle, la solution ne peut être obtenue analytiquement et de plus, elle est sans intérêt physique notable. Afin de construire la fonction de Green radiale pour un état de moment cinétique orbital l_d , nous substituons d'abord $\frac{q\alpha^2 e^{\alpha r}}{(e^{\alpha r} - q)^2} + \frac{\alpha^2}{12}$ à $\frac{1}{r^2}$ comme une approximation du facteur $\frac{1}{r^2}$ contenu dans le terme centrifuge

qui apparaît dans l'expression de l'action et nous effectuons ensuite la transformation spatiale

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

définie par :

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln [\exp(2\alpha\xi) + q], \quad (4.20)$$

accompagnée de la fonction régulatrice appropriée

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\cosh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi). \quad (4.21)$$

Sous ces transformations, le noyau (4.18) devient

$$\begin{aligned} P_{l_d}(r'', r'; S') &= [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\xi_n \right] \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta\xi_n)^2}{2\varepsilon_{s'}} + \frac{1}{8\varepsilon_{s'}} \left(\frac{g'^2}{g'^2} - \frac{2}{3} \frac{g'''}{g'} \right) (\Delta\xi_n)^4 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \varepsilon_{s'} \alpha^2 \left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{13}{12} l_d(l_d + 1) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \alpha^2 \left(\frac{\nu^2}{q} + q\epsilon^2 + \beta^2 + \frac{q}{12} l_d(l_d + 1) \right) \frac{1}{\cosh_q^2(\alpha\xi_n)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \varepsilon_{s'} \alpha^2 \left(\epsilon^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{11}{12} l_d(l_d + 1) \right) \tanh_q(\alpha\xi_n) \right] \right\}, \quad (4.22) \end{aligned}$$

où les paramètres ϵ , β et ν sont définis par

$$\epsilon = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E^2}; \quad \beta = \frac{1}{\alpha} \sqrt{2EV_0 + 2MS_0}; \quad \nu = \frac{1}{\alpha} \sqrt{S_0^2 - V_0^2}. \quad (4.23)$$

Dans les équations (4.21) et (4.22), nous avons introduit les fonctions hyperboliques déformées utilisées pour la première fois par Arai [20]. Par définition

$$\cosh_q x = \frac{1}{2} (e^x + qe^{-x}); \quad \sinh_q x = \frac{1}{2} (e^x - qe^{-x}), \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}, \quad (4.24)$$

où q est un paramètre réel.

Remarquons que le terme en $(\Delta\xi_n)^4$ qui apparaît dans l'action contenue dans l'expression (4.22) a une contribution significative qui se traduit par une correction quantique dans l'intégrale de chemin. $(\Delta\xi_n)^4$ peut être évalué au moyen de la technique des perturbations et remplacé par :

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left(\frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{2\varepsilon_{s'}} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3\varepsilon_{s'}^2. \quad (4.25)$$

En effectuant le changement de variables $u_n = \alpha\xi_n$ et $\varepsilon_\sigma = \alpha^2\varepsilon_{s'}$ nous pouvons mettre la fonction de Green (4.17), pour les états l_d , sous la forme :

$$G_{l_d}(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}^{l_d}(u'', u'; \tilde{E}_{l_d}), \quad (4.26)$$

où

$$G_{RM}^{l_d}(u'', u'; \tilde{E}_{l_d}) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_{l_d}\sigma) P_{RM}^{l_d}(u'', u'; \sigma) \quad (4.27)$$

avec

$$\tilde{E}_{l_d} = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{13}{12}l_d(l_d+1) + \frac{1}{4} \right), \quad (4.28)$$

et

$$P_{RM}^{l_d}(u'', u'; \sigma) = \int Du(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - V_{RM}^{l_d}(u) \right] d\tau \right\} \quad (4.29)$$

est le propagateur relatif au potentiel de Rosen-Morse [16] (ou potentiel de Pöschl-Teller modifié général) défini en termes des fonctions hyperboliques déformées ainsi :

$$V_{RM}^{l_d}(u) = A_{l_d} \tanh_q(u) - \frac{B_{l_d}}{\cosh_q^2(u)}; \quad u \in \mathbb{R}, \quad (4.30)$$

avec les paramètres A_{l_d} et B_{l_d} définis par

$$\begin{cases} A_{l_d} = \epsilon^2 - \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{11}{12}l_d(l_d+1) - \frac{1}{4}; \\ B_{l_d} = \frac{1}{2} \left(q\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q} + \beta^2 + \frac{q}{12}l_d(l_d+1) - \frac{q}{4} \right). \end{cases} \quad (4.31)$$

Puisque la solution exacte de (4.27) est bien connue, nous nous contentons donc d'écrire directement le résultat [25, 72, 73] :

$$\begin{aligned}
G_{RM}^{l_d}(u'', u'; \tilde{E}_{l_d}) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{1 - \tanh_q u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh_q u''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left(\frac{1 + \tanh_q u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh_q u''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh_q u_>) \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh_q u_<) \right),
\end{aligned} \tag{4.32}$$

où nous avons employé les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{16} + 2E_{PT'} \right)^{\frac{1}{2}}; \\ E_{PT'} = \frac{1}{2} \left(\frac{\nu^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \epsilon^2 + \frac{1}{12}l_d(l_d + 1) \right) - \frac{1}{32}; \\ M_1 = \tilde{\epsilon} + \delta_{l_d\pm} + \frac{1}{2}; \quad M_2 = \tilde{\epsilon} - \delta_{l_d\pm} - \frac{1}{2}, \end{array} \right. \tag{4.33}$$

avec

$$\delta_{l_d\pm} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{\nu^2}{q^2} + \left(l_d + \frac{1}{2} \right)^2}, \quad \tilde{\epsilon} = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{1}{12}l_d(l_d + 1)}. \tag{4.34}$$

Dans la suite, nous devons prendre $\delta_{l_d} = \delta_{l_d+}$, pour éviter la chute de la particule sur le centre [74]. En tenant compte des relations entre les variables r , ξ et u , la fonction de Green radiale $G_{l_d}(r'', r')$ associée aux potentiels (4.1), pour $q \geq 1$ et dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ est

alors donnée par :

$$\begin{aligned}
G_{l_d}(r'', r') &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \left(q^2 e^{-\alpha(r''+r')}\right)^{\frac{M_1+M_2}{2}} \\
&\times \left[\left(1 - qe^{-\alpha r''}\right) \left(1 - qe^{-\alpha r'}\right) \right]^{\frac{M_1-M_2+1}{2}} \\
&\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - qe^{-\alpha r'}\right) \\
&\times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; qe^{-\alpha r''}\right).
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Les pôles de la fonction de Green correspondent aux valeurs permises de l'énergie pour les états liés du système quantique. Ce sont précisément les pôles de la fonction $\Gamma(M_1 - L_E)$ qui s'obtiennent lorsque $M_1 - L_E = -n_r$, pour $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$. Ils sont donnés par l'équation

$$\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} = \frac{\beta^2 - q \left[(n_r + 1)^2 + (2n_r + 1)\delta_{l_d} + l_d(l_d + 1) \right]}{2q(n_r + \delta_{l_d} + 1)}. \tag{4.36}$$

Ensuite, de (4.36) et en utilisant (4.23) et (4.34), nous trouvons les niveaux d'énergie

$$\begin{aligned}
E_{n_r, l_d}^{q \geq 1} &= \frac{V_0}{2} \frac{\left[N + l_d(l_d + 1) - \frac{2MS_0}{\alpha^2 q} \right]}{q \left[N + l_d(l_d + 1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2 q^2} \right]} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + l_d(l_d + 1) + \frac{V^2}{q^2}}}{q \left[N + l_d(l_d + 1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2 q^2} \right]} \\
&\times \sqrt{q \left[N + l_d(l_d + 1) \right] \left[4M(Mq + S_0) - \alpha^2 q(N + l_d(l_d + 1)) \right]},
\end{aligned} \tag{4.37}$$

où

$$N = (n_r + 1)^2 + (2n_r + 1)\delta_{l_d}. \tag{4.38}$$

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

$$n_{r \max} \leq \left\{ -\frac{1}{2} + \frac{1}{q\alpha} \sqrt{(2Mq + S_0 - V_0)(2Mq + S_0 + V_0)} - \sqrt{\left(l_d + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{S_0^2 - V_0^2}{\alpha^2 q^2}} \right\}. \tag{4.39}$$

Ici, $\{k\}$ est le plus grand entier plus petit que k . La présence des signes (\pm) dans (4.37) est une particularité des énergies en mécanique quantique relativiste. Son interprétation est donnée 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 $u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r)$ qui sont proportionnelles à la fonction hypergéométrique ${}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh_q u))$ avec

$$L_E = -\frac{1}{2} + \left(\frac{\nu^2}{q^2} + \frac{\beta^2}{q} + \tilde{\epsilon}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{et} \quad M_1 \in \mathbb{R}, \quad (4.40)$$

soient permises. Il s'ensuit que

$$\left\{ \begin{array}{l} - \left[\left(M + \frac{S_0}{q} \right) + \frac{1}{12} l_d (l_d + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \leq E_{n_r, l_d}^{q \geq 1} - \frac{V_0}{q} \leq \left[\left(M + \frac{S_0}{q} \right) + \frac{1}{12} l_d (l_d + 1) \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \text{et} \quad -M \leq E_{n_r, l_d}^{q \geq 1} \leq M. \end{array} \right. \quad (4.41)$$

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

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!} \frac{2\alpha^2 \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} (\tilde{n} + \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d})}{\tilde{n}(A^2 + 1) \left(\check{E}^2 - \left(E_{n_r, l_d}^{q \geq 1} \right)^2 \right)}, \end{aligned} \quad (4.42)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\epsilon_{n_r, l_d}^2 + \frac{1}{12} l_d (l_d + 1)}, \quad \epsilon_{n_r, l_d} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - \left(E_{n_r, l_d}^{q \geq 1} \right)^2}, \\ A = \frac{V_0}{\alpha q \tilde{n}}, \quad \tilde{n} = n_r + \delta_{l_d} + 1, \end{array} \right. \quad (4.43)$$

et

$$\check{E} = E + \frac{AM}{(A^2 + 1)\tilde{n}} \left[\frac{S_0}{\alpha q} - \frac{\alpha}{2M} (N + l_d(l_d + 1)) \right]. \quad (4.44)$$

Alors, en se servant du comportement (4.42) et en tenant compte de la relation (2.67), il est facile de voir que le second terme dans (2.67) est nul du fait que la fonction $\Gamma(a)$ est infinie

($a = -n_r < 0$). Donc, l'expression de la fonction de Green (4.35) peut se mettre sous la forme d'un développement spectral

$$G_{l_d}(r'', r') = \sum_{n_r=0}^{n_{r\max}} \frac{u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r'') u_{n_r, l_d}^{q \geq 1*}(r')}{(A^2 + 1) \left(\check{E}^2 - \left(E_{n_r, l_d}^{q \geq 1} \right)^2 \right)}, \quad (4.45)$$

dans lequel les fonctions d'onde réduites $u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r)$, convenablement normalisées, sont données par :

$$\begin{aligned} u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r) \\ &= \left[\frac{2\alpha \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} (\tilde{n} + \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}) \Gamma(\tilde{n} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + \delta_{l_d} + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1)}{\tilde{n} n_r! \Gamma(\tilde{n} + \delta_{l_d} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times \frac{1}{\Gamma(2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1)} (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_{l_d} + 1} (qe^{-\alpha r})^{\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}} \\ &\quad \times {}_2F_1(-n_r, \tilde{n} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + \delta_{l_d} + 1, 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1; qe^{-\alpha r}). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Compte tenu de la relation entre les fonctions hypergéométriques et les polynômes de Jacobi (voir Ref. [12], p. 952, Eq. (8.406.1))

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1\left(-n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-t}{2}\right), \quad (4.47)$$

les fonctions d'onde (4.46) se mettent aussi sous la forme

$$\begin{aligned} u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r) &= \left[\frac{2\alpha \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} (\tilde{n} + \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}) n_r! \Gamma(\tilde{n} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + \delta_{l_d} + 1)}{\tilde{n} \Gamma(\tilde{n} + \delta_{l_d} + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \times (1 - qe^{-\alpha r})^{\delta_{l_d} + 1} (qe^{-\alpha r})^{\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}} P_l^{(2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}, 2\delta_{l_d} + 1)}(1 - 2qe^{-\alpha r}). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Ces solutions satisfont bien les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r) = 0, \quad (4.49)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{n_r, l_d}^{q \geq 1}(r) = 0. \quad (4.50)$$

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

Comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas précédent est valable seulement pour $q \geq 1$ (voir Ref. [59] et thèse de Zouache [70]), nous nous plaçons donc dans le cas où le terme potentiel centrifuge est nul, c'est à dire, nous supposons que $l_d = 0$. La discussion développée ci-dessus est valable, mais dans ce cas, le changement de variable (4.20) transforme $r \in \mathbb{R}^+$ en $\alpha\xi = u \in]\frac{1}{2}\ln(1-q), +\infty[$. Ceci signifie que le noyau (4.29), pour $l_d = 0$, est le propagateur qui décrit le mouvement d'une particule placée dans 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, pour contourner cette difficulté formelle, le problème peut se résoudre au moyen d'un artifice qui consiste à introduire un terme auxiliaire représenté par une fonction δ de Dirac dans l'action contenue dans l'équation (4.29) pour former un mur impénétrable [4, 7] au point $u = u_0 = \frac{1}{2}\ln(1-q)$. Alors, la fonction de Green (4.27), pour $l_d = 0$, devient

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P^\delta(u'', u'; \sigma), \quad (4.51)$$

où

$$P^\delta(u'', u'; \sigma) = \int \mathcal{D}u(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - V^\delta(u) \right] d\tau \right\}. \quad (4.52)$$

Cette intégrale de chemin (4.52) peut être interprétée comme étant le propagateur d'une particule en présence d'un potentiel de la forme :

$$V^\delta(u) = V_{RM}^0(u) - \eta\delta(u - u_0). \quad (4.53)$$

où $V_{RM}^0(u)$ est l'expression du potentiel (4.30) correspondant à $l_d = 0$. Comme il est tout à fait clair, vu la forme trop compliquée du potentiel (4.53), que le calcul par l'intégrale de chemin de l'équation (4.52) ne peut pas être effectué directement. Dans ce cas, il est commode d'appliquer l'approche des perturbations (voir § 1.3). Ceci nous conduit, tous calculs faits, au résultat

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) - \frac{1}{\eta}}, \quad (4.54)$$

où $G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green associée au potentiel de Rosen-Morse déformé (4.30) pour $l_d = 0$. Ici, les quantités \tilde{E}_0 et δ_0 sont données par

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4}\right), \\ \delta_0 = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{\nu^2}{q^2} + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (4.55)$$

A la limite $\eta \rightarrow -\infty$, le système physique est forcé de se déplacer dans le potentiel $V_{RM}^0(u)$ limité par une barrière infiniment répulsive [4, 6] située au point $u = u_0$. Dans ce cas, la fonction de Green, pour $l_d = 0$, s'écrit alors

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0), \quad (4.56)$$

où l'expression de $\tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0)$ est fournie par :

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0) &= \lim_{\eta \rightarrow -\infty} G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) \\ &= G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par les pôles de l'équation (4.57), c'est à dire, par l'équation $G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) = 0$, ou encore par l'équation transcendante

$${}_2F_1(\delta + \epsilon - \tilde{Q}, \delta + \epsilon + \tilde{Q}, 2\delta; 1 - q) = 0, \quad (4.58)$$

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 (4.56) et (4.57) pour $l_d = 0$, la formule de transformation de Gauss (2.67) et en revenant à la variable radiale à l'aide de (4.20), nous obtenons, pour les fonctions d'onde correspondantes aux états liés, l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
u_0^{0 < q < 1}(r) &= r \Psi_0^{0 < q < 1}(r) \\
&= A (1 - qe^{-\alpha r})^\delta (qe^{-\alpha r})^\epsilon {}_2F_1(\delta + \epsilon - \tilde{Q}, \delta + \epsilon + \tilde{Q}, 2\delta; 1 - qe^{-\alpha r}),
\end{aligned} \tag{4.59}$$

où A est un facteur constant.

4.4 Potentiels de Woods-Saxon généralisés

Pour $q < 0$, les potentiels (4.1) sont des déformations du potentiel de Woods-Saxon [31] qui sont définies dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . Elles peuvent s'écrire sous la forme :

$$V_{WS}^q(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} + q}, \quad S_{WS}^q(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} + q}, \tag{4.60}$$

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

Dans le but de réduire l'intégrale de chemin (4.18), pour $l_d = 0$, à une forme résoluble, nous procédons comme dans le paragraphe précédent. Nous effectuons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow \xi \in \left] \frac{1}{2\alpha} \ln(1 + q), +\infty \left[\tag{4.61}$$

définie dans ce cas par :

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln [\exp(2\alpha\xi) - q], \tag{4.62}$$

et nous insérons la fonction régulatrice

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{\sinh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi). \tag{4.63}$$

Après quelques calculs élémentaires et semblables à ceux effectués dans le paragraphe ci-dessus, la fonction de Green radiale (4.17) peut s'exprimer en termes de la nouvelle variable ξ et du nouveau temps S' . Ensuite, en changeant $\alpha\xi$ en $y = \alpha\xi - \ln \sqrt{q}$ et $\varepsilon_{S'}$ en $\alpha^{-2}\varepsilon_\sigma$, nous pouvons écrire (4.17), pour les états $l_d = 0$, sous la forme suivante :

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0), \quad (4.64)$$

où

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P_{MR}(y'', y'; \sigma), \quad (4.65)$$

et

$$P_{MR}(y'', y'; \sigma) = \int \mathcal{D}y(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{y}^2}{2} + A_0 \coth y - \frac{B_0}{q \sinh^2 y} \right] d\tau \right\}. \quad (4.66)$$

Les constantes \tilde{E}_0 , A_0 et B_0 sont données par :

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4}\right), \\ A_0 = \frac{\nu^2}{q^2} - \epsilon^2 + \frac{1}{4}, \\ B_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\nu^2}{q} + q\epsilon^2 - \beta^2 - \frac{q}{4}\right). \end{cases} \quad (4.67)$$

Le propagateur (4.66) a une forme semblable à l'intégrale de chemin relative au potentiel de Manning et Rosen [19] dénoté $V_{MR}(y)$ et qui est défini pour $y \in \mathbb{R}^+$, mais, dans le cas en question, nous avons converti l'intégrale de chemin pour les potentiels (4.30) en une intégrale de chemin pour le potentiel de Manning et Rosen par la transformation $r \rightarrow r(y)$ qui fait correspondre $\mathbb{R}^+ \rightarrow \left] \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{q}\right), +\infty \right[$. Cela 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 $l_d = 0$, nous procédons comme dans le paragraphe précédent. Tous calculs faits, nous arrivons à

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0), \quad (4.68)$$

avec

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{MR}(y'', y_0; \tilde{E}_0)G_{MR}(y_0, y'; \tilde{E}_0)}{G_{MR}(y_0, y_0; \tilde{E}_0)}. \quad (4.69)$$

où $G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green pour une particule dans le potentiel standard de

Manning et Rosen [19] défini par :

$$V_{MR}(y) = -A_0 \coth y + \frac{B_0}{q \sinh^2 y}; \quad y > 0. \quad (4.70)$$

Comme sa solution exacte par l'intégrale de chemin est connue, nous pouvons alors écrire directement le résultat [25]

$$\begin{aligned} G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\ &\times \left(\frac{2}{1 + \coth y''} \frac{2}{1 + \coth y'} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\ &\times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \end{aligned} \quad (4.71)$$

dans lequel nous avons employé les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{2(A - \tilde{E}_0)} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}}, \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} \left(2\sqrt{\frac{2B}{q} + \frac{1}{4}} \pm \sqrt{-2(A + \tilde{E}_0)} \right) = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}} \pm \epsilon. \end{array} \right. \quad (4.72)$$

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

Les niveaux d'énergie des états liés sont définis par les pôles de l'équation (4.69), c'est à dire, par l'équation $G_{MR}(y_0, y_0; \tilde{E}) = 0$, où encore par la condition de quantification suivante :

$${}_2F_1\left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + \delta + Q, 2\epsilon + 1; \frac{q}{q+1}\right) = 0, \quad (4.73)$$

C'est une équation transcendante comprenant la fonction hypergéométrique avec

$$\delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}}, \quad Q = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}}. \quad (4.74)$$

En utilisant la fonction de Green (4.68) associée au potentiel de Manning et Rosen et le lien entre (4.66) et (4.68), nous trouvons que les fonctions d'onde correspondantes aux états liés sont données par :

$$u_0^{q>0}(r) = A \left(\frac{1}{e^{\alpha r} + q} \right)^\epsilon \left(\frac{1}{1 + qe^{-\alpha r}} \right)^Q {}_2F_1 \left(1 + \epsilon + Q - \delta, \epsilon + \delta + Q, 2\epsilon + 1; \frac{q}{e^{\alpha r} + q} \right), \quad (4.75)$$

où A est un facteur constant.

4.5 Cas particuliers

4.5.1 Premier cas : potentiels de Hulthén standard

En posant $q = 1$ dans la définition (4.1), nous aurons les potentiels de Hulthén standard

$$V_1(r) = -\frac{V_0}{e^{\alpha r} - 1}, \quad S_1(r) = -\frac{S_0}{e^{\alpha r} - 1}. \quad (4.76)$$

Le paramètre δ_{l_d} défini par l'expression (4.34) peut s'écrire

$$\delta_{l_d} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\nu^2 + \left(l_d + \frac{1}{2} \right)^2}. \quad (4.77)$$

Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits respectivement à partir des équations (4.37) et (4.45),

$$E_{n_r, l}^{q=1} = \frac{V_0}{2} \frac{[N + l_d(l_d + 1) - \frac{2MS_0}{\alpha^2}]}{N + l_d(l_d + 1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2}} \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N + l_d(l_d + 1) + \nu^2}}{N + l_d(l_d + 1) + \frac{S_0^2}{\alpha^2}} \\ \times \sqrt{[N + l_d(l_d + 1)] [4M(M + S_0) - \alpha^2 (N + l_d(l_d + 1))]}, \quad (4.78)$$

$$\begin{aligned}
u_{n_r, l_d}^{q=1}(r) &= r \Psi_{n_r, l_d}^{q=1}(r) \\
&= \left[\frac{2\alpha \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} (\tilde{n} + \tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}) \Gamma(\tilde{n} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + \delta_{l_d} + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1)}{\tilde{n} n_r! \Gamma(\tilde{n} + \delta_{l_d} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \frac{1}{\Gamma(2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1)} (1 - e^{-\alpha r})^{\delta_{l_d} + 1} (e^{-\alpha r})^{\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d}} \\
&\quad \times {}_2F_1(-n_r, \tilde{n} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + \delta_{l_d} + 1, 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l_d} + 1; e^{-\alpha r}).
\end{aligned} \tag{4.79}$$

Dans le cas des ondes s ($l_d = 0$), ces résultats coïncident avec ceux obtenus également par l'approche des integrales de chemin dans la Ref. [27] .

4.5.2 Deuxième cas : potentiels de Woods-Saxon

En prenant $q = e^{\alpha R}$ et en supposant $\alpha R \gg 1$, les expressions (4.60) prennent la forme du potentiel de Woods-Saxon

$$V_{WS}(r) = -\frac{\tilde{V}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \quad S_{WS}(r) = -\frac{\tilde{S}_0}{e^{\alpha(r-R)} + 1}, \tag{4.80}$$

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

Dans ce cas, la condition de quantification pour les états $l_d = 0$ peut être déterminée à l'aide de la formule de transformation de Gauss (2.67) et en notant que $\frac{q}{q+1} \simeq 1$ pour $\alpha R \gg 1$. Nous montrons, après quelques calculs simples, que l'équation (4.73) se met sous la forme :

$$\frac{\Gamma(2Q)\Gamma(1 + \epsilon - \delta - Q)\Gamma(\epsilon + \delta - Q)}{\Gamma(-2Q)\Gamma(1 + \epsilon - \delta + Q)\Gamma(\epsilon + \delta + Q)} (e^{-\alpha R})^{-2Q} = -1. \tag{4.81}$$

Afin de simplifier la discussion de cette équation, nous nous contenterons du cas $Q^2 < 0$, qui selon (4.72) entraîne comme conséquence $-M < E < -M + \tilde{S}_0 - \tilde{V}_0$ ou $M - \tilde{S}_0 - \tilde{V}_0 < E < M$ et donc Q apparaît comme une quantité purement imaginaire. En posant

$$Q = i\mu \tag{4.82}$$

et en définissant ϕ_1, ϕ_2 et ψ ainsi

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma(\epsilon + \delta + i\mu), \\ \phi_2 = \arg \Gamma(\epsilon - \delta + i\mu), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (4.83)$$

il résulte de (4.81), après un calcul simple, que :

$$\exp \left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left(\frac{\mu}{\epsilon - \delta} \right) \right] (e^{-\alpha R})^{-2i\mu} = -1. \quad (4.84)$$

Cette équation conduit à la condition de quantification suivante :

$$\mu\alpha R + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan \left(\frac{\mu}{\epsilon - \delta} \right) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (4.85)$$

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

4.5.3 Troisième cas : potentiels exponentiels

En posant $q = 0$ dans les expressions (4.1), nous obtenons un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type exponentiel donnés par :

$$V(r) = -V_0 e^{-\alpha r}; \quad S(r) = -S_0 e^{-\alpha r}, \quad (4.86)$$

avec les paramètres V_0, S_0 et α 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 entre les deux noyaux de la molécule diatomique dans la position d'équilibre.

Dans ce cas, nous pouvons voir à partir des équations (4.74) que

$$\begin{cases} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, & Q \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q}, \\ 1 + \epsilon + Q - \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} \\ \epsilon + Q + \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (4.87)$$

D'autre part, en tenant compte de la formule déduite de la fonction hypergéométrique ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z)$

par passage à la limite [74]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (4.88)$$

il est facile de montrer qu'à la limite $q \rightarrow 0$, les fonctions d'onde (4.75) deviennent

$$u_0^{q=0}(r) = A (e^{-\alpha r})^\epsilon \exp(-\nu e^{-\alpha r}) {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu}, 2\epsilon + 1; 2\nu e^{-\alpha r}\right). \quad (4.89)$$

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 (4.89) que la condition de quantification de l'énergie est donnée par :

$$\frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.90)$$

En combinant les expressions (4.23) et (4.90), on obtient les niveaux d'énergie :

$$E_{n_r}^{q=0} = \frac{\alpha^2 \nu V_0}{S_0^2} \left[\lambda_{n_r} \pm \sqrt{\lambda_{n_r}^2 - \frac{V_0^2}{S_0^2} \left(\lambda_{n_r} + \frac{M}{\alpha} \right) \left(\lambda_{n_r} - \frac{M}{\alpha} \right)} \right], \quad (4.91)$$

où

$$\lambda_{n_r} = n_r - \frac{MS_0}{\alpha^2 \nu} + \frac{1}{2}. \quad (4.92)$$

Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus récemment à travers la résolution de l'équation de Klein-Gordon [75] et par application de la méthode d'itération asymptotique [76]. Signalons que les fonctions d'onde (4.89) et le spectre d'énergie (4.91) peuvent être déterminés aussi d'une autre manière. En partant des fonctions d'onde (4.59) et en passant à la limite $q \rightarrow 0$, nous pouvons voir que

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, \quad \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q}, \\ \delta + \epsilon - \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} \\ \delta + \epsilon + \tilde{Q} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon + \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \rightarrow \infty. \end{array} \right. \quad (4.93)$$

Ensuite, en utilisant la formule (4.88), nous retrouvons les fonctions d'onde (4.89) et donc l'expression (4.91) des niveaux d'énergie.

4.5.4 Quatrième cas : potentiels de Coulomb

Lorsque $q = 1$, et en faisant tendre α tend vers zéro, les potentiels (4.1) tendent vers les potentiels coulombiens attractifs

$$V_c(r) = -\frac{A_1}{r}; \quad S_c(r) = -\frac{A_2}{r}, \quad (4.94)$$

avec $A_1 = \frac{V_0}{\alpha}$ et $A_2 = \frac{S_0}{\alpha}$.

En opérant les substitutions suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} l_d \Rightarrow j_d, \\ \delta_{l_d} \Rightarrow \lambda_d, \\ n_r + 1 \Rightarrow n, \end{array} \right. \quad (4.95)$$

et en faisant tendre α vers zéro, la formule (4.37) donne en effet :

$$\frac{E_{n,l}}{M} = -\frac{A_1 A_2}{\widehat{n}^2 + A_1^2} \pm \left[\left(\frac{A_1 A_2}{\widehat{n}^2 + A_1^2} \right)^2 + \frac{\widehat{n}^2 - A_2^2}{\widehat{n}^2 + A_1^2} \right], \quad (4.96)$$

où $\widehat{n} = n + \lambda_d$. Ce résultat coïncide avec celui obtenu dans le cadre de la variante de l'algèbre de Lie $so(2,1)$ élaborée par Milshtein et Strakhovenko [77] dans un espace à trois dimensions ($d = 3$).

Les fonctions d'onde correspondantes sont déduites à partir de (4.46) en prenant en considération la formule de transformation de Gauss (2.67) et en utilisant la formule (4.88). On obtient finalement :

$$\begin{aligned} u_{n_r,l}^c(r) &= r \Psi_{n_r,l}^c(r) \\ &= (-1)^{n_r} \left[\frac{4\kappa^3 \Gamma(n_r + 2\delta_{l_d} + 2)}{n_r! (n_r + \delta_{l_d} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} (2\kappa r)^{\delta_{l_d}} \\ &\quad \times e^{-\kappa r} {}_1F_1(-n_r, 2\delta_{l_d} + 2, 2\kappa r), \end{aligned} \quad (4.97)$$

où $\kappa = \sqrt{M^2 - E_{n_r,l_d}^2}$ 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 [78] peuvent être retrouvées lorsque nous posons $A_2 = 0$ et $d = 3$.

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement, en toute rigueur, par la méthode des intégrales de chemin de Feynman, d'un ensemble de trois systèmes quantiques à symétrie sphérique très utiles dans plusieurs branches de la physique théorique et la chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons étudié le problème d'une particule relative placée dans un potentiel diatomique à quatre paramètres et celui d'une particule en mouvement dans un espace à d dimensions sous l'influence d'un potentiel de Hulthén modifié.

Dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, nous avons discuté le problème d'une particule sans spin, de masse M et de charge $(-e)$ soumise à l'action d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire à symétrie sphérique et dépendant d'un même paramètre réel de déformation dans un espace à d dimensions.

La forme du potentiel diatomique, du potentiel de Hulthén modifié ou des potentiels vecteur et scalaire dépend d'un paramètre de déformation qui délimite la définition du potentiel et modifie par conséquent les conditions aux limites devant être imposées aux solutions du problème pour qu'elles soient acceptables physiquement. Pour un paramètre de déformation supérieur ou égal à l'unité, en remplaçant le potentiel centrifuge par une expression approximative analogue à celle du potentiel de Hulthén déformé, les fonctions de Green associées à l'onde l_d ($d = 3$ dans le cas du potentiel diatomique et d arbitraire lorsqu'il s'agit des autres systèmes) sont construites sous forme compacte en utilisant simplement la technique de transformation spatio-temporelle. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées sont déduits respectivement des pôles et des résidus de la fonction de Green. Dans les cas où le paramètre de déformation est négatif ou compris entre zéro et l'unité, nous nous sommes limités à

l'évaluation des fonctions de Green pour les ondes s ($l = 0$) dans un espace à trois dimensions. Nous avons montré que la conversion de la fonction de Green relative au potentiel initial défini sur l'intervalle \mathbb{R}^+ en une intégrale de chemin associée à un potentiel du type Rosen-Morse ou du genre Manning-Rosen ramène le problème à celui d'une particule forcée à se déplacer sur une demi-droite limitée à un point d'abscisse supérieur à zéro. Ce problème avec des conditions aux limites dites de Dirichlet est résolu à l'aide de l'approche des perturbations. Dans les deux cas, la condition de quantification de l'énergie est déterminée par une équation transcendante comportant une fonction hypergéométrique qui nécessite un traitement numérique pour connaître les niveaux d'énergie. Nous avons également déterminé les fonctions d'onde et les déphasages des états de diffusion pour le potentiel de Hulthén dans un espace à d dimensions.

Il faut mentionner aussi que nos résultats sont certainement corrects puisque le spectre et les fonctions d'onde concernant plusieurs cas particuliers bien connus dans la littérature et servant comme des tests ont été retrouvés.

Pour terminer, il faut signaler que les résultats sur le problème d'une particule relativiste sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire dans un espace à d dimensions, obtenus par Saad [60] et par Agboola [61] ne sont pas entièrement satisfaisants.

Bibliographie

- [1] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [2] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [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; P. M. A. Dirac, *The principles of quantum mechanics* (Oxford Clarindon press, London, 1958).
- [4] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, Phys.Rev. **D 22** (1980) 3012.
- [5] A. O. Barut et I. H. Duru, Phys. Rev. **A 38** (1988) 5906.
- [6] M. Carreau, J. Math. Phys. **33** (1992) 4139; M. Carreau, E. Farhi et S. Gutmann, Phys. Rev. **D 42** (1990) 1194.
- [7] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1.
- [8] R. P. Feynman et A. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [9] D. Bauch, Nuovo Cimento **B 85** (1985) 118.
- [10] S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Phys. Lett. **A 131** (1988) 8.
- [11] G. N. Watson, *Theory of Bessel Functions, 2nd ed.* (Cambridge Univ. Press, London, 1966) p. 369.
- [12] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of integrals, series and products* (Academic Press, New York, 1965).
- [13] J. X. Sun, Acta Phys. Sin. **48** (1999) 1992.
- [14] Morse P. M., Phys. Rev. **70** (1946) 222.

- [15] C. S. Jia, J. Y. Wang, S. He, and L. T. Sun, *J. Phys. A* **33** (2000) 6993.
- [16] N. Rosen et P. M. Morse, *Phys. Rev.* **42** (1932) 210.
- [17] I. H. Duru et H. Kleinert, *Phys. Lett.* **B 84** (1979) 185.
- [18] I. H. Duru et H. Kleinert, *Fortschr. Phys.* **30** (1982) 401.
- [19] M. F. Manning et N. Rosen, *Phys. Rev.* **44** (1933) 953.
- [20] A. Arai, *J. Math. Anal. Appl.* **158** (1991) 63; *J. Phys. A : Math. Gen.* **34** (2001) 4281.
- [21] H. Kleinert et I. Mustapic, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 643.
- [22] H. Kleinert, *Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics and financial markets* (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).
- [23] C. Grosche et F. Steiner, *A table of Feynman path integrals*, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1998).
- [24] A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton University Press, 1974).
- [25] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38** (2005) 2947.
- [26] J. M. Cai, P. Y. Cai et A. Inomata, *Phys. Rev.* **A 34** (1986) 4621.
- [27] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **32** (1991) 441.
- [28] J. Lindhard et A. Winther, *Nucl. Phys.* **A 166** (1971) 413.
- [29] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, *Il Nuovo Cimento* **B 113** (1998) 81.
- [30] A. Diaf, A. Chouchaoui et R. J. Lombard, *Ann. Phys.* **317** (2005) 354.
- [31] S. Flügge, *Practical quantum mechanics* (Springer Verlag, Berlin, 1974).
- [32] E. A. Hylleraas et V. Risberg, *Avh. Nor. Vidensk. Akad. Oslo Mat. Naturvdesk*, **KI. 1** (1941) 3.
- [33] L. Hulthén, *Ark. Mat. Astron. Fys.* **A 28** (1942) 5.
- [34] O. P. Bahethi et M. G. Fuda, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 2076.
- [35] J. Gruninger, *J. Chem. Phys.* **55** (1971) 3561.
- [36] C. S. Lam et Y. P. Varshni, *Phys. Rev.* **A 4** (1971) 1875.

- [37] K. Szalczewicz and H. J. Mokhorst, *J. Chem. Phys.* **75** (1981) 6785.
- [38] G. Malli, *Chem. Phys. Lett.* **26** (1981) 578.
- [39] U. Myhrman, *J. Math. Phys.* **21** (1980) 1732; *J. Phys. A : Math. Gen.* **16** (1983) 263.
- [40] A. A. Berezin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **50** (1972) 71; *J. Phys. C* **12** (1979) L363; *Phys. Rev. B* **33** (1986) 2122.
- [41] P. Matthys et H. De Meyer, *Phys. Rev. A* **38** (1988) 1168.
- [42] E. D. Filho et R. M. Ricotta, *Mod. Phys. Lett. A* **10** (1995) 1613.
- [43] S. W. Qian, B. W. Huang et Z. Y. Gu, *New J. Phys.* **4** (2002) 131.
- [44] H. Ciftci, R. L. Hall et N. Saad, *J. Phys. A : Math. Gen.* **36** (2003) 11807.
- [45] A. Z. Tang et F. T. Chan, *Phys. Rev. A* **35** (1987) 911.
- [46] Y. P. Varshni, *Phys. Rev. A* **41** (1990) 4682.
- [47] B. Gönül, O. Özer, Y. Cançelik et M. Koçak, *Phys. Lett. A* **275** (2000) 238.
- [48] O. Bayrak, G. Kocak et I. Boztosun, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39** (2006) 11521.
- [49] S. H. Dong, *Factorisation Method in Quantum Mechanics* (Springer, Netherlands, 2007).
- [50] M. Ikhdair, *Eur. Phys. J. A* **39** (2009) 307.
- [51] D. Agboola, *Phys. Scr.* **80** (2009) 065304.
- [52] X. Y. Gu et J. Q. Sun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 022106.
- [53] S. M. Ikhdair, *Phys. Scr.* **83** (2011) 0225002.
- [54] M. Simsek et H. Egrifes, *J. Phys. A : Math. Gen.* **37** (2004) 4379.
- [55] H. Egrifes et R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **46** (2007) 935.
- [56] G. Chen, Z. D. Chen et Z. M. Lou, *Phys. Lett. A* **331** (2004) 374.
- [57] E. Ölgar, R. Koç et H. Tütüncüler, *Phys. Scr.* **78** (2008) 015011.
- [58] W. C. Qiang, R. S. Zhou et Y. Gao, *Phys. Lett. A* **371** (2007) 201.
- [59] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 032301.
- [60] N. Saad, *Phys. Scr.* **76** (2007) 623.
- [61] D. Agboola, *Phys. Scr.* **81** (2010) 067001.

- [62] R. P. Feynman, Phys. Rev. **80** (1950) 440.
- [63] J. Schwinger, Phys. Rev. **82** (1951) 664.
- [64] L. S. Schulman, *Techniques and applications of path integration* (Wiley, New York, 1981).
- [65] B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, Il Nuovo Cimento **B 111** (1996) 99.
- [66] M. T. Chefrou, F. Benamira et L. Guechi, Eur. Phys. J. **C 28** (2003) 395.
- [67] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, Physica **A 234** (1996) 529.
- [68] A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [69] C. Grosche et F. Steiner, Ann. Phys. (N. Y) **182** (1988) 120.
- [70] A. Zouache, Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009, Université Mentouri de Constantine.
- [71] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. **28A** (1942) 5.
- [72] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, J. Math. Phys. **48** (2007) 032102.
- [73] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, Ann. Phys. (NY) **332** (2007) 2179.
- [74] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [75] G. Chen, Phys. Lett. **A 339** (2009) 300.
- [76] F. Taskin, I. Boztosun et O. Bayrak, Int. J. Theor. Phys. **47** (2008) 1612 .
- [77] A. N. Vaidya et L. E. Silva Souza, arXiv : hep-th/0203133, 2002.
- [78] A. I. Milshtein, V. M. Strakhovenko, Phys. Lett. A **90** (1982) 447.

Annexe

Exact path integral treatment of a diatomic molecule potential

F. Benamira, L. Guechi,^{a)} S. Mameri, and M. A. Sadoun

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

(Received 3 June 2006; accepted 20 January 2007; published online 14 March 2007)

A rigorous evaluation of the path integral for Green's function associated with a four-parameter potential for a diatomic molecule is presented. A closed form of Green's function is obtained for different shapes of this potential. When the deformation parameter λ is $\lambda < 0$ or $0 < \lambda < 1$, it is found that the quantization conditions are transcendental equations that require a numerical solution. For $\lambda \geq 1$ and $r \in](1/\eta)\ln \lambda, \infty[$, the energy spectrum and the normalized wave functions of the bound states are derived. Particular cases of this potential which appear in the literature are also briefly discussed. © 2007 American Institute of Physics.
[DOI: 10.1063/1.2641423]

I. 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 molecular³ physics and quantum chemistry.⁴ 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 Rydberg-Klein-Rees 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 nonmetal 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 , η , and λ 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 λ is the shape parameter. If $\lambda = 0$, we have the ordinary Morse potential. In the case where $\lambda < 0$, potential (1) may be called "generalized Woods-Saxon potential" and "generalized Hulthén 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 have not proven satisfactory since, on the one hand, 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 $r \rightarrow (1/\eta)\ln \lambda$.

In what follows, we will be concerned with the path integral approach to find the exact solutions of this potential by distinguishing three cases according to the values of the deformation parameter λ . Our plan is to first review briefly the perturbative approach for handling path integral problems with Dirichlet boundary conditions. This is the case when the range of the parameter λ is $\lambda < 0$ or $0 < \lambda < 1$. In both cases, Green's function will be evaluated with this method and through appropriate space-time transformations. In each case, the poles of Green's function yield

^{a)}Electronic mail: guechilarbi@yahoo.fr

a transcendental equation for the energy spectrum. For $\lambda \geq 1$ and $r \in](1/\eta)\ln \lambda, \infty[$, Green's function will be derived directly in a closed form by applying only the space-time technique. The energy spectrum as well as the normalized wave functions of the bound states is evaluated explicitly.

II. PERTURBATION EXPANSION TECHNIQUE

In order to make this paper self-contained, let us briefly review the time ordered perturbation expansion technique applied to path integral problems with Dirichlet conditions.⁷ To do this, we consider a one-dimensional potential $W(y) = V(y) - \alpha \delta(y - y_0)$. The path integral for the propagator of this potential is given by

$$K(y'', y'; T) = \int Dy(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[\frac{m}{2} \dot{y}^2 - V(y) + \alpha \delta(y - y_0) \right] dt \right\}. \quad (2)$$

As a direct path integration is not possible, the construction of this propagator (2) can be done by the perturbative approach which consists in expanding $\exp((i\alpha/\hbar) \int_{t'}^{t''} \delta(y - y_0) dt)$ into the power series by assuming that the propagator associated with the potential $V(y)$ is known. To perform the successive integrations over the variables t_j in the series expansion⁸ of propagator (2), we introduce Green's function (Fourier transform of the propagator)

$$G(y'', y'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K(y'', y'; T), \quad (3)$$

and because of the convolution theorem of the Fourier transformation, we see that

$$G(y'', y'; E) = G^{(V)}(y'', y'; E) - \frac{G^{(V)}(y'', y_0; E) G^{(V)}(y_0, y'; E)}{G^{(V)}(y_0, y_0; E) - (1/\alpha)}, \quad (4)$$

where $G^{(V)}(y'', y'; E)$ is Green's function relative to the potential $V(y)$ and it is assumed that $G^{(V)}(y_0, y_0; E)$ effectively exists.

If we now take the limit $\alpha \rightarrow -\infty$, the physical system is subjected to move in the potential $V(y)$ bounded by an infinitely repulsive barrier⁹ at $y = y_0$. Then, Green's function on the half-line $y > y_0$ is given by

$$\tilde{G}(y'', y'; E) = \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} G(y'', y'; E) = G^{(V)}(y'', y'; E) - \frac{G^{(V)}(y'', y_0; E) G^{(V)}(y_0, y'; E)}{G^{(V)}(y_0, y_0; E)}. \quad (5)$$

III. GENERALIZED WOODS-SAXON POTENTIAL

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

$$V_1(r) = \frac{2m}{\hbar^2} v(r) = \frac{a}{(e^{\eta r} + \lambda)^2} - \frac{b}{e^{\eta r} + \lambda}, \quad (6)$$

where the minus sign is absorbed in the parameter λ and consequently this latter becomes positive.

In the path integral representation, radial Green's function associated with potential (6), for the s states, is given by

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar r'' r'} \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K_0(r'', r'; T), \quad (7)$$

where the propagator $K_0(r'', r'; T)$ is formally written as

$$K_0(r'', r'; T) = \int Dr(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m}{2} \dot{r}^2 - V_1(r) \right] dt \right\}. \quad (8)$$

To bring the above path integral into a soluble form, we perform the space transformation:

$$r \rightarrow \xi, \quad r \in \mathbb{R}^+, \quad \xi \in \left] \frac{1}{2\eta} \ln(1 + \lambda), \infty \right[, \quad (9)$$

defined by

$$r = \frac{1}{\eta} \ln[\exp(2\eta\xi) - \lambda], \quad (10)$$

accompanied by the time substitution¹⁰

$$\frac{dt}{ds} = f(r(\xi)), \quad (11)$$

where

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)}. \quad (12)$$

After some simple calculation, we show that Green's function (7) can be expressed in the following form:

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \frac{[f(r'')f(r')]^{1/4}}{r''r'} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E}S\right) P(\xi'', \xi'; S), \quad (13)$$

where

$$\tilde{E} = 2 \left[E - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad (14)$$

and

$$P(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + A \coth_\lambda(\eta\xi) - \frac{B}{\sinh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}. \quad (15)$$

We have here put

$$A = 2 \left[E + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad B = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda} - b - \frac{\eta^2 \lambda}{4} \right) - \lambda E, \quad (16)$$

and in Eqs. (12) and (15), we have introduced the deformed hyperbolic functions, which are defined by¹¹

$$\sinh_\lambda x = \frac{1}{2}(e^x - \lambda e^{-x}), \quad \cosh_\lambda x = \frac{1}{2}(e^x + \lambda e^{-x}), \quad \tanh_\lambda x = \frac{\sinh_\lambda x}{\cosh_\lambda x}, \quad (17)$$

where λ is a real positive parameter.

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 pseudotime $s' = \eta^2 s$. With these transformations, path integral (15) becomes

$$P(\xi'', \xi'; S') = \eta \int Dy(s') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{S'} ds' \left[\frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{A}{\eta^2} \coth y - \frac{B}{\eta^2 \lambda \sinh^2 y} \right] \right\}. \quad (18)$$

This expression has the same form as the path integral associated with the potential $V^{\text{MR}}(y)$ introduced by Manning and Rosen¹³ to discuss the vibrational states of diatomic molecules. Furthermore, $V^{\text{MR}}(y)$ has been used for describing the Kepler problem in hyperbolic geometry.¹⁴ The Manning-Rosen potential is defined for $y \in \mathbb{R}^+$, but in the present case, we have converted the path integral for potential (6) 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 $V^{\text{MR}}(y)$, but with Dirichlet boundary conditions at $y=y_0 = \ln \sqrt{(1+\lambda)/\lambda}$ and we shall consider the half-line $y > y_0$. Then, Green's function in the half-line $y > y_0$ is given by

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(\text{MR})} \left(\xi'', \xi'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) &= \frac{i}{\hbar \eta} \int_0^\infty dS' \exp \left(\frac{i \tilde{E}}{\hbar \eta^2} S' \right) P(\xi'', \xi'; S') \\ &= G^{(\text{MR})} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) - \frac{G^{(\text{MR})}(y'', y_0; \tilde{E}/\eta^2) G^{(\text{MR})}(y_0, y'; \tilde{E}/\eta^2)}{G^{(\text{MR})}(y_0, y_0; \tilde{E}/\eta^2)}, \end{aligned} \quad (19)$$

in which $G^{(\text{MR})}(y'', y'; \tilde{E}/\eta^2)$ is Green's function associated with the Manning-Rosen potential. Since its exact solution is known, we can then directly write down the result¹⁵

$$\begin{aligned} G^{(\text{MR})} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) &= \frac{m}{\hbar^2 \eta} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\quad \times \left(\frac{2}{1 + \coth y'} \frac{2}{1 + \coth y''} \right)^{(M_1 + M_2 + 1)/2} \\ &\quad \times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\ &\quad \times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\ &\quad \times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \end{aligned} \quad (20)$$

with $y_{>,<}$ the largest or smallest of y', y'' . ${}_2F_1(a, b, c; z)$ is the hypergeometric function and the following abbreviations have been used:

$$L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}}, \quad M_{1,2} = \sqrt{\frac{a}{\lambda^2 \eta^2} - \frac{b}{\lambda \eta^2} - \frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}. \quad (21)$$

The bound state energy levels are determined by the poles of Eq. (19) and are given by the following quantization condition which is a transcendental equation involving the hypergeometric function:

$${}_2F_1 \left(1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} - \frac{P}{\eta \lambda}, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} + \frac{P}{\eta \lambda}, 2 \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}} + 1; \frac{\lambda}{1 + \lambda} \right) = 0, \quad (22)$$

where

$$\frac{P}{\eta\lambda} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\eta^2\lambda^2}} \right), \quad (23)$$

and

$$\tilde{\beta} = \frac{M_1 + M_2}{2}. \quad (24)$$

In general, an analytical solution of this transcendental equation (22) is impossible. One can take into consideration a numerical calculation. The corresponding bound state wave functions to the energy spectrum given by Eq. (22) have the form

$$u(r) = r\psi(r) = N \left(\frac{e^{\eta r}}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\tilde{\beta}} \left(\frac{1}{e^{\eta r} + \lambda} \right)^{\sqrt{-2mE/\hbar^2\eta^2}} \\ \times {}_2F_1 \left(1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} - \frac{P}{\eta\lambda}, \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + \frac{P}{\eta\lambda}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + 1; \frac{\lambda}{e^{\eta r} + \lambda} \right). \quad (25)$$

IV. MORSE POTENTIAL

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

$$V_1(r) = ae^{-2\eta r} - be^{-\eta r}, \quad (26)$$

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

In this case, it can be seen from Eqs. (21), (23), and (24) that

$$P \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \sqrt{a},$$

$$1 + \tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} - \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, \quad (27)$$

$$\tilde{\beta} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + \frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda} \longrightarrow \infty.$$

On the other hand, by using the formula¹⁶

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1 \left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta} \right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (28)$$

it is easy to show that, in the limiting case $\lambda \rightarrow 0$, wave functions (25) become

$$u(r) \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} C \exp \left(-\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} r \right) \exp \left(-\frac{\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r} \right) \\ \times {}_1F_1 \left(\frac{1}{2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}}, 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2}} + 1; \frac{2\sqrt{a}}{\eta} e^{-\eta r} \right). \quad (29)$$

These are indeed the radial wave functions of the Morse potential. Considering the finiteness of the solutions, we see from Eq. (29) that the quantization condition is given by $1/2 - b/2\eta\sqrt{a} + \sqrt{-2mE/\hbar^2\eta^2} = -n$, from which we have

$$E_{n_r} = \frac{\hbar^2 \eta^2}{2m} \left(\frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - n_r - \frac{1}{2} \right)^2, \quad n_r = 0, 1, 2; \dots, \left\{ \frac{b}{2\eta\sqrt{a}} - \frac{1}{2} \right\}, \quad (30)$$

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

V. GENERALIZED HULTHÉN POTENTIAL

Before approaching the path integral evaluation of Green's function for $\lambda > 0$, we have to inspect the variation of the potential $V(r)$ according to the values of the parameter λ . 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 construct Green's function by path integration in each case.

Consider first the case in which $\lambda \geq 1$. In this case, we will discuss the potential $V(r)$ only in the interval $]r_0, \infty[$ since, in the other interval, the solution cannot be analytically done. With the help of the space transformation $r \rightarrow \xi$ defined by

$$r = \frac{1}{\eta} \ln[\exp(2\eta\xi) + \lambda], \quad (31)$$

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

$$\frac{dt}{ds} = f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\eta\xi)}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)}, \quad (32)$$

Green's function relative to the potential $V(r)$ can be represented as the following path integral:

$$\begin{aligned} G_0(r'', r'; E) &= \frac{i}{\hbar r'' r'} \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) \int Dr(t) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m}{2} \dot{r}^2 - V(r) \right] dt \right\}, \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{[f(r'')f(r')]^{1/4}}{r'' r'} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} S\right) P_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; S), \end{aligned} \quad (33)$$

where

$$\tilde{E} = 2 \left[E - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{a}{\lambda^2} + \frac{\eta^2}{4} \right) \right], \quad (34)$$

and

$$P_{\text{RM}}(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + A \tanh_\lambda(\eta\xi) + \frac{B}{\cosh_\lambda^2(\eta\xi)} \right] \right\}, \quad (35)$$

with $A=2[E+\hbar^2/2m(a/\lambda^2+\eta^2/4)]$ and $B=\hbar^2/2m(a/\lambda+b-\eta^2\lambda/4)-\lambda E$, is just the propagator for the Rosen-Morse potential¹⁷ defined in terms of λ -deformed hyperbolic functions as discussed.¹² From Green's function of this Rosen-Morse potential, we derive Green's function $G_0(r'', r'; E)$ associated with four-parameter potential (1) for $\lambda \geq 1$ and in the interval $]r_0, \infty[$,

$$\begin{aligned} G_0(r'', r'; E) &= \frac{m}{\hbar^2} \left[\frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \right] \frac{[f(r'')f(r')]^{1/4}}{\eta r'' r'} \\ &\quad \times [\lambda^2 e^{-\eta(r''+r')}]^{(M_1+M_2)/2} [(1-\lambda e^{-\eta r''})(1-\lambda e^{-\eta r'})]^{(M_1-M_2)/2} \\ &\quad \times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \lambda e^{-\eta r''}) \\ &\quad \times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - \lambda e^{-\eta r'}), \end{aligned} \quad (36)$$

where $L_E = -1/2 + \sqrt{a/\eta^2 \lambda^2 + b/\eta^2 \lambda - 2mE/\hbar^2 \eta^2}$, and $M_{1,2} = \sqrt{-2mE/\hbar^2 \eta^2} \pm 1/2 \sqrt{1 + 4a/\eta^2 \lambda^2}$.

The energy spectrum is obtained from the poles of Green's function which occur when $M_1 - L_E = -n_r$, in the Γ -function, where $n_r = 0, 1, 2, \dots$. This yields the energy spectrum

$$E_{n_r}^{\lambda \geq 1} = -\frac{\hbar^2}{8m\lambda^2} \left(\frac{(P + n_r \lambda \eta)^2 - a - b\lambda}{(P + n_r \lambda \eta)} \right)^2, \quad (37)$$

where

$$P = \frac{\lambda \eta}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{\lambda^2 \eta^2}} \right). \quad (38)$$

From the residues at the poles of Eq. (36), the normalized wave functions are found to be

$$u_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = \left[\frac{-2Q(P + n_r \lambda \eta - \lambda Q) \Gamma(n_r + 2P/\lambda \eta) \Gamma(n_r + 2P/\lambda \eta - 2Q/\eta)}{(P + n_r \lambda \eta) n_r! \Gamma(n_r - 2Q/\eta + 1)} \right]^{1/2} \\ \times \frac{1}{\Gamma(2P/\lambda \eta)} (1 - \lambda e^{-\eta r})^{P/\lambda \eta} (\lambda e^{-\eta r})^{-Q/\eta} {}_2F_1 \left(-n_r, n_r + \frac{2P}{\lambda \eta} - \frac{2Q}{\eta}, \frac{2P}{\lambda \eta}; 1 - \lambda e^{-\eta r} \right), \quad (39)$$

with

$$Q = \frac{(P + n_r \lambda \eta)^2 - a - b\lambda}{2\lambda(P + n_r \lambda \eta)}. \quad (40)$$

Now, we have to check whether wave functions (39) satisfy the boundary conditions

$$\lim_{r \rightarrow r_0} r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = 0, \quad (41)$$

and

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \Psi_{n_r}^{\lambda \geq 1}(r) = 0. \quad (42)$$

When $r \rightarrow r_0$, it is clear that Eq. (39) fulfills hermiticity condition (41) of the radial momentum operator P_r . But, for $r \rightarrow \infty$, we have to impose the restriction that only wave functions (39) with $Q < 0$ fulfill condition (42) and therefore it is seen from Eq. (40) that $n_r < (\sqrt{a + b\lambda} - P)/\lambda \eta$. The allowed values of the radial quantum number n_r are $n_r = 0, 1, 2, \dots, n_{r \max}$. 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 .

By setting $a=0, \lambda=1$, and $b=2mV_0/\hbar^2$ in expression (1), we obtain the standard Hulthén potential.

$$V(r) = -\frac{V_0}{e^{\eta r} - 1}. \quad (43)$$

The energy spectrum and the wave functions are then

$$E_{n_r} = -\frac{1}{8m\hbar^2 \eta^2} \left(\frac{2mV_0 - \hbar^2 \eta^2 (n_r + 1)^2}{n_r + 1} \right)^2, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \left\{ \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar \eta} \right\}, \quad (44)$$

$$u(r) = r\Psi_{n_r}(r) = \left[\eta p_{n_r} \left(\frac{1}{2} p_{n_r} + n_r^- + 1 \right) (p_{n_r} + n_r + 1) \right]^{1/2} \times (1 - e^{-\eta r}) e^{-\eta p_{n_r}/2r} {}_2F_1(-n_r, p_{n_r} + n_r + 2, 2; 1 - e^{-\eta r}), \quad (45)$$

with $p_{n_r} = 2mV_0/[\hbar^2 \eta^2 (n_r + 1)] - (n_r + 1)$.

These results coincide with those obtained by path integral,^{18–20} or through the resolution of the Schrödinger equation.²¹

Now consider the case where $0 < \lambda < 1$. The analysis presented above holds, but in this case, space transformation (31) maps $r \in \mathbb{R}^+$ into $\xi \in](1/2\eta)\ln(1-\lambda), \infty[$. Applying the same approach as for $\tilde{G}^{(\text{MR})}(\xi'', \xi'; \tilde{E}/\eta^2)$, Green's function $\tilde{G}^{(\text{RM})}(\xi'', \xi'; \tilde{E}/\eta^2)$ for the Rosen-Morse potential in the half-line $y > y_0$, with $y_0 = \ln \sqrt{(1-\lambda)}/\lambda$ is therefore given by

$$\tilde{G}^{(\text{RM})} \left(\xi'', \xi'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) = G^{(\text{RM})} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) - \frac{G^{(\text{RM})}(y'', y_0; \tilde{E}/\eta^2) G^{(\text{RM})}(y_0, y'; \tilde{E}/\eta^2)}{G^{(\text{RM})}(y_0, y_0; \tilde{E}/\eta^2)}, \quad (46)$$

where $G^{(\text{RM})}(y'', y'; \tilde{E}/\eta^2)$ is Green's function relative to the Rosen-Morse potential in the entire \mathbb{R} which has the following form:^{22–25}

$$G^{(\text{RM})} \left(y'', y'; \frac{\tilde{E}}{\eta^2} \right) = \frac{m}{\eta \hbar^2} \left[\frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \right] \times \left(\frac{1 - \tanh y'}{2} \frac{1 - \tanh y''}{2} \right)^{(M_1 + M_2)/2} \left(\frac{1 + \tanh y'}{2} \frac{1 + \tanh y''}{2} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh y_{>}}{2} \right) \times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh y_{<}}{2} \right). \quad (47)$$

The energy spectrum is determined by the poles of Eq. (46), i.e., by the transcendental equation

$${}_2F_1 \left(\nu + \frac{P}{\eta \lambda} - \varepsilon, \nu + \frac{P}{\eta \lambda} + \varepsilon, 2 \frac{P}{\eta \lambda}; 1 - \lambda \right) = 0, \quad (48)$$

with the following notation:

$$\nu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2 \eta^2}}, \quad \varepsilon = \sqrt{\frac{a}{\eta^2 \lambda^2} + \frac{b}{\eta^2 \lambda} + \nu^2}. \quad (49)$$

In this case, by taking into consideration Gauss's transformation formula

$${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} {}_2F_1(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1; 1 - z) + (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \times \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} {}_2F_1(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1; 1 - z), \quad (50)$$

and transforming the variable $y = \eta \xi - \ln \sqrt{\lambda}$ into the radial variable by Eq. (31), we find that the wave functions corresponding to the bound states are given by

$$u(r) = r\psi(r) = Ce^{-\sqrt{-(2mE/\hbar^2)}r}(1 - \lambda e^{-\eta r})^{P/\eta\lambda} {}_2F_1\left(\nu + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon, \nu + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon, 2\nu + 1; \lambda e^{-\eta r}\right), \quad (51)$$

where C is a constant factor.

In the limiting case $\lambda \rightarrow 0$, we have

$$\frac{P}{\eta\lambda} \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{a}}{\eta\lambda},$$

$$\nu + \frac{P}{\eta\lambda} + \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{2\sqrt{a}}{\eta\lambda} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \infty \quad (52)$$

$$\nu + \frac{P}{\eta\lambda} - \varepsilon \underset{\lambda \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\eta^2} - \frac{b}{2\eta\sqrt{a}}},$$

and thus, by using formula (28), we recover the wave functions and the energy spectrum of diatomic molecules in the Morse potential given in Sec. IV. As is expected, the energy spectrum is a continuous function with respect to the parameter λ by crossing the value $\lambda=0$.

VI. 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 Green's function associated with this potential cannot be evaluated for any deformation parameter in a unified manner. For $\lambda < 0$ or $0 < \lambda < 1$, the path integral evaluation is facilitated by the incorporation of an additional δ -function perturbation with strength α and for the motion in the half-line $y > y_0$, we consider the limit $\alpha \rightarrow -\infty$. In both cases we have demonstrated that the energy levels of the bound states are given by transcendental equations. Our results are different from those obtained in the framework of the shape invariance approach and by the supersymmetric WKB quantization method.⁶ When $\lambda \geq 1$ and $r \in](1/\eta)\ln \lambda, \infty[$, the energy spectrum and the normalized wave functions are found explicitly. On the contrary, if $\lambda \geq 1$ and $r \in]0, (1/\eta)\ln \lambda[$, the path integral is intractable analytically.

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

²J. Lindhard and A. Winther, Nucl. Phys. A **166**, 413 (1971); U. Myhrman, J. Math. Phys. **21**, 1732 (1980); J. Phys. A **166**, 4281 (2001).

³A. A. Berezin, Phys. Status Solidi B **50**, 71 (1972); J. Phys. C **12**, L363 (1979); Phys. Rev. B **33**, 2122 (1986).

⁴J. Gruninger, J. Chem. Phys. **55**, 3561 (1971); K. Szalwicz and H. J. Mokhorst, *ibid.* **75**, 5785 (1981); G. Malli, Chem. Phys. Lett. **26**, 578 (1981).

⁵J.-X. Sun, Acta Phys. Sin. **48**, 1992 (1999).

⁶C.-S. Jia, J.-Y. Wang, S. He, and L.-T. Sun, J. Phys. A **33**, 6993 (2000).

⁷C. Grosche, J. Phys. A **23**, 5205 (1990).

⁸R. P. Feynman and A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).

⁹T. E. Clark, R. Menikoff, and D. H. Sharp, Phys. Rev. D **22**, 3012 (1980).

¹⁰I. H. Duru and H. Kleinert, Phys. Lett. **84B**, 185 (1979).

¹¹A. Arai, J. Math. Anal. Appl. **158**, 63 (1991); J. Phys. A **34**, 4281 (2001).

¹²C. Grosche, J. Phys. A **38**, 2947 (2005).

¹³M. F. Manning and N. Rosen, Phys. Rev. **44**, 953 (1933).

¹⁴L. Infeld and A. Schild, Phys. Rev. **67**, 121 (1945).

¹⁵H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics* (World Scientific, Singapore, 1990).

¹⁶L. D. Landau and E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).

¹⁷N. Rosen and P. M. Morse, Phys. Rev. **42**, 210 (1932).

¹⁸J. M. Cai, P. Y. Cai, and A. Inomata, Phys. Rev. A **34**, 4621 (1986).

¹⁹T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi, and T. F. Hammann, J. Math. Phys. **32**, 441 (1991).

²⁰L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann, and A. Messouber, Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis., B **113**, 81 (1998).

- ²¹S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer, Berlin, 1974).
- ²²G. Junker and A. Inomata, in *Path Integrals from meV to MeV*, edited by M. C. Gutzwiller, A. Inomata, J. R. Klauder, and L. Streit (World Scientific, Singapore, 1986).
- ²³M. Böhm and G. Junker, J. Math. Phys. **28**, 1978 (1987).
- ²⁴C. Grosche, J. Phys. A **23**, 5073 (1989).
- ²⁵H. Kleinert and I. Mustapic, J. Math. Phys. **33**, 643 (1992).



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 λ 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 ($\lambda = qe^{r/R}$), 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 (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 , η and λ 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 λ 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 λ 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 λ -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 λ -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 δ -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 λ -deformed Manning–Rosen potential on a half-line. We then calculate the Green’s function by means of the δ -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 λ 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:

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

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

$$G_l(r^{\prime\prime}, r^{\prime}; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dT \left\langle r^{\prime\prime} \left| \exp \left[-\frac{i}{\hbar} T(H_l - E) \right] \right| r^{\prime} \right\rangle, \tag{3}$$

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 λ . 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 1: $\lambda \geq 1$ 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

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

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

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

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

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

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

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

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 λ 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

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

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 λ -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

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

where the symbols $\zeta_>$ and $\zeta_<$ denote $\max(\zeta'', \zeta')$ and $\min(\zeta'', \zeta')$ 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 $\Gamma(x)$ is infinite ($x = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$). 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

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

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 λ -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 δ -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

$$G_{\text{RM}}^\delta(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) = G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) - \frac{G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta_0; \tilde{E})G_{\text{RM}}(\zeta_0, \zeta'; \tilde{E})}{G_{\text{RM}}(\zeta_0, \zeta_0; \tilde{E}) - \frac{\alpha}{\alpha}}, \tag{40}$$

where $G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E})$ is the Green's function (23) and it has been assumed that $G_{\text{RM}}(\zeta_0, \zeta_0; \tilde{E})$ 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

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) &= \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} G_{\text{RM}}^\delta(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) \\ &= G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta'; \tilde{E}) - \frac{G_{\text{RM}}(\zeta'', \zeta_0; \tilde{E})G_{\text{RM}}(\zeta_0, \zeta'; \tilde{E})}{G_{\text{RM}}(\zeta_0, \zeta_0; \tilde{E})}. \end{aligned} \tag{41}$$

The energy spectrum is determined by the poles of (41), i.e., by the equation $G_{\text{RM}}(\zeta_0, \zeta_0; \tilde{E}) = 0$, 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 ξ 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 λ 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 λ and consequently this latter becomes positive. The form of the potential dictates upon us the following space transformation:

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

defined by

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

accompanied by the regulating function

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

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

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

where

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

and

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

We have here put

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

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

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

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:

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

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:

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

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

$$P = v(l + 1) \tag{62}$$

and

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

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),

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

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

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 η^{-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 ϕ_1 , ϕ_2 , and ψ 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 η defined by $a = (2m/\hbar^2)D_e e^{2x_{rc}}$, $b = (4m/\hbar^2)D_e e^{x_{rc}}$ 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

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

from which we have

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

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

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

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 λ 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 δ -function potential with strength α 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. Szalcwicz, 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,^{a)} 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 α , 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 potentials¹ and their solution, through the resolution of the s -wave Klein–Gordon equation² and in the framework of path integrals,³ 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.⁴ In this connection, we also mention the work⁵ 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 mechanics⁶ and by the asymptotic iteration method⁷ 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.⁸ The latter approximate solutions were extended to the case of a quantum system in the D -dimensional space.⁹

^{a)}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 δ -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^{10–16}

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

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 Kleinert¹⁷ as

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

where λ 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 αr 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.¹ 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,

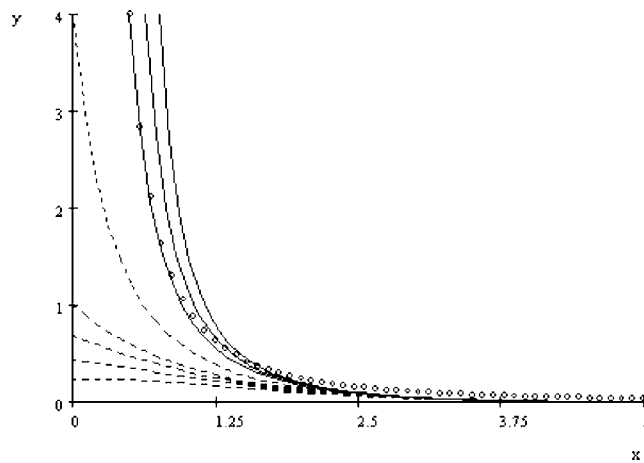


FIG. 1. Solid curves: $q=1, 1.2, 1.4$. Dashed curves: $q=-2, -1, -0.5, -0.2, 0, 0.5$. Circle curve: $1/(ar)^2$.

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

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

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

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 Arai¹⁸

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

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 formula¹⁹ 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 potential²⁰ (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^{21–23}

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

where the following abbreviations have been used

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

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.”²⁴ 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 δ -function term into the action contained in Eq. (28) to form an impenetrable wall²⁶ 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 τ_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 δ_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^{11,26} 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,²⁷ 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 ξ 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 Rosen²⁸ 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 potential²⁸

$$V_{\text{MR}}(y) = -A \coth y + \frac{B}{q \sinh^2 y}, \quad y > 0. \quad (70)$$

Since its exact solution is known, we can then directly write down the result²¹

$$\begin{aligned} G_{\text{MR}}(y'', y'; \tilde{E}_0) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1)\Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \left(\frac{2}{1 + \coth y''} \frac{2}{1 + \coth y'} \right)^{(M_1 + M_2 + 1)/2} \\ &\times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{(M_1 - M_2)/2} {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 \right. \\ &\left. + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right), \end{aligned} \quad (71)$$

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 δ_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 α^{-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 ϕ_1 , ϕ_2 , and ψ 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 α 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 formula²⁴

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (88)$$

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 equation²⁹ and by applying the asymptotic iteration method.³⁰ 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 δ -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.

- ¹L. Hulthén, *Ark Mat., Astron. Fys.* **28A**, 5 (1942).
- ²F. Domínguez-Adame, *Phys. Lett. A* **136**, 175 (1989).
- ³L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann, and A. Messouber, *Physica A* **234**, 529 (1996).
- ⁴M. Simsek and H. Egrifes, *J. Phys. A* **37**, 4379 (2004).
- ⁵H. Egrifes and R. Sever, *Int. J. Theor. Phys.* **46**, 935 (2007).
- ⁶G. Chen, Z. D. Chen, and Z. M. Lou, *Phys. Lett. A* **331**, 374 (2004).
- ⁷E. Olğar, R. Koç, and H. Tütüncüler, *Phys. Scr.* **78**, 015011 (2008).
- ⁸W. C. Qiang, R. S. Zhou, and Y. Gao, *Phys. Lett. A* **371**, 201 (2007).
- ⁹N. Saad, *Phys. Scr.* **76**, 623 (2007).
- ¹⁰J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82**, 914 (1951).
- ¹¹R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **80**, 440 (1950).
- ¹²R. P. Feynman and A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York, 1965).
- ¹³L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- ¹⁴T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi, and T. F. Hammann, *Phys. Scr.* **46**, 289 (1992).
- ¹⁵B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi, and T. F. Hammann, *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis., B* **111**, 99 (1996).
- ¹⁶M. T. Chefrour, F. Benamira, and L. Guechi, *Eur. Phys. J. C* **28**, 395 (2003).
- ¹⁷H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets*, 4th ed. (World Scientific, Singapore, 2006).
- ¹⁸A. Arai, *J. Math. Anal. Appl.* **158**, 63 (1991); *J. Phys. A* **34**, 4281 (2001).
- ¹⁹B. S. Dewitt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957); D. W. McLaughlin and L. S. Schulman, *J. Math. Phys.* **12**, 2520 (1971).
- ²⁰N. Rosen and P. M. Morse, *Phys. Rev.* **42**, 210 (1932).
- ²¹C. Grosche, *J. Phys. A* **38**, 2947 (2005).
- ²²F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri, and M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **48**, 032102 (2007).
- ²³F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri, and M. A. Sadoun, *Ann. Phys.* **322**, 2179 (2007).
- ²⁴L. D. Landau and E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- ²⁵I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic, New York, 1965).
- ²⁶T. E. Clark, R. Menikoff, and D. H. Sharp, *Phys. Rev. D* **22**, 3012 (1980).
- ²⁷R. D. Woods and D. S. Saxon, *Phys. Rev.* **95**, 577 (1954).
- ²⁸M. F. Manning and N. Rosen, *Phys. Rev.* **44**, 953 (1933).
- ²⁹G. Chen, *Phys. Lett. A* **339**, 300 (2005).
- ³⁰F. Taskin, I. Boztosun, and O. Bayrak, *Int. J. Theor. Phys.* **47**, 1612 (2008).
- ³¹F. Benamira, L. Guechi, and A. Zouache, *Phys. Lett. A* **367**, 498 (2007).