

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DES FRERES MENTOURI- CONSTANTINE 1  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

Série :

THESE  
PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT  
DE 3<sup>ème</sup> CYCLE (LMD)  
SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE

THEME

**Etude de potentiels polyatomiques par l'intégrale de chemin**

Par

**Abdellatif KADJA**

Soutenu le 13 / 06 / 2017

**Devant le jury :**

Président : F. Benamira Prof. Univ. frères Mentouri- Constantine 1

Rapporteur : L. Guechi Prof. Univ. frères Mentouri- Constantine 1

Examineurs : A. Bounames Prof. Univ. M. S. Ben Yahia- Jijel

K. Boudjema M. C. A Univ. A. Laghrour- Khenchela

Membre invité : D. Bouaziz Prof. Univ. M. S. Ben Yahia- Jijel

# Remerciements

J'aimerais tout d'abord exprimer toute ma gratitude et ma profonde reconnaissance à Monsieur le Professeur Larbi GUECHI, mon encadreur, pour sa patience, sa disponibilité et sa gentillesse. Il a guidé mes premiers pas dans la recherche avec compétence et efficacité. Avec lui j'ai pu construire une base scientifique consistante.

Je remercie vivement Monsieur Farid BENAMIRA, Professeur à l'université des frères Mentouri de Constantine et directeur du Laboratoire de Physique Théorique, de m'avoir accueilli dans son laboratoire et de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

J'adresse mes remerciements à Monsieur Abdelhafid BOUNAMES Professeur à l'université Mohammed Seddik Ben Yahia de Jijel et à Monsieur Kheireddine BOUDJEMA, Maître de conférences à l'université Abbès Laghrour de Khenchela d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie également Monsieur Djamil BOUAZIZ, Professeur à l'université Mohammed Seddik Ben Yahia de Jijel d'avoir accepté avec gentillesse d'examiner mon travail comme membre invité.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Mouvement d'une particule dans un potentiel à symétrie sphérique du type Rosen-Morse déformé</b>	<b>7</b>
1.1 Introduction . . . . .	7
1.2 Fonction de Green . . . . .	10
1.3 Spectre et fonctions d'onde des états liés . . . . .	14
1.4 Potentiel radial de Rosen-Morse . . . . .	15
1.5 Conclusion . . . . .	15
<b>2 Mouvement d'une particule dans le potentiel de Schiöberg déformé</b>	<b>17</b>
2.1 Introduction . . . . .	17
2.2 Fonction de Green . . . . .	21
2.3 Potentiel de Schiöberg déformé pour $q > 0$ . . . . .	22
2.3.1 Premier cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < \infty$ . . . . .	22
2.3.2 Deuxième cas : $0 < q < 1$ et $0 < r < \infty$ . . . . .	28
2.4 Potentiel de Schiöberg déformé pour $q < 0$ . . . . .	31
2.5 Cas particuliers . . . . .	35
2.5.1 Premier cas : $q = 1$ et $l \neq 0$ . . . . .	35
2.5.2 Deuxième cas : $q = 1$ et $l = 0$ . . . . .	36
2.5.3 Troisième cas : $q = 1$ et $\delta = 1$ . . . . .	37
2.5.4 Quatrième cas : $q = -1$ . . . . .	38
2.6 Conclusion . . . . .	39

<b>3</b>	<b>Mouvement d'une particule de Dirac dans un potentiel vecteur du type Hulthén déformé</b>	<b>40</b>
3.1	Introduction . . . . .	40
3.2	Equation de Dirac avec un potentiel de Hulthén déformé . . . . .	42
3.3	Solution par l'intégrale de chemin . . . . .	47
3.4	Fonction de Green et spectre d'énergie . . . . .	52
3.5	Cas particuliers . . . . .	55
3.5.1	Premier cas : potentiel standard de Hulthén . . . . .	55
3.5.2	Deuxième cas : potentiel de Coulomb . . . . .	56
3.6	Conclusion . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Mouvement de particules relativistes dans un potentiel vecteur plus un potentiel scalaire de type <math>\frac{V_0}{2} \tanh^2(r/d)</math></b>	<b>60</b>
4.1	Introduction . . . . .	60
4.2	Particule de Klein-Gordon . . . . .	62
4.2.1	Fonction de Green . . . . .	62
4.2.2	Spectre d'énergie et fonctions d'onde . . . . .	67
4.3	Particule de Dirac . . . . .	68
4.3.1	Fonction de Green . . . . .	68
4.3.2	Spectre d'énergie et fonctions d'onde . . . . .	73
4.4	Conclusion . . . . .	75
	<b>Conclusion</b>	<b>76</b>
	<b>A Opérateur M et Hamiltonien effectif pour un champ central</b>	<b>78</b>
	<b>B Transformation S de Biedenharn et diagonalisation de l'opérateur <math>\Gamma</math> de Martin-Glauber</b>	<b>81</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>85</b>

# Introduction

La mécanique quantique avait pris naissance après la constatation des limites de la théorie de la mécanique classique dans l'explication des phénomènes physiques à l'échelle microscopique. À partir de la notion de quanta proposée par Planck en 1900 et quelques années plus tard, sur la base des travaux de Planck, Einstein avait été amené à énoncer l'hypothèse de la dualité onde-corpuscule qui fut mise en évidence expérimentalement vingt ans après. Cette notion de dualité onde-corpuscule est un élément capital dans l'édifice de la théorie quantique. Au fur et à mesure de l'accumulation des résultats expérimentaux, deux formulations équivalentes de la mécanique quantique avaient vu le jour presque en même temps entre les années 1923 et 1927. La mécanique matricielle est fondée par Heisenberg [1] et la mécanique ondulatoire est l'œuvre de Schrödinger [2]. Ces deux présentations du formalisme quantique sont construites sur la base de quantification de la formulation Hamiltonienne de la mécanique analytique. Une nouvelle formulation de la mécanique quantique a pour origine un travail de Dirac [3] dans lequel il a montré que la fonction de transformation est proportionnelle à  $\exp \frac{i}{\hbar} S$ , où  $S$  est la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi à la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , dans laquelle l'Hamiltonien classique est l'analogue de l'Hamiltonien du système dynamique quantique. La solution  $S$  de l'équation d'Hamilton-Jacobi est la fonction action de la mécanique classique dans l'intervalle de temps  $[t_0, t]$ , c'est à dire l'intégrale par rapport au temps du Lagrangien classique,  $S = \int_{t_0}^t L_{cl}(t') dt$ . Ceci avait permis à Feynman [4] de développer le formalisme des intégrales de chemin fondé sur la connaissance du Lagrangien classique du système physique. L'idée de base du formalisme des intégrales de chemin de Feynman est le propagateur qui représente l'amplitude de probabilité pour que la particule, partie d'un point d'espace-temps  $(\vec{r}_1, t_1)$ , soit au point d'espace-temps  $(\vec{r}_2, t_2)$ . Il postule que le propagateur est la somme d'une infinité d'amplitudes partielles associées à tous

les chemins d'espace-temps possibles. Depuis sa formulation par Feynman [4] en 1948 jusqu'à 1978, l'approche des intégrales de chemin était limitée au calcul du propagateur pour des systèmes quantiques régis par un Lagrangien quadratique. Le traitement exact du potentiel de Coulomb en 1979 au moyen d'une transformation spatio-temporelle [5] avait été une tournant décisif dans le développement de ce formalisme. Depuis cette date, de nombreux problèmes, avaient été résolus dans ce cadre à l'aide de transformations spatiales et temporelles de plus en plus compliquées. Une collection importante d'exemples de problèmes non relativistes étudiés dans ce cadre apparaît dans un recueil confectionné par Grosche et Steiner [6].

Si, aujourd'hui, le calcul exact du propagateur par la méthode des intégrales de chemin de Feynman n'est plus assez passionnant pour des systèmes physiques gouvernés par un Lagrangien avec un potentiel régulier à long portée, il existe encore d'autres types de problèmes tels que ceux qui obéissent aux conditions aux limites de Dirichlet [7] et ceux des potentiels à symétrie sphérique dépendant d'un paramètre réel de déformation qui ne peuvent pas être abordés convenablement et totalement dans le cadre d'autres méthodes (la méthode standard des équations différentielles et les propriétés de symétrie [8], l'algèbre de Lie du groupe  $SO(2, 2)$  [9], la méthode de Nikiforov-Uvarov [10] et la supersymétrie en mécanique quantique [11]) et qui sont rarement discutés par l'approche des intégrales de chemin.

L'objet de ce travail concerne l'application de l'approche des intégrales de chemin à un ensemble de quatre systèmes dynamiques utiles en physique théorique et en chimie quantique. Il s'agit en fait d'un réexamen rigoureux de ces systèmes dynamiques étudiés d'une manière erronée dans le passé au moyen d'autres méthodes.

Ce mémoire se compose de quatre chapitres. Dans le chapitre 1, nous nous proposons d'étudier le problème des états liés d'une particule non relativiste de masse  $M$  en mouvement dans le potentiel radial de Rosen-Morse  $q$ -déformé. C'est un problème avec une condition aux limites du type Dirichlet. Pour incorporer cette condition directement dans l'intégrale de chemin, nous employons un artifice de calcul qui consiste en une perturbation décrite par la fonction  $\delta$  de Dirac et en rendant la force de la perturbation infiniment répulsive, nous obtenons la fonction de Green associée au potentiel en question. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde pour les ondes  $s$  ( $l = 0$ ) s'obtiennent respectivement à partir des pôles et des résidus de cette fonction de Green. Le potentiel standard radial de Rosen-Morse ( $q = 1$ ) est étudié comme un cas particu-

lier. Dans le chapitre 2, nous abordons le traitement du problème des états liés d'une particule non relativiste de masse  $\mu$  soumise à un potentiel de Schiöberg  $q$ -déformé. Le problème du calcul de l'intégrale de chemin associée à ce potentiel se présente de façon différente suivant la valeur que prend le paramètre  $q$ . Pour  $q > 0$ , nous distinguons deux cas :  $q \geq 1$  et  $0 < q < 1$ . Lorsque  $q \geq 1$  et  $r > \frac{1}{2\alpha} \ln q$ , la fonction de Green pour l'onde de moment cinétique  $l$  se ramène à celle associée au potentiel de Manning-Rosen. Les fonctions d'onde normalisées et le spectre d'énergie analytique sont déterminés. Pour  $0 < q < 1$ , la fonction de Green pour  $l = 0$  relative au potentiel de Manning-Rosen défini sur une demi-droite. C'est aussi un problème avec une condition aux limites de Dirichlet dont le traitement ressemble à celui exposé dans le premier chapitre. De l'expression compacte de la fonction de Green, nous tirons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde. Pour  $q < 0$ , la fonction de Green pour les ondes  $s$  ( $l = 0$ ) se réduit à celle du potentiel de Rosen-Morse défini sur une demi-droite, les fonctions d'onde et le spectre d'énergie sont obtenus en suivant une démarche analogue à celle utilisée dans le cas précédent. Plusieurs potentiels non déformés sont considérés comme des cas particuliers. Dans le chapitre 3, nous présentons l'étude du problème des états liés concernant une particule de Dirac en mouvement dans un potentiel vecteur de type Hulthén  $q$ -déformé. Nous adoptons une approximation appropriée pour prendre en considération le potentiel centrifuge. Ensuite à l'aide de la transformation de Biedenharn, nous diagonalisons l'Hamiltonien effectif de la forme itérative de l'équation de Dirac. En développant la fonction de Green qui satisfait l'équation de Dirac de deuxième ordre en ondes partielles dans le système des coordonnées sphériques, la partie radiale se ramène par la transformation spatio-temporelle généralisée de Duru-Kleinert [5] à une intégrale de chemin associée au potentiel de Rosen-Morse  $q$ -déformé. La fonction de Green qui obéit à l'équation de Dirac de premier ordre est construite et le spectre d'énergie pour les états  $\kappa$  est obtenu. Le potentiel standard de Hulthén et le potentiel de Coulomb sont discutés comme des cas particuliers. Dans le chapitre 4, nous examinons le problème des états liés des ondes  $s$  ( $l = 0$ ) d'une particule de Klein-Gordon et celle de Dirac en mouvement dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire égaux de la forme  $\frac{V_0}{2} \tanh^2(r/d)$ . Nous montrons que la fonction de Green radiale pour une particule sans spin et la partie radiale de la fonction de Green pour l'équation de Dirac de second ordre sont similaires pour le cas des ondes  $s$ . Elles sont réduites à l'intégrale de chemin relative au potentiel de Pöschl-Teller modifié. Nous

procédons comme dans le premier chapitre pour prendre en considération les conditions aux limites de Dirichlet. Les fonctions d'onde et le spectre d'énergie sont obtenus dans le cas de la particule de Klein-Gordon et celui de la particule de Dirac. Enfin, nous terminons ce mémoire par une conclusion.

Deux annexes placés à la fin de ce mémoire abordent l'élaboration de certaines relations qui présentent une grande utilité dans ce travail.

Ce travail de recherche originale a donné lieu à deux publications internationales.



# Chapitre 1

## Mouvement d'une particule dans un potentiel à symétrie sphérique du type Rosen-Morse déformé

### 1.1 Introduction

Le potentiel de Rosen-Morse est une fonction potentielle unidimensionnelle introduite par Rosen et Morse en 1932 pour étudier les états de vibration de molécules polyatomiques [12]. Depuis lors, il a suscité beaucoup d'intérêt en raison de ses nombreuses applications dans plusieurs branches de la physique [13, 14]. Il a été également utilisé comme un exemple illustratif dans différentes méthodes telles que la méthode de factorisation [15, 16], l'approche prépotentielle [17], la technique des intégrales de chemin [18, 19, 20, 21], la supersymétrie en mécanique quantique et l'invariance de forme [11, 22] et la méthode de Nikiforov-Uvarov [23, 24, 25].

Il y a aussi le potentiel de Rosen-Morse à symétrie sphérique qui a été discuté par plusieurs auteurs [8, 26, 27, 28, 29, 30, 31] ces derniers temps sans distinguer entre le problème de potentiel unidimensionnel et le potentiel radial. Par conséquent, les solutions qui ont été obtenues jusqu'à présent sont celles du problème unidimensionnel. D'autre part, mentionnons que l'énergie de dissociation et la longueur de liaison à l'équilibre comme paramètres explicites ont été utilisées pour générer un ensemble de potentiels diatomiques [32] contenant le potentiel

radial de Rosen-Morse qui a été également traité dans un espace à  $D$  dimensions via la méthode de la supersymétrie et l'invariance de forme [33].

Le but de ce travail est de réexaminer et redériver, dans le cadre de l'intégrale de chemin, les solutions correctes du problème d'une particule non relativiste de masse  $M$  en mouvement dans le potentiel radial de Rosen-Morse  $q$ -déformé défini par

$$V_q(r) = -\frac{V_1}{\cosh_q^2\left(\frac{r}{a}\right)} + V_2 \tanh_q\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1.1)$$

où  $V_1, V_2, a$  et  $q$  sont quatre paramètres ajustables. Il est exprimé en termes des fonctions hyperboliques  $q$ -déformées ( $q > 0$ )

$$\sinh_q x = \frac{e^x - qe^{-x}}{2}, \quad \cosh_q x = \frac{e^x + qe^{-x}}{2}, \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}. \quad (1.2)$$

introduites pour la première fois par Arai [34]. Le paramètre  $q$  introduit, peut être utilisé comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions inéatomiques, en particulier, lorsque le mouvement de la particule a lieu dans un demi-espace différent de celui pour lequel  $r > 0$ , c'est à dire, la localisation du centre de masse de la molécule n'est pas à l'origine de la coordonnée. La Figure. 1.1 représente l'allure du potentiel (1.1) pour différentes valeurs de  $q$  avec  $V_q(r)$  exprimé en unités  $V_1$  et la coordonnée  $r$  en unités  $a$ .

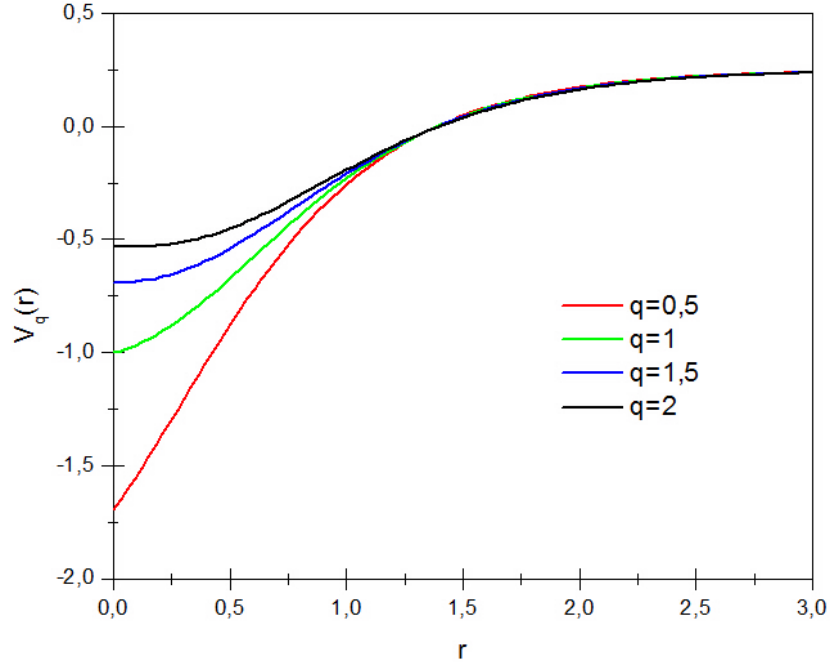


Fig. 1.1 : Allure du potentiel de Rosen-Morse (1.1) pour différentes valeurs de  $q$ .

Ici  $V_2 = V_1/4$ .

Dans le second paragraphe, nous exposons une démarche d'évaluation de la fonction de Green par l'approche des intégrales de chemin pour un potentiel avec des conditions aux limites de Dirichlet. Nous employons une astuce qui consiste à incorporer une perturbation  $\delta$ -fonction comme un potentiel supplémentaire. Après le calcul de la fonction de Green sous forme analytique, c'est à dire, sous une forme qui n'implique pas de sommation, nous rendons la force de la perturbation  $\delta$ -fonction infiniment répulsive afin d'obtenir la fonction de Green associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) pour le potentiel (1.1). Dans le troisième paragraphe, nous montrons que les niveaux d'énergie de la particule sont définis par une équation transcendante et nous déterminons les fonctions d'onde correspondantes aux états liés. Dans le quatrième paragraphe, le potentiel standard radial de Rosen-Morse ( $q = 1$ ) est étudié comme un cas particulier. Enfin,

le dernier paragraphe est une conclusion.

## 1.2 Fonction de Green

Le propagateur d'une particule de masse  $M$  en mouvement dans le potentiel radial déformé de Rosen-Morse (1.1) s'écrit en coordonnées sphériques ainsi

$$K^q(\vec{r}'' , \vec{r}' ; T) = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} K_l^q(r'', r'; T) P_l\left(\frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'}\right), \quad (1.3)$$

où  $P_l\left(\frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'}\right)$  est un polynôme de Legendre de degré  $l$  en  $\frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'} = \cos\theta'' \cos\theta' + \sin\theta'' \sin\theta' \cos(\phi'' - \phi')$  et  $K_l^q(r'', r'; T)$  est le propagateur radial. En utilisant l'approche des intégrales de chemin [35], il est possible d'exprimer  $K_l^q(r'', r'; T)$  sous la forme suivante

$$K_l^q(r'', r'; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left[ \int dr_j \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right], \quad (1.4)$$

dans laquelle l'action dans l'intervalle  $[t_{j-1}, t_j]$  est définie par

$$S(j, j-1) = \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 + \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr_j r_{j-1}} + \varepsilon \left( \frac{V_1}{\cosh_q^2\left(\frac{r_j}{a}\right)} - V_2 \tanh_q\left(\frac{r_j}{a}\right) \right), \quad (1.5)$$

avec les notations habituelles  $r_j = r(t_j)$ ,  $\Delta r_j = r_j - r_{j-1}$ ,  $\varepsilon = t_j - t_{j-1} = T/N$ ,  $t' = t_0$ ,  $t'' = t_N$ ,  $T = t'' - t'$  et  $N$  étant le nombre de sous-intervalles égaux  $[t_{j-1}, t_j]$ . En supposant que le système contient seulement un spectre discret, l'expression (1.4) du propagateur peut s'écrire sous forme d'un développement spectral comme suit

$$K_l^q(r'', r'; T) = \sum_{n_r} \varphi_{n_r, l}^{q*}(r') \varphi_{n_r, l}^q(r'') e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n_r, l} T}; \quad T > 0, \quad (1.6)$$

où  $\varphi_{n_r, l}^q(r)$  est la fonction d'onde radiale réduite,  $E_{n_r, l}$  sont les valeurs propres de l'énergie et  $n_r$  dénote le nombre de nœuds de la fonction d'onde radiale. Notre objectif est de trouver les énergies  $E_{n_r}$  et les fonctions d'onde  $\varphi_{n_r}^q(r)$  pour  $l = 0$  à partir de l'évaluation de l'expression intégrale (1.4). Comme l'intégrale de chemin radiale (1.4) ne peut pas être calculée directement, nous considérons la fonction de Green radiale (transformée de Fourier du propagateur radial) :

$$G_0^q(r'', r'; E) = \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) K_0^q(r'', r'; T). \quad (1.7)$$

avec la nouvelle variable  $u = \frac{r}{a} - \ln \sqrt{q}$  et la transformation temporelle  $\frac{dt}{ds} = a^2$ , la fonction de Green radiale (1.7) devient

$$G_0^q(r'', r'; E) = a\tilde{G}_{RM}(u'', u'; E), \quad (1.8)$$

et

$$\tilde{G}_{RM}(u'', u'; E) = \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar}a^2ES\right) K_0(u'', u'; S), \quad (1.9)$$

où

$$K_0(u'', u'; S) = \int Du(s) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^S \left(\frac{M}{2}\dot{u}^2 - V(u)\right) ds\right\}, \quad (1.10)$$

avec

$$V(u) = a^2 \left( V_2 \tanh u - \frac{V_1}{q \cosh^2 u} \right); \quad u \geq -\ln \sqrt{q}. \quad (1.11)$$

Le propagateur (1.10) a la même forme que l'intégrale de chemin associée au potentiel de Rosen-Morse  $V_{RM}(u)$  pour  $u \in \mathbb{R}$ , mais, dans le cas présent, nous avons converti l'intégrale de chemin pour le potentiel radial déformé (1.1) en une intégrale de chemin associée à un potentiel du type Rosen-Morse à travers la transformation  $r \rightarrow r(u)$ , qui fait correspondre  $\mathbb{R}^+ \rightarrow ]-\ln \sqrt{q}, +\infty[$ . Cela signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite  $u \geq u_0 = -\ln \sqrt{q}$ . Comme une intégration directe des chemins est impossible, le problème peut être résolu par un artifice qui consiste à incorporer un terme auxiliaire représenté par une fonction  $\delta$  de Dirac dans l'action du propagateur (1.9) pour former un mur infranchissable [36] au point  $u = u_0 = -\ln \sqrt{q}$  en rendant la force de la fonction  $\delta$  de Dirac infiniment répulsive. Alors, la fonction de Green est donnée par

$$G_0^\delta(u'', u'; E) = \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar}a^2ES\right) K_0^\delta(u'', u'; S), \quad (1.12)$$

où

$$K_0^\delta(u'', u'; S) = \int Du(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left( \frac{M}{2} \dot{u}^2 - V^\delta(u) \right) ds \right\} \quad (1.13)$$

est le propagateur d'un système unidimensionnel dans un potentiel de la forme

$$V^\delta(u) = V_{RM}(u) - \lambda \delta(u - u_0); \quad u \in \mathbb{R}. \quad (1.14)$$

où  $V_{RM}(u)$  est le potentiel de Rosen-Morse ordinaire. Comme un calcul par l'intégrale de chemin du noyau (1.13) ne peut pas être effectué directement à cause de la forme compliquée du potentiel (1.14), nous appliquons l'approche des perturbations en développant  $\exp \left( \frac{i}{\hbar} \lambda \int_{s'}^{s''} \delta(u - u_0) ds \right)$  en une série de puissances. Ceci donne le développement en série suivant [7, 37, 38] :

$$\begin{aligned} K_0^\delta(u'', u'; S) &= K_{RM}(u'', u'; S) \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} \lambda \right)^n \int Du(s) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left( \frac{M}{2} \dot{u}^2 - V_{RM}(u) \right) ds \right] \\ &\times \int_0^S \delta(u_1 - u_0) ds_1 \dots \int_0^S \delta(u_n - u_0) ds_n, \end{aligned} \quad (1.15)$$

où  $K_{RM}(u'', u'; S)$  est le propagateur relatif au potentiel de Rosen-Morse standard. Avec le temps ordonné ainsi :  $s' = s_0 = 0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n < s'' = S$ , le propagateur (1.15) peut être récrit comme une série de perturbation de Feynman-Dyson

$$\begin{aligned}
K_0^\delta(u'', u'; S) &= K_{RM}(u'', u'; S) \\
&+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} \lambda \right)^n \prod_{j=1}^n \left[ \int_{s'}^{s_{j+1}} ds_j \int_{-\infty}^{+\infty} du_j \right] \\
&\times K_{RM}(u_1, u'; s_1 - s') \delta(u_1 - u_0) K_{RM}(u_2, u_1; s_2 - s_1) \\
&\times \dots \times \delta(u_{n-1} - u_{n-2}) K_{RM}(u_n, u_{n-1}; s_n - s_{n-1}) \\
&\times \delta(u_n - u_{n-1}) K_{RM}(u'', u_n; s'' - s_n) \\
&= K_{RM}(u'', u'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i}{\hbar} \lambda \right)^n \int_{s'}^{s''} ds_n \\
&\times \int_{s'}^{s_n} ds_{n-1} \dots \int_{s'}^{s_2} ds_1 K_{RM}(u_1, u'; s_1 - s') \\
&\times K_{RM}(u_2, u_1; s_2 - s_1) \times \dots \times K_{RM}(u'', u_n; s'' - s_n). \tag{1.16}
\end{aligned}$$

Afin d'effectuer les intégrations successives sur les variables temporelles  $s_j$  dans (1.16), nous insérons (1.16) dans (1.12), et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de Fourier, nous arrivons à

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; E) = G_{RM}(u'', u'; E) - \frac{G_{RM}(u'', u_0; E)G_{RM}(u_0, u'; E)}{G_{RM}(u_0, u_0; E) - \frac{1}{\lambda}}, \tag{1.17}$$

où  $G_{RM}(u'', u'; E)$  est la fonction de Green relative au potentiel de Rosen-Morse dans l'espace entier  $\mathbb{R}$ , et, comme sa solution est bien connue dans la littérature [20, 21], nous avons

$$\begin{aligned}
G_{RM}(u'', u'; E) &= -\frac{iM}{\hbar} \frac{\Gamma(M_1 - L_{\nu_q})\Gamma(L_{\nu_q} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{1 - \tanh u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh u''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left( \frac{1 + \tanh u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh u''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\nu_q}, L_{\nu_q} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh u_>) \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\nu_q}, L_{\nu_q} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh u_<) \right), \tag{1.18}
\end{aligned}$$

avec les abréviations suivantes :

$$\begin{cases} L_{\nu_q} = \frac{1}{2}(\nu_q - 1), \\ \nu_q = \sqrt{1 + \frac{8Ma^2V_1}{\hbar^2q}}, \\ M_{1,2} = \sqrt{\frac{Ma^2}{2\hbar^2}} (\sqrt{V_2 - E} \pm \sqrt{-V_2 - E}). \end{cases} \quad (1.19)$$

Les symboles  $u_>$  et  $u_<$  dénotent le  $\max(u'', u')$  et le  $\min(u'', u')$  respectivement, et  ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, u)$  représente la fonction hypergéométrique.

Maintenant, à la limite  $\lambda \rightarrow -\infty$ , le système physique est forcé de se mouvoir dans le potentiel  $V_{RM}(u)$  limité par une barrière infiniment répulsive [7, 36] localisée au point  $u = u_0$ . Alors, la fonction de Green est donnée par

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; E) &= \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} G_{RM}^\delta(u'', u'; E) \\ &= G_{RM}(u'', u'; E) - \frac{G_{RM}(u'', u_0; E)G_{RM}(u_0, u'; E)}{G_{RM}(u_0, u_0; E)}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

### 1.3 Spectre et fonctions d'onde des états liés

On peut obtenir le spectre d'énergie pour les états liés à partir des pôles de la fonction de Green (1.20), c'est à dire, par l'équation  $G_{RM}(u_0, u_0; E) = 0$ , ou encore par l'équation transcendante suivante

$${}_2F_1\left(M_1(E_{n_r}) - L_{\nu_q}, L_{\nu_q} + M_1(E_{n_r}) + 1, M_1(E_{n_r}) + M_2(E_{n_r}) + 1; \frac{q}{q+1}\right) = 0. \quad (1.21)$$

Les énergies  $E_{n_r}$  des états liés peuvent être déterminées par la résolution numérique de cette équation. Les fonctions d'onde correspondantes (1.21) sont de la forme :

$$\begin{aligned} \varphi_{n_r}^q(r) &= C \left(\frac{q}{e^{2r/a} + q}\right)^{\frac{M_1(E_{n_r}) + M_2(E_{n_r})}{2}} \left(\frac{e^{2r/a}}{e^{2r/a} + q}\right)^{\frac{M_1(E_{n_r}) - M_2(E_{n_r})}{2}} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(M_1(E_{n_r}) - L_{\nu_q}, L_{\nu_q} + M_1(E_{n_r}) + 1, M_1(E_{n_r}) + M_2(E_{n_r}) + 1; \frac{q}{e^{2r/a} + q}\right), \end{aligned} \quad (1.22)$$



où  $C$  est un facteur constant. Notons que les fonctions d'onde (1.22) vérifient bien les conditions aux limites :  $\varphi_{n_r}^q(0) = \varphi_{n_r}^q(+\infty) = 0$ .

## 1.4 Potentiel radial de Rosen-Morse

En faisant  $q = 1$  dans l'expression (1.1), nous obtenons ce que l'on appelle le potentiel radial de Rosen-Morse

$$V(r) = -\frac{V_1}{\cosh^2\left(\frac{r}{a}\right)} + V_2 \tanh\left(\frac{r}{a}\right). \quad (1.23)$$

Les deux paramètres  $L_{\nu_q}$  et  $\nu_q$  définis par les expressions (1.19) peuvent s'écrire ainsi

$$\begin{cases} L_{\nu_1} = \frac{1}{2}(\nu_1 - 1), \\ \nu_1 = \sqrt{1 + \frac{8Ma^2V_1}{\hbar^2}}. \end{cases} \quad (1.24)$$

Dans ce cas, la condition de quantification transcendante pour les niveaux d'énergie discrets  $E_{n_r}$  (1.21) prend la forme suivante :

$${}_2F_1\left(M_1(E_{n_r}) - L_{\nu_1}, L_{\nu_1} + M_1(E_{n_r}) + 1, M_1(E_{n_r}) + M_2(E_{n_r}) + 1; \frac{1}{2}\right) = 0, \quad (1.25)$$

et la fonction d'onde (1.22) devient

$$\begin{aligned} \varphi_{n_r}^1(r) &= C \left(\frac{1}{e^{2r/a} + 1}\right)^{\frac{M_1(E_{n_r}) + M_2(E_{n_r})}{2}} \left(\frac{e^{2r/a}}{e^{2r/a} + 1}\right)^{\frac{M_1(E_{n_r}) - M_2(E_{n_r})}{2}} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(M_1(E_{n_r}) - L_{\nu_1}, L_{\nu_1} + M_1(E_{n_r}) + 1, M_1(E_{n_r}) + M_2(E_{n_r}) + 1; \frac{1}{e^{2r/a} + 1}\right). \end{aligned} \quad (1.26)$$

## 1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons discuté le problème de l'intégrale de chemin pour un potentiel de Rosen-Morse radial déformé qui est un potentiel avec des conditions aux limites de Dirichlet.

Notre approche montre que l'intégrale de chemin dans le cas présent est plus rigoureuse par rapport aux autres méthodes parce que les conditions aux limites de Dirichlet à l'origine  $r = 0$  sont incorporées directement dans l'intégrale de chemin en utilisant une perturbation décrite par la fonction  $\delta$  de Dirac et rendant la force de la perturbation infiniment répulsive après la construction de la fonction de Green. La fonction de Green exacte pour ce problème de potentiel contenue dans cette étude est obtenue pour la première fois. Les pôles et les résidus donnent respectivement une condition de quantification transcendante impliquant la fonction hypergéométrique et les fonctions d'onde correspondantes aux niveaux d'énergie  $E_{n_r}$  des états  $s$ . L'équation transcendante peut être résolue numériquement.

## Chapitre 2

# Mouvement d'une particule dans le potentiel de Schiöberg déformé

### 2.1 Introduction

Depuis l'introduction du potentiel de Morse [39] en 1929, plusieurs fonctions potentielles de type exponentiel ont été proposées comme des modèles pour expliquer et interpréter les données expérimentales des molécules diatomiques. En 1986 Schiöberg [40] avait introduit un potentiel (empirique) hyperbolique comme une amélioration de la fonction potentielle de Morse, cette fonction potentielle de Schiöberg est plus précise que celle de Morse pour ajuster les courbes RKR (Rydberg-Klein-Rees) expérimentales et les niveaux d'énergie des états de rotation et des états de vibration de certaines molécules diatomiques. De plus, le potentiel de Schiöberg est une généralisation des potentiels de Morse, Kratzer, Coulomb, l'oscillateur harmonique et d'autres fonctions potentielles. Toutes les propriétés et les applications de ce potentiel sont données dans la référence [40]. En adoptant la forme et les notations des références [41, 42], l'expression du potentiel de Schiöberg est donnée par

$$V_{\pm}(r) = D [\delta - \sigma [\coth(\alpha r)]^{\pm}]^2. \quad (2.1)$$

où  $D$ ,  $\alpha$ ,  $\delta$  et  $\sigma$  sont des paramètres positifs caractérisant les propriétés du potentiel d'interaction et où  $D = D_e / (\delta - \sigma)^2$ ,  $D_e$  étant l'énergie de dissociation spectroscopique.

Récemment, le potentiel (2.1) a été analysé par certains auteurs en utilisant la méthode des séries hypergéométriques [41] et en employant la méthode de Nikiforov-Uvarov [42, 43]. Mais les résultats obtenus par ces auteurs sont incorrects dans le cas de  $V_-(r)$  car les fonctions d'onde obtenues ne remplissent pas la condition à la limite  $r \rightarrow 0$ . De plus, l'équation de Schrödinger avec le potentiel  $V_-(r)$  ne peut pas être résolue par la méthode polynomiale de Nikiforov-Uvarov.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude par l'approche des intégrales de chemin d'un potentiel plus général que le potentiel (2.1) dont la forme est

$$V_q(r) = D [\delta - \sigma \coth_q(\alpha r)]^2. \quad (2.2)$$

où  $q$  est un paramètre réel de déformation. Le potentiel de Schiöberg (2.1) est un cas particulier de ce potentiel si on prend  $q = \pm 1$ . Signalons ici qu'une fonction potentielle qui ressemble à l'expression (2.2) a été proposée récemment par Mustafa [44]. En utilisant l'énergie de dissociation et la longueur de liaison à l'équilibre comme paramètres explicites, il convertit cette fonction potentielle en une forme similaire à celle donnée par Jia et al [45] dans le cadre de l'étude d'un système physique à une dimension. Par analogie au travail de Jia et ses collaborateurs, Mustafa a présenté une discussion de ce potentiel via l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique. Le même problème a été analysé par Amrouche et ses collaborateurs à travers la technique des intégrales de chemin [46]. Mais les résultats obtenus dans ces deux dernières études sont partiellement corrects.

Considérons le potentiel effectif

$$V_{eff}(r) = V_q(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}, \quad (2.3)$$

où nous allons modifier le terme potentiel centrifuge en adoptant l'approximation suivante [47, 48]

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{4q\alpha^2 e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r} - q)^2}. \quad (2.4)$$

Cette approximation est acceptable uniquement pour  $q \geq 1$ . Alors, pour étudier le mouvement d'une particule dans le potentiel déformé de Schiöberg, il convient de distinguer trois cas :

**Premier cas :**  $q \geq 1, l \geq 1$

Dans ce cas le potentiel effectif, compte tenu de l'approximation (2.4), peut s'écrire sous la forme suivante :

$$V_{eff}(r) = D [\delta - \sigma \coth_q(\alpha r)]^2 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \frac{l(l+1)q}{\sinh_q^2(\alpha r)}. \quad (2.5)$$

Sa valeur minimum est obtenue au point

$$r_{\min} = \frac{1}{2\alpha} \ln \left[ q - \frac{q \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{\delta} \right)^2 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{\mu D \delta^2} l(l+1) \right]}{\left( \frac{\sigma}{\delta} - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta^2} l(l+1) - \frac{1}{4}} \right], \quad (2.6)$$

et vaut

$$V_{eff}(r_{\min}) = D\delta^2 \left[ 1 - \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta^2} l(l+1)} \right]^2 + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} l(l+1) \frac{\left[ 1 + \frac{\sigma}{\delta} + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta \sigma} l(l+1) \right] \left[ 1 - \frac{\sigma}{\delta} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta \sigma} l(l+1) \right]}{\left[ \frac{\sigma}{\delta} + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta \sigma} l(l+1) \right]^2}. \quad (2.7)$$

Comme  $r_{\min} > 0$ , la condition d'existence des états liés est déterminée par la double inégalité :

$$\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta^2} l(l+1)} < \frac{\sigma}{\delta} < \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu D \delta^2} l(l+1)}. \quad (2.8)$$

où  $D\delta^2 > \frac{2\hbar^2 \alpha^2}{\mu} l(l+1)$ .

**Deuxième cas :** l'onde  $s$  ( $l = 0$ )

Dans ce cas, la valeur minimum du potentiel effectif ( $q > 0$ )

$$V_{eff}(r_{\min}) = 0, \quad (2.9)$$

au point

$$r_{\min} = \frac{1}{2\alpha} \ln \left[ q - \frac{2q \left( \frac{\sigma}{\delta} \right)^2}{\left( \frac{\sigma}{\delta} - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4}} \right], \quad (2.10)$$

Alors, nous avons la condition

$$0 < \frac{\sigma}{\delta} < 1. \quad (2.11)$$

**Troisième cas :  $q < 0$**

Dans ce cas en effectuant la substitution  $q \rightarrow -|q|$ , le potentiel effectif s'écrit alors

$$V_{eff}(r) = D [\delta - \sigma \tanh_{|q|}(\alpha r)]^2, \quad (2.12)$$

avec la valeur minimum

$$V_{eff}(r_{\min}) = 0, \quad (2.13)$$

au point

$$r_{\min} = \frac{1}{2\alpha} \ln \left[ \frac{2|q| \left(\frac{\sigma}{\delta}\right)^2}{\left(\frac{\sigma}{\delta} - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}} - |q| \right], \quad (2.14)$$

La condition d'existence d'états liés est définie par

$$0 < \frac{\delta}{\sigma} < 1. \quad (2.15)$$

Dans le deuxième paragraphe, nous construisons la fonction de Green radiale relative au potentiel (2.2), Dans le troisième paragraphe nous calculons l'intégrale de chemin associée au potentiel de Schiöberg déformé pour  $q > 0$ , nous distinguons deux cas différents selon les valeurs de  $q$  :  $0 < q < 1$  et  $q \geq 1$ . Pour  $q \geq 1$  et  $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < \infty$ , la fonction de Green relative à l'onde  $l$  s'obtient moyennant une approximation appropriée du terme centrifuge et un changement de variable qui la transforme en celle associée au potentiel de Manning-Rosen, à partir de laquelle sont déterminés le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées. Pour  $0 < q < 1$ , le potentiel (2.2) est continu sur  $\mathbb{R}^+$ , la fonction de Green pour  $l = 0$  relative au potentiel  $V_{MR}^0(u)$  de Manning-Rosen est définie sur le demi-axe  $]-\frac{1}{2} \ln q, +\infty[$ . Dans ce cas, nous utilisons la démarche exposée au chapitre 1 qui consiste à incorporer une perturbation représentée par une fonction  $\delta$  de Dirac pour calculer la fonction de Green. Les pôles de la fonction de Green donnent une équation transcendante pour déterminer les niveaux d'énergie discrets de la particule. Dans le quatrième paragraphe nous évaluons la fonction de Green radiale

pour  $l = 0$  associée au potentiel de Schiöberg déformé pour  $q < 0$ . Dans ce cas la fonction de Green se ramène à celle du potentiel de Rosen-Morse défini sur le demi-axe  $] -\frac{1}{2} \ln |q|, +\infty[$ . Comme dans le cas précédent, nous obtenons une équation transcendante pour déterminer le spectre d'énergie. Dans le cinquième paragraphe nous discutons succinctement plusieurs cas particuliers. Le dernier paragraphe est une conclusion.

## 2.2 Fonction de Green

Le propagateur associé à une particule de masse  $\mu$  qui se déplace dans le potentiel à symétrie sphérique (2.2) peut se développer en ondes partielles ainsi [35] :

$$K(\vec{r}'' , \vec{r}' ; T) = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} K_l(r'' , r' ; T) P_l\left(\frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'}\right), \quad (2.16)$$

où  $P_l\left(\frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'}\right)$  est un polynôme de Legendre de degré  $l$  en  $\vec{r}'' \cdot \vec{r}' / r'' r' = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\varphi'' - \varphi')$ , et  $K_l(r'' , r' ; T)$  est le propagateur radial exprimé en terme de l'intégrale de chemin radial comme suit

$$\begin{aligned} K_l(r'' , r' ; T) &= \int Dr(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[ \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - V_q(r) - \frac{\hbar^2 \alpha^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] dt \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left[ \frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left[ \int dr_j \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right\}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

avec l'action élémentaire radiale définie par :

$$S(j, j-1) = \frac{\mu}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - \frac{\varepsilon l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_j r_{j-1}} - \varepsilon \left( D[\delta - \sigma \coth_q(\alpha r_j)]^2 \right). \quad (2.18)$$

Ici, nous avons adopté les notations habituelles :  $r_j = r(t_j)$ ,  $\Delta r_j = r_j - r_{j-1}$ ,  $\varepsilon = t_j - t_{j-1} = \frac{T}{N}$ ,  $t' = t_0$ ,  $t'' = t_N$ ,  $T = t'' - t'$  et  $N$  est le nombre d'intervalles élémentaires égaux.

Nous considérons maintenant la fonction de Green radiale, ou transformée de Fourier du propagateur radial (2.17) définie par

$$G_l(r'' , r' ; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K_l(r'' , r' ; T). \quad (2.19)$$

dont l'évaluation permet d'extraire les niveaux d'énergie  $E_{n_r, l}$  à partir de ses pôles et les fonctions d'onde radiales correspondantes  $\Psi_{n_r, l}(r) = r^{-1}R_{n_r, l}(r)$  à partir de ses résidus. La fonction de Green (2.19) dépend du paramètre réel de déformation  $q$ . De plus, elle n'admet pas de solutions exactes pour les états avec un nombre quantique orbital  $l > 0$  à cause du terme centrifuge contenu dans l'expression de l'action (2.18). Pour surmonter cette difficulté, nous utilisons l'expression  $\alpha^2 \left( \frac{1}{3} + \frac{q}{\sinh_q^2(\alpha r)} \right)$  comme une bonne approximation du terme centrifuge en  $\frac{1}{r^2}$  lorsque  $q \geq 1$  et  $\alpha r \ll 1$ .

Dans ce qui suit nous allons calculer la fonction de Green radiale (2.19) en distinguant trois cas selon les valeurs du paramètre  $q$ .

## 2.3 Potentiel de Schiöberg déformé pour $q > 0$

Nous avons deux situations différentes pour le potentiel (2.2). Lorsque  $0 < q < 1$ , le potentiel (2.2) est continu sur tout l'intervalle  $\mathbb{R}^+$ , mais, quand  $q \geq 1$ , il a une forte singularité au point  $r = r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln q$ , et dans ce cas, il y a deux régions distinctes, la première est représentée par l'intervalle  $]0, r_0[$  et la deuxième par l'intervalle  $]r_0, \infty[$ . Ceci nous conduit à construire la fonction de Green radiale par l'intégrale de chemin dans chaque cas.

### 2.3.1 Premier cas : $q \geq 1$ et $r_0 < r < \infty$

Dans ce cas, nous allons traiter l'intégrale de chemin associée au potentiel (2.2) seulement dans l'intervalle  $]r_0, \infty[$  car, dans l'autre intervalle, la solution ne peut pas être obtenue analytiquement. De plus, elle est sans intérêt physique. Notons ici que la singularité au point  $r = r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln q$  peut être éliminée facilement par l'introduction d'une fonction régulatrice appropriée [21] dans l'intégrale de chemin représentant le propagateur. Mais comme cette singularité n'influe pas sur le résultat final nous pouvons l'ignorer. Pour calculer la fonction de Green radiale (2.19) pour un état de moment cinétique orbital  $l$ , nous adoptons l'approximation suivante

$$\frac{1}{r^2} \approx \alpha^2 \left( \frac{1}{3} + \frac{q}{\sinh_q^2(\alpha r)} \right), \quad (2.20)$$



valable pour  $\alpha r \ll 1$ . Dans ce cas, le propagateur (2.17) s'écrit

$$K_l(r'', r'; T) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[ D(\delta^2 + \sigma^2) + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{6\mu} l(l+1) \right] \right\} P(r'', r'; T), \quad (2.21)$$

où le noyau  $P(r'', r'; T)$  est défini par

$$P(r'', r'; T) = \int Dr(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[ \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 + 2D\sigma\delta \coth_q(\alpha r) - \frac{\left( D\sigma^2 q + \frac{\hbar^2 \alpha^2 q}{2\mu} l(l+1) \right)}{\sinh_q^2(\alpha r)} \right] dt \right\}. \quad (2.22)$$

Avec le changement de variable  $r = \frac{1}{\alpha} (u + \frac{1}{2} \ln q)$  et la transformation temporelle  $S = \frac{T}{\alpha^2}$  ou  $ds = \frac{dt}{\alpha^2}$ , la fonction de Green radiale (2.19), pour les états  $l$ , se met sous la forme :

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{1}{\alpha} G_{MR}^l(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_l), \quad (2.23)$$

où

$$G_{MR}^l(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_l) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp \left( \frac{i}{\hbar} \tilde{\varepsilon}_l T \right) P_{MR}^l(u'', u'; S), \quad (2.24)$$

avec

$$P_{MR}^l(u'', u'; S) = \int Du(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left[ \frac{\mu}{2} \dot{u}^2 - V_{MR}^l(u) \right] ds \right\}, \quad (2.25)$$

dans lequel

$$V_{MR}^l(u) = -A \coth u + \frac{B_l}{q \sinh^2 u}; u \in \mathbb{R}^+ \quad (2.26)$$

est le potentiel standard de Manning-Rosen [49]

Ici, nous avons utilisé les notations suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\varepsilon}_l = \frac{1}{\alpha^2} \left[ E - D(\delta^2 + \sigma^2) + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{6\mu} l(l+1) \right], \\ A = \frac{2D\sigma\delta}{\alpha^2}, \\ B_l = \frac{\left( D\sigma^2 q + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} q l(l+1) \right)}{\alpha^2}. \end{array} \right. \quad (2.27)$$

Comme la solution par l'intégrale de chemin du propagateur (2.25) est connue dans la littérature [50], la fonction de Green a la forme suivante :

$$\begin{aligned}
G_{MR}^l(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_l) &= \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{2}{1 + \coth u'} \frac{2}{1 + \coth u''} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\
&\times \left( \frac{\coth u' - 1}{\coth u' + 1} \frac{\coth u'' - 1}{\coth u'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1; M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth u_{>} - 1}{\coth u_{>} + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1; M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{\coth u_{<} + 1} \right),
\end{aligned} \tag{2.28}$$

où  $u_{>}$  et  $u_{<}$  désignent le  $\max(u'', u')$  et le  $\min(u'', u')$  respectivement.  ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, z)$  est la fonction hypergéométrique, les paramètres  $L_E$ ,  $M_1$  et  $M_2$  ont dans le cas actuel les valeurs suivantes :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\hbar} \sqrt{2\mu \left( \frac{2D\sigma\delta}{\alpha^2} - \tilde{\varepsilon}_l \right)}, \\ M_{1,2} = \sqrt{\frac{2\mu D\sigma^2}{\hbar^2 \alpha^2} + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2} \pm \frac{1}{2\hbar} \sqrt{-2\mu \left( \frac{2D\sigma\delta}{\alpha^2} + \tilde{\varepsilon}_l \right)}, \end{cases} \tag{2.29}$$

Finalement, la fonction de Green radiale  $G_l(r'', r'; E)$  relative au potentiel de Schiöberg déformé (2.2), pour  $q \geq 1$  et dans l'intervalle  $]r_0, \infty[$  s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r'; E) &= \frac{\mu}{\hbar^2 \alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{2}{1 + \coth_q(\alpha r')} \frac{2}{1 + \coth_q(\alpha r'')} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\
&\times \left( \frac{\coth_q(\alpha r') - 1}{\coth_q(\alpha r') + 1} \frac{\coth_q(\alpha r'') - 1}{\coth_q(\alpha r'') + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1; M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth_q(\alpha r_{>}) - 1}{\coth_q(\alpha r_{>}) + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1; M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{\coth_q(\alpha r_{<}) + 1} \right).
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Le spectre d'énergie des états liés de la particule est déterminé à partir des pôles de la fonction de Green radiale (2.30). Ce sont des pôles de la fonction  $\Gamma(M_1 - L_E)$  qui se trouvent lorsque

$$M_1 - L_E = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \tag{2.31}$$

En tenant compte des relations (2.29), les niveaux d'énergie sont alors donnés par

$$E_{n_r, l} = -\frac{2\hbar^2 \alpha^2}{\mu} \left[ \frac{[(n_r + \nu_l)^2 - 4K\sigma\delta]^2}{4(n_r + \nu_l)^2} - K(\delta - \sigma)^2 \right] + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{6\mu} l(l+1), \tag{2.32}$$

avec

$$\nu_l = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{16K\sigma^2 + (2l+1)^2}; \quad K = \frac{\mu D}{2\hbar^2 \alpha^2}. \tag{2.33}$$

Ainsi le spectre d'énergie est indépendant du paramètre de déformation  $q$ . C'est une conséquence de l'invariance de forme du potentiel (2.2) lorsque  $q \geq 1$ . La Figure 2.3.1 montre clairement que les courbes de la fonction potentielle représentées pour différentes valeurs de  $q \geq 1$  ont la même allure.

Pour trouver les fonctions d'onde normalisées correspondantes aux états liés avec un nombre quantique orbital  $l$ , nous effectuons l'approximation de la fonction d'Euler  $\Gamma(M_1 - L_E)$  au

voisinage des pôles (2.31) ainsi

$$\begin{aligned}\Gamma(M_1 - L_E) &\approx -\frac{(-1)^{n_r}}{n!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n!} \frac{4\alpha\beta_{n_r,l}(n_r + \beta_{n_r,l} + \nu_l)}{(n_r + \nu_l)(E - E_{n_r,l})},\end{aligned}\quad (2.34)$$

où

$$\beta_{n_r,l} = \frac{4K\sigma\delta - (n_r + \nu_l)^2}{2(n_r + \nu_l)},\quad (2.35)$$

et à l'aide de la formule de transformation de Gauss ( voir Ref. [51], p. 1043, Eq. (9.131.2))

$$\begin{aligned}{}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b; a+b-c+1; 1-z) + (1-z)^{c-a-b} \\ &\quad \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b; c-a-b+1; 1-z),\end{aligned}\quad (2.36)$$

où le deuxième terme est nul du fait que la fonction d'Euler  $\Gamma(a)$  contenue dans le dénominateur est infinie ( $a = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$ ), nous obtenons finalement la décomposition spectrale de la fonction de Green radiale (2.30) ainsi

$$G_l(r'', r'; E) = \sum_{n_r=0}^{n_r \max} \frac{R_{n_r,l}^{q \geq 1*}(r') R_{n_r,l}^{q \geq 1}(r'')}{E_{n_r,l} - E},\quad (2.37)$$

avec la fonction d'onde radiale réduite donnée par

$$\begin{aligned}R_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = N_{n_r,l} (qe^{-2\alpha r})^{\beta_{n_r,l}} (1 - qe^{-2\alpha r})^{\nu_l} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + 2\beta_{n_r,l} + 2\nu_l; 2\beta_{n_r,l} + 1; qe^{-2\alpha r}\right).\end{aligned}\quad (2.38)$$

La constante de normalisation  $N_{n_r,l}$  est égale à

$$N_{n_{r,l}} = \frac{2}{\Gamma(2\beta_{n_{r,l}} + 1)} \left[ \frac{\alpha\beta_{n_{r,l}} (n_r + \beta_{n_{r,l}} + \nu_l) \Gamma(n_r + 2\beta_{n_{r,l}} + 1) \Gamma(n_r + 2\beta_{n_{r,l}} + 2\nu_l)}{(n_r + \nu_l) n_r! \Gamma(n_r + 2\nu_l)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.39)$$

En employant le lien entre les polynômes de Jacobi et les fonctions hypergéométriques (voir Ref. [51], Eq. (8.406.1), p. 952)

$$P_n^{(a,b)}(x) = \frac{\Gamma(a+n+1)}{n! \Gamma(a+1)} \times {}_2F_1\left(-n, a+b+n+1; a+1; \frac{1-x}{2}\right), \quad (2.40)$$

les fonctions d'onde (2.38) s'écrivent en termes des polynômes de Jacobi comme suit

$$R_{n_{r,l}}^{q \geq 1}(r) = r \Psi_{n_{r,l}}^{q \geq 1}(r) = \left[ \frac{4\alpha\beta_{n_{r,l}} (n_r + \beta_{n_{r,l}} + \nu_l)}{(n_r + \nu_l)} \frac{n_r! \Gamma(n_r + 2\beta_{n_{r,l}} + 2\nu_l)}{\Gamma(n_r + 2\nu_l) \Gamma(n_r + 2\beta_{n_{r,l}} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ (qe^{-2\alpha r})^{\beta_{n_{r,l}}} (1 - qe^{-2\alpha r})^{\nu_l} P_l^{(2\beta_{n_{r,l}}, 2\nu_l - 1)}(1 - 2qe^{-2\alpha r}). \quad (2.41)$$

Maintenant, nous devons vérifier que les fonctions d'onde radiales (2.38) satisfont les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} R_{n_{r,l}}^{q \geq 1}(r) = 0, \quad (2.42)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{n_{r,l}}(r) = 0. \quad (2.43)$$

Quand  $r \rightarrow r_0$ , il est clair que (2.38) remplit la condition d'Hermiticité (2.42) de l'opérateur  $P_r$  associé à la composante radiale de la quantité de mouvement. Cependant, quand  $r \rightarrow \infty$ , nous devons imposer la restriction que seules les fonctions d'onde radiales (2.38) avec  $\beta_{n_{r,l}} \geq 0$  remplissent la condition (2.43). Par conséquent le nombre de niveaux discret est égal à  $n_{\max}$  satisfaisant à l'inégalité

$$n_{\max} < 2\sqrt{K\sigma\delta} - \nu_l. \quad (2.44)$$

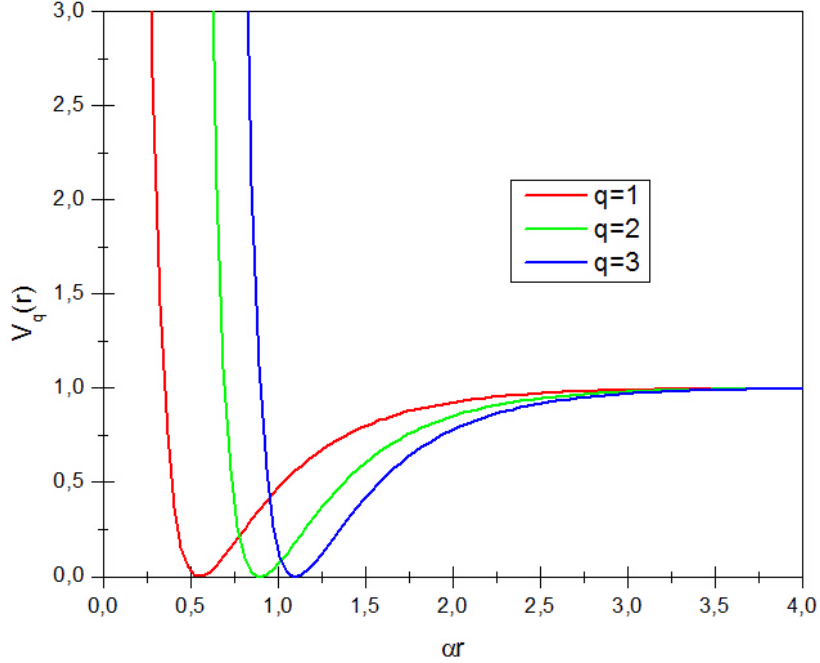


Fig. 2.3.1 : Allure du potentiel de Schiöberg déformé avec  $D = 1$ ,  $\delta = 2$  et  $\sigma = 1$  pour différentes valeurs de  $q \geq 1$ .

### 2.3.2 Deuxième cas : $0 < q < 1$ et $0 < r < \infty$

Dans ce cas, le changement de variable précédent défini par  $r = \frac{1}{\alpha} \left( u + \frac{1}{2} \ln q \right)$  transforme  $r \in \mathbb{R}^+$  en  $u \in ]-\frac{1}{2} \ln q, +\infty[$ . Le noyau (2.25), pour  $l = 0$ , est le propagateur pour une particule en mouvement dans un potentiel de type Rosen-Morse sur le demi-axe  $u > u_0 = -\frac{1}{2} \ln q$ . Comme un calcul direct du propagateur via l'intégrale de chemin est impossible, Pour pouvoir surmonter cette difficulté formelle, nous utilisons une astuce basée sur l'introduction d'un terme supplémentaire représenté par une fonction  $\delta$  de Dirac dans l'action contenue dans (2.25) pour créer un mur infranchissable [36] au point  $u = u_0 = -\frac{1}{2} \ln q$ . Alors, la fonction de Green (2.24), pour  $l = 0$ , prend la forme suivante :

$$G_{MR}^\delta(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{\varepsilon}_0 S\right) P_{MR}^\delta(u'', u'; S), \quad (2.45)$$

où

$$P_{MR}^\delta(y'', y'; S) = \int Dy(s) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^S \left[\frac{\mu}{2} \dot{u}^2 - V^\delta(u)\right] ds\right\}. \quad (2.46)$$

L'intégrale de chemin (2.46) est le propagateur associé à une particule placée dans un potentiel de la forme :

$$V^\delta(u) = V_{MR}^0(u) - \eta \delta(u - u_0); \quad u \in \mathbb{R}. \quad (2.47)$$

où  $V_{MR}^0(u)$  est donné par l'expression (2.26) avec  $l = 0$ . Pour les mêmes raisons, un calcul similaire à celui du chapitre 1 en utilisant l'approche des perturbations, nous permet d'écrire la fonction de Green (2.45) ainsi

$$G_{MR}^\delta(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0) = G_{MR}^0(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0) - \frac{G_{MR}^0(u'', u_0; \tilde{\varepsilon}_0) G_{MR}^0(u_0, u'; \tilde{\varepsilon}_0)}{G_{MR}^0(u_0, u_0; \tilde{\varepsilon}_0) - \frac{1}{\eta}}. \quad (2.48)$$

où  $G_{MR}^0(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0)$  est la fonction de Green (2.28) associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ).

En prenant la limite  $\eta \rightarrow -\infty$ , la particule est contrainte de se mouvoir dans le potentiel  $V_{MR}^0(u)$  borné par une barrière de potentiel infiniment répulsive [7, 36] localisée au point  $u = u_0$ . Dans ce cas, la fonction de Green radiale, pour  $l = 0$ , s'écrit

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{1}{\alpha} \tilde{G}_{MR}^0(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0), \quad (2.49)$$

où la fonction de Green  $\tilde{G}_{MR}^0(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0)$  est donnée par :

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{MR}^0(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0) &= \lim_{\eta \rightarrow -\infty} G_{MR}^\delta(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0) \\ &= G_{MR}^0(u'', u'; \tilde{\varepsilon}_0) - \frac{G_{MR}^0(u'', u_0; \tilde{\varepsilon}_0) G_{MR}^0(u_0, u'; \tilde{\varepsilon}_0)}{G_{MR}^0(u_0, u_0; \tilde{\varepsilon}_0)}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Les niveaux d'énergie sont obtenus à partir des pôles de l'équation (2.50), c'est à dire

$G_{MR}^0(u_0, u_0; \tilde{\varepsilon}_0) = 0$ , ou par la condition de quantification suivante :

$${}_2F_1(\xi_{n_r} - \omega_{n_r} + \nu_0, \xi_{n_r} + \omega_{n_r} + \nu_0; 2\xi_{n_r} + 1; q) = 0, \quad (2.51)$$

où

$$\begin{cases} \nu_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{16K\sigma^2 + 1}, \\ \xi_{n_r} = \sqrt{\frac{\mu}{2\hbar^2\alpha^2}} \left( \sqrt{D(\delta - \sigma)^2 - E_{n_r}} \right), \\ \omega_{n_r} = \sqrt{\frac{\mu}{2\hbar^2\alpha^2}} \left( \sqrt{D(\delta + \sigma)^2 - E_{n_r}} \right). \end{cases} \quad (2.52)$$

L'équation transcendante (2.51) peut se résoudre numériquement pour connaître les niveaux d'énergie discrets de la particule. De plus, elle dépend du paramètre de déformation  $q$  ( $0 < q < 1$ ). Ce paramètre affecte le nombre des états liés comme nous pouvons le voir sur la Figure 2.3.2.

En utilisant le lien entre (2.49) et (2.50), la formule de transformation de Gauss (2.36), nous montrons que les fonctions d'onde correspondantes aux états liés et satisfaisant aux conditions aux limites  $R_{n,0}^{0 < q < 1}(0) = 0$  et  $R_{n,0}^{0 < q < 1}(+\infty) = 0$  s'écrivent ainsi :

$$\begin{aligned} R_{n_r,0}^{0 < q < 1}(r) &= r \Psi_{n_r,0}^{0 < q < 1}(r) = C (1 - qe^{-2\alpha r})^{\nu_0} (qe^{-2\alpha r})^{\xi_{n_r}} \\ &\quad \times {}_2F_1(\xi_{n_r} - \omega_{n_r} + \nu_0, \xi_{n_r} + \omega_{n_r} + \nu_0; 2\xi_{n_r} + 1; qe^{-2\alpha r}). \end{aligned} \quad (2.53)$$

où  $C$  est un facteur constant.



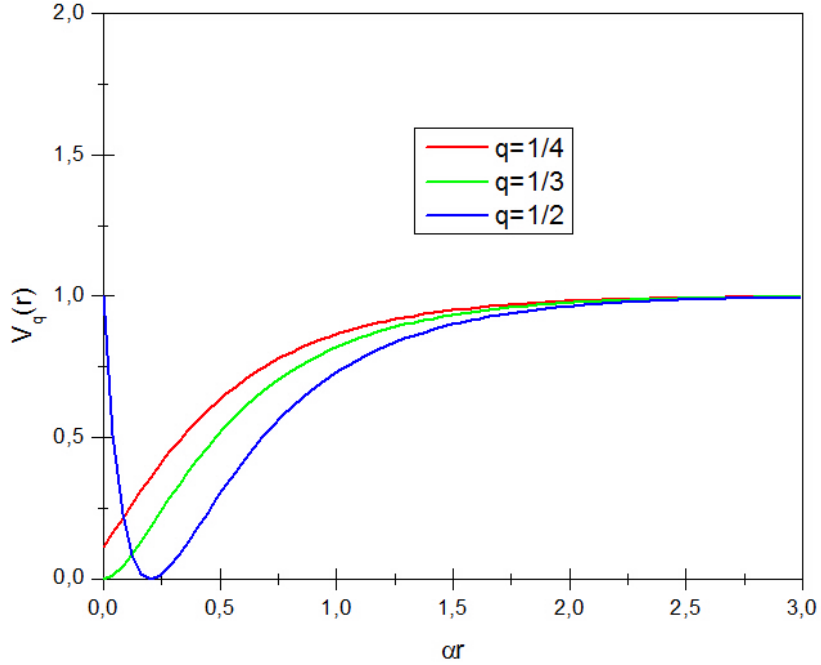


Fig. 2.3.2 : Allure du potentiel de Schiöberg déformé avec les paramètres  $D = 1$ ,  $\delta = 2$  et  $\sigma = 1$  pour différentes valeurs de  $q$  contenues dans l'intervalle  $0 < q < 1$ .

## 2.4 Potentiel de Schiöberg déformé pour $q < 0$

Lorsque  $q < 0$ , le potentiel (2.2) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$V_q(r) = D [\delta - \sigma \tanh_{|q|}(\alpha r)]^2. \quad (2.54)$$

qui est définie dans l'intervalle  $\mathbb{R}^+$ . Afin d'exprimer l'intégrale de chemin (2.19), pour  $l = 0$ , sous une forme résoluble, nous suivons une procédure semblable à celle exposée dans le paragraphe précédent. Nous utilisons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in ]0, +\infty[ \rightarrow y \in \left] -\frac{1}{2} \ln |q|, +\infty \right[ , \quad (2.55)$$

définie par

$$r = \frac{1}{\alpha} \left( y + \frac{1}{2} \ln |q| \right), \quad (2.56)$$

accompagnée du redimensionnement de l'intervalle de temps  $T$  en  $S' = \frac{T}{\alpha^2}$  (ou  $ds' = \frac{dt}{\alpha^2}$ ). Comme résultat de ces transformations, la fonction de Green radiale (2.19), pour les ondes  $s$  ( $l = 0$ ), prend la forme

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{1}{\alpha} \tilde{G}_{RM}^0(y'', y'; \tilde{\epsilon}_0), \quad (2.57)$$

où

$$\tilde{G}_{RM}^0(y'', y'; \tilde{\epsilon}_0) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty ds' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{\epsilon}_0 S'\right) P_{RM}^0(y'', y'; S'), \quad (2.58)$$

avec

$$P_{RM}^0(y'', y'; S') = \int Dy(s') \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{S'} \left[ \frac{\mu}{2} \dot{y}^2 - \tilde{A} \tanh y + \frac{\tilde{B}}{|q| \cosh^2 y} \right] ds' \right\}, \quad (2.59)$$

Les paramètres  $\tilde{A}$  et  $\tilde{B}$  sont donnés par

$$\begin{cases} \tilde{A} = \frac{-2D\sigma\delta}{\alpha^2}, \\ \tilde{B} = \frac{D\sigma^2|q|}{\alpha^2}. \end{cases} \quad (2.60)$$

Le propagateur (2.59) a une forme semblable à celle de l'intégrale de chemin associée au potentiel  $V_{RM}(y)$  introduit pour la première fois par Rosen et Morse [12]. Le potentiel de Rosen et Morse est défini pour  $y \in \mathbb{R}$ , mais, dans notre cas, nous avons converti l'intégrale de chemin pour le potentiel radial (2.54) en une intégrale de chemin pour le potentiel standard de Rosen et Morse à travers la transformation  $r \rightarrow r(y)$  qui consiste à changer  $r \in \mathbb{R}^+$  en  $y \in \left] -\frac{1}{2} \ln |q|, +\infty \right[$ . Donc, nous sommes dans une situation où le mouvement de la particule a lieu dans le demi-espace  $y > -\frac{1}{2} \ln |q|$ . Par conséquent, suivant la stratégie développée dans le

premier chapitre, nous obtenons

$$\tilde{G}_{RM}^0(y'', y'; \tilde{\varepsilon}_0) = G_{RM}^0(y'', y'; \tilde{\varepsilon}_0) - \frac{G_{RM}^0(y'', y_0; \tilde{\varepsilon}_0) G_{RM}^0(y_0, y'; \tilde{\varepsilon}_0)}{G_{RM}^0(y_0, y_0; \tilde{\varepsilon}_0)}. \quad (2.61)$$

où  $G_{RM}^0(y, y; \tilde{\varepsilon}_0)$  est la fonction de Green associée au potentiel de Rosen-Morse [12] défini par

$$V_{RM}(y) = \tilde{A} \tanh y - \frac{\tilde{B}}{|q| \cosh^2 y}; \quad y \in \mathbb{R}. \quad (2.62)$$

Comme sa solution via l'intégrale de chemin est bien connue dans la littérature [50], la fonction de Green a pour expression

$$\begin{aligned} G_{RM}^0(y'', y'; \tilde{\varepsilon}_0) &= \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\times \left( \frac{1 - \tanh y'}{2} \frac{1 - \tanh y''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\ &\times \left( \frac{1 + \tanh y'}{2} \frac{1 + \tanh y''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1; M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh y_{>}}{2} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1; M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh y_{<}}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.63)$$

avec les notations :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu D \sigma^2}{\hbar^2 \alpha^2} + 1}, \\ M_{1,2} = \sqrt{\frac{\mu}{2\hbar^2}} \left( \sqrt{\frac{-2\sigma D \delta}{\alpha^2} - \tilde{\varepsilon}_0} \pm \sqrt{\frac{2\sigma D \delta}{\alpha^2} - \tilde{\varepsilon}_0} \right), \\ \tilde{\varepsilon}_0 = \frac{1}{\alpha^2} [E - D(\delta^2 + \sigma^2)]. \end{array} \right. \quad (2.64)$$

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

Les niveaux d'énergie sont donnés par les pôles de la fonction de Green (2.61), c'est à dire par l'équation :  $G_{RM}^0(x_0, x_0; \tilde{\varepsilon}_0) = 0$ . Ce qui nous conduit à une équation transcendante représentant les niveaux d'énergie discrets de la particule

$${}_2F_1\left(\xi_{n_r} + \omega_{n_r} - \nu_0 + 1, \xi_{n_r} + \omega_{n_r} + \nu_0; 2\xi_{n_r} + 1; \frac{|q|}{1 + |q|}\right) = 0, \quad (2.65)$$

qu'il faut résoudre numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie. De plus, elle dépend du paramètre de déformation  $q$  ( $q < 0$ ), dont l'influence sur le nombre des états liés peut se voir sur la Figure 2.4.

À partir de l'expression de la fonction de Green (2.61) relative au potentiel de Rosen et Morse, et en utilisant le lien entre (2.57) et (2.63), nous obtenons les fonctions d'onde correspondantes aux états liés

$$\begin{aligned} R_{n_r,0}^{q<0}(r) &= r \Psi_{n_r,0}^{q<0}(r) = \tilde{N} \left( \frac{|q|}{e^{2\alpha r} + |q|} \right)^{\xi_{n_r}} \left( \frac{1}{1 + |q| e^{-2\alpha r}} \right)^{\omega_{n_r}} \\ &\times {}_2F_1\left(\xi_{n_r} + \omega_{n_r} - \nu_0 + 1, \xi_{n_r} + \omega_{n_r} + \nu_0; 2\xi_{n_r} + 1; \frac{|q|}{e^{2\alpha r} + |q|}\right), \end{aligned} \quad (2.66)$$

où  $\tilde{N}$  est un facteur constant. Notons que ces solutions vérifient bien les conditions aux limites :  $R_{n,0}^{q<0}(0) = R_{n,0}^{q<0}(+\infty) = 0$ .

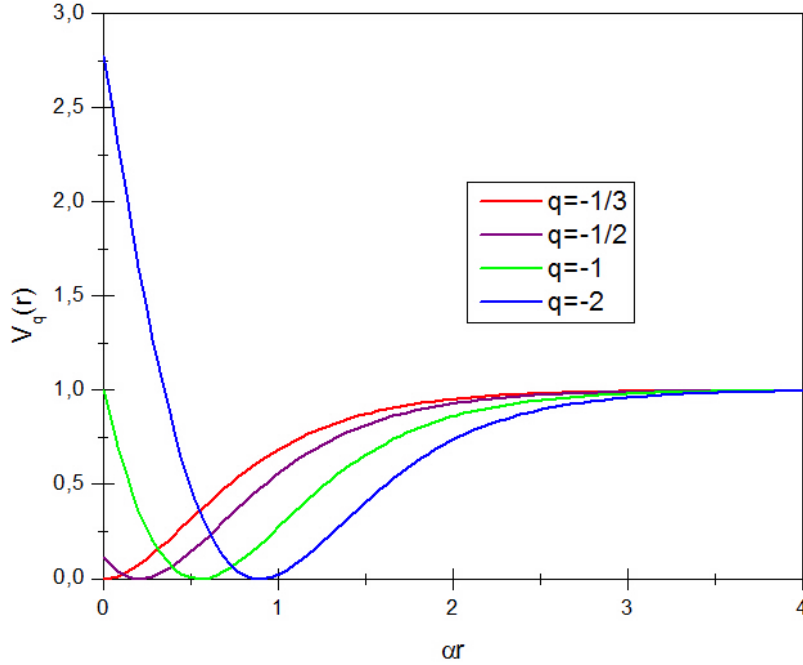


Fig. 2.4 : Allure du potentiel de Schiöberg déformé avec les paramètres  $D = 1$ ,  $\delta = 1$  et  $\sigma = 2$  pour différentes valeurs de  $q$  négatives.

## 2.5 Cas particuliers

### 2.5.1 Premier cas : $q = 1$ et $l \neq 0$

En prenant  $q = 1$ , le potentiel (2.2) et l'expression de l'approximation du terme centrifuge (2.20) deviennent, respectivement,

$$V_1(r) = D [\delta - \sigma \coth(\alpha r)]^2, \quad (2.67)$$

et

$$\frac{1}{r^2} \approx \alpha^2 \left( \frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)} \right). \quad (2.68)$$

Nous notons ici que le potentiel (2.67) a la même forme que le potentiel  $V_+(r)$  analysé dans les références [41, 42, 43].

Dans ce cas, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits à partir des équations (2.32) et (2.38) respectivement

$$E_{n_r, l} = -\frac{2\hbar^2\alpha^2}{\mu} \left[ \frac{[(n_r + \nu_l)^2 - 4K\sigma\delta]^2}{4(n_r + \nu_l)^2} - K(\delta - \sigma)^2 \right] + \frac{\hbar^2\alpha^2}{6\mu} l(l+1), \quad (2.69)$$

et

$$\begin{aligned} R_{n_r, l}^{q=1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q=1}(r) = N_{n_r, l} (e^{-2\alpha r})^{\beta_{n_r, l}} (1 - e^{-2\alpha r})^{\nu_l} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + 2\beta_{n_r, l} + 2\nu_l; 2\beta_{n_r, l} + 1; e^{-2\alpha r}\right), \end{aligned} \quad (2.70)$$

avec

$$N_{n_r, l} = \frac{2}{\Gamma(2\beta_{n_r, l} + 1)} \left[ \frac{\alpha\beta_{n_r, l} (n_r + \beta_{n_r, l} + \nu_l)}{(n_r + \nu_l)} \frac{\Gamma(n_r + 2\beta_{n_r, l} + 1) \Gamma(n_r + 2\beta_{n_r, l} + 2\nu_l)}{n_r! \Gamma(n_r + 2\nu_l)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.71)$$

### 2.5.2 Deuxième cas : $q = 1$ et $l = 0$

En posant  $q = 1$  et  $l = 0$ , le potentiel (2.2) se réduit à

$$V_1(r) = D[\delta - \sigma \coth(\alpha r)]^2, \quad (2.72)$$

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états  $s$  ( $l = 0$ ) sont alors

$$E_{n_r,0} = -\frac{2\hbar^2\alpha^2}{\mu} \left[ \frac{[(n_r + \nu_0)^2 - 4K\sigma\delta]^2}{4(n_r + \nu_0)^2} - K(\delta - \sigma)^2 \right], \quad (2.73)$$

et

$$\begin{aligned} R_{n_r,0}^{q=1}(r) &= r \Psi_{n_r,0}^{q=1}(r) = N_{n_r,0} (e^{-2\alpha r})^{\beta_{n_r,0}} (1 - e^{-2\alpha r})^{\nu_0} \\ &\times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + 2\beta_{n_r,0} + 2\nu_0; 2\beta_{n_r,0} + 1; e^{-2\alpha r}\right), \end{aligned} \quad (2.74)$$

où la constante de normalisation  $N_{n_r,0}$  est donnée par

$$N_{n_r,0} = \frac{2}{\Gamma(2\beta_{n_r,0} + 1)} \left[ \frac{\alpha\beta_{n_r,0} (n_r + \beta_{n_r,0} + \nu_0) \Gamma(n_r + 2\beta_{n_r,0} + 1) \Gamma(n_r + 2\beta_{n_r,0} + 2\nu_0)}{(n_r + \nu_0) n_r! \Gamma(n_r + 2\nu_0)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.75)$$

Ces résultats coïncident avec ceux obtenus dans les références [41, 42, 43], à l'exception de la constante de normalisation dans les références [41, 42].

### 2.5.3 Troisième cas : $q = 1$ et $\delta = 1$

Pour  $q = 1$  et  $\delta = 1$ , le potentiel (2.2) et l'expression de l'approximation du terme centrifuge (2.20) s'écrivent

$$V^{hyp}(r) = D [1 - \sigma \coth(\alpha r)]^2, \quad (2.76)$$

et

$$\frac{1}{r^2} \approx \alpha^2 \left( \frac{1}{3} + \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)} \right). \quad (2.77)$$

Il faut signaler que le potentiel hyperbolique (2.76) a été traité par plusieurs auteurs à l'aide de différentes méthodes [52, 53, 54, 55, 56, 57, 58].

Dans ce cas, d'après l'équation (2.32), nous avons pour l'énergie

$$E_{n_r,l}^{hyp} = -\frac{2\hbar^2\alpha^2}{\mu} \left[ \frac{[(n_r + \nu_l)^2 - 4K\sigma]^2}{4(n_r + \nu_l)^2} - K(\delta - 1)^2 \right] + \frac{\hbar^2\alpha^2}{6\mu} l(l+1), \quad (2.78)$$

et à partir de l'équation (2.38), nous avons pour les fonctions d'onde

$$\begin{aligned} R_{n_r,l}^{hyp}(r) &= r \Psi_{n_r,l}^{hyp}(r) = N_{n_r,l} (e^{-2\alpha r})^{\beta'_{n_r,l}} (1 - e^{-2\alpha r})^{\nu_l} \\ &\times {}_2F_1\left(-n_r, n_r + 2\beta'_{n_r,l} + 2\nu_l; 2\beta'_{n_r,l} + 1; e^{-2\alpha r}\right), \end{aligned} \quad (2.79)$$

où le coefficient de normalisation est donné par

$$N_{n_r,l} = \frac{2}{\Gamma(2\beta'_{n_r,l} + 1)} \left[ \frac{\alpha\beta'_{n_r,l} (n_r + \beta'_{n_r,l} + \nu_l) \Gamma(n_r + 2\beta'_{n_r,l} + 1) \Gamma(n_r + 2\beta'_{n_r,l} + 2\nu_l)}{(n_r + \nu_l) n_r! \Gamma(n_r + 2\nu_l)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.80)$$

avec

$$\beta'_{n_r,l} = \frac{4K\sigma - (n_r + \nu_l)^2}{2(n_r + \nu_l)}. \quad (2.81)$$

Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus par la résolution de l'équation de Schrödinger [54] et via l'approche des intégrales de chemin [57].

#### 2.5.4 Quatrième cas : $q = -1$

En posant  $q = -1$ , le potentiel (2.54) se réduit

$$V_{-1}(r) = D [\delta - \sigma \tanh(\alpha r)]^2 \quad (2.82)$$

Ce potentiel a la même forme que le potentiel  $V_-(r)$  étudié dans les références [41, 42, 43].

Dans ce cas d'après l'équation (2.65), les niveaux d'énergie sont définis par la condition de quantification suivante :



$${}_2F_1\left(\xi_{n_r} + \omega_{n_r} - \nu_0 + 1, \xi_{n_r} + \omega_{n_r} + \nu_0; 2\xi_{n_r} + 1; \frac{1}{2}\right) = 0, \quad (2.83)$$

et les fonctions d'onde s'obtiennent à partir de l'équation (2.66) ainsi :

$$\begin{aligned} R_{n_r,0}^{q=-1}(r) &= r \Psi_{n_r,0}^{q=-1}(r) = \tilde{N} \left(\frac{1}{e^{2\alpha r} + 1}\right)^{\xi_{n_r}} \left(\frac{1}{1 + e^{-2\alpha r}}\right)^{\omega_{n_r}} \\ &\times {}_2F_1\left(\xi_{n_r} + \omega_{n_r} - \nu_0 + 1, \xi_{n_r} + \omega_{n_r} + \nu_0; 2\xi_{n_r} + 1; \frac{1}{e^{2\alpha r} + 1}\right), \end{aligned} \quad (2.84)$$

où  $\tilde{N}$  est un facteur constant. Notons que ces résultats prouvent que ceux obtenus dans les références [41, 42, 43] sont incorrects.

## 2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé l'approche de l'intégrale de chemin de Feynman pour résoudre le problème d'une particule non relativiste soumise au potentiel de Schiöberg déformé. Ce problème admet des solutions distinctes pour les différentes branches du potentiel. Pour  $q \geq 1$  et  $r \in ]\frac{1}{2\alpha} \ln q, +\infty[$  le paramètre  $q$  n'affecte pas les niveaux d'énergie, mais décale horizontalement les courbes représentant les fonctions d'onde. Lorsque  $0 < q < 1$  ou  $q < 0$ , le spectre d'énergie est défini par une équation transcendante comprenant une fonction hypergéométrique qui dépend de  $q$ .

De plus, plusieurs cas particuliers sont considérés. Dans ces cas, les résultats obtenus sont en accord avec ceux de la littérature à l'exception de celui pour lequel  $q = -1$ .

## Chapitre 3

# Mouvement d'une particule de Dirac dans un potentiel vecteur du type Hulthén déformé

### 3.1 Introduction

Le potentiel de Hulthén a été abondamment utilisé comme une approximation du potentiel d'interaction entre deux corps dans de nombreuses branches de la physique, entre autres la physique des particules et nucléaire [59], la physique atomique [60] et la physique moléculaire [61] et également en chimie quantique [62]. Il appartient à la classe importante de potentiels du type exponentiel. Il se comporte comme un potentiel de Coulomb pour les petites valeurs de  $r$  et diminue exponentiellement pour les grandes valeurs de  $r$ . Il y a plusieurs études dans lesquelles différentes techniques telles que la méthode standard basée sur l'équation de Schrödinger [63, 64], la supersymétrie en mécanique quantique [65, 66] et la méthode d'itération asymptotique [67] ont été employées pour obtenir des solutions exactes ou approximatives de l'équation d'onde avec le potentiel de Hulthén pour les ondes  $s$  et  $l$  dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste. En outre, un traitement par l'intégrale de chemin de ce potentiel a été donné dans [68].

Cependant, en présence d'un champs fort, les effets relativistes sur une particule sous l'in-

fluence de ce potentiel pouvaient devenir appréciables. L'équation de Dirac avec un potentiel de Hulthén particulier a été prétendue exactement résoluble en utilisant une contrainte [69, 70]. Plus tard, les solutions des états liés et des états de diffusion de l'équation de Dirac avec un potentiel de Hulthén standard pour les ondes  $\kappa$  ont été obtenues dans [71] en adoptant une approximation appropriée pour le terme potentiel centrifuge et à travers une technique semblable à celle de Biedenharn [72].

Le but de ce chapitre est de résoudre approximativement le problème d'une particule relativiste de masse  $\mu$ , de charge  $e$  et de spin  $\frac{1}{2}$  qui se déplace dans un potentiel de Hulthén déformé de la forme :

$$V_q(r) = -\frac{V_0}{e^{r/a} - q}. \quad (3.1)$$

où  $V_0$  décrit la profondeur du puits de potentiel, le paramètre  $a$  caractérise la portée du potentiel et  $q$  est un paramètre de déformation ( $q \geq 1$ ). Le paramètre  $q$  introduit, peut servir comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions interatomiques, et particulièrement dans un problème tridimensionnel, il permet d'établir la localisation du centre de masse de la molécule à une certaine distance de l'origine de la coordonnée. De plus le potentiel  $V_q(r)$  contient le potentiel de Hulthén standard ( $q = 1$ ) et le potentiel de Coulomb ( $q = 1, a \rightarrow \infty$ ) comme des cas particuliers.

Ici, nous voulons d'abord montrer que même le problème des ondes  $s$  pour une particule de Dirac peut être seulement résolu d'une manière approximative contrairement à ce qui a été déclaré par certains auteurs [69, 70] et ensuite, comme à notre connaissance, il n'y a aucune discussion au moyen de l'intégrale de chemin du potentiel de Hulthén dans le cadre de la mécanique quantique relativiste, par le traitement du potentiel déformé de Hulthén (3.1) à l'aide des intégrales de chemin, nous souhaitons élargir la liste des problèmes de particules relativistes avec spin  $\frac{1}{2}$  dans un champ électrique ou magnétique [73, 74, 75, 76] qui ont été étudiés dans ce cadre.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans le deuxième paragraphe, nous utilisons d'abord une approximation du type exponentiel dépendant du paramètre de déformation  $q$  à la place du terme potentiel centrifuge et nous diagonalisons l'Hamiltonien effectif de la forme itérative de l'équation de Dirac à l'aide de la transformation de Biedenharn [72]. Alors, la fonction de Green pour l'équation de Dirac de deuxième ordre peut être développée en ondes partielles

dans le système des coordonnées sphériques. Dans le troisième paragraphe, la partie radiale de la fonction de Green est convertie en une intégrale de chemin associée au potentiel de Rosen-Morse  $q$ -déformé en utilisant la méthode généralisée de Duru-Kleinert [21]. Cette procédure nous permet d'obtenir une forme analytique de la fonction de Green radiale. Dans le quatrième paragraphe, nous construisons la fonction de Green pour l'équation de Dirac de premier ordre et nous obtenons le spectre d'énergie pour les états  $\kappa$ . Dans le cinquième paragraphe, la fonction de Green et le spectre d'énergie associés au potentiel de Hulthén standard et pour le potentiel de Coulomb, sont présentés comme des cas particuliers. Le dernier paragraphe est une conclusion.

### 3.2 Equation de Dirac avec un potentiel de Hulthén déformé

En choisissant les unités atomiques  $\hbar = c = 1$ , la fonction de Green  $G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$  pour le potentiel vecteur  $V_q(r)$  satisfait l'équation de Dirac

$$(\mu - \mathbf{M})G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'), \quad (3.2)$$

où  $\mu$  est la masse d'une particule chargée de spin  $\frac{1}{2}$ , et

$$\mathbf{M} = -\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{P} + \beta(E - V_q(r)), \quad (3.3)$$

dans lequel  $\boldsymbol{\alpha}$  et  $\beta$  sont les matrices de Dirac habituelles et  $E$  est l'énergie.

L'équation de Dirac (3.2) peut être réitérée en écrivant la fonction de Green  $G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$  de cette façon

$$G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = (\mu + \mathbf{M})g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'), \quad (3.4)$$

où  $g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$  est la fonction de Green définie comme la solution de l'équation de Dirac de second ordre

$$(\mu^2 - \mathbf{M}^2)g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'). \quad (3.5)$$

En utilisant la représentation intégrale de Schwinger [77], la solution de l'équation (3.5) peut s'écrire comme suit

$$g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda \langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (3.6)$$

où l'intégrand  $\langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle$  est similaire au propagateur d'un système quantique évoluant dans le temps  $\Lambda$  de  $\mathbf{r}'$  à  $\mathbf{r}''$  avec l'Hamiltonien effectif

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} (\mu^2 - \mathbf{M}^2). \quad (3.7)$$

Comme le potentiel (3.1) possède la symétrie sphérique, ce sont les coordonnées polaires qui sont le mieux adaptées pour trouver l'expression explicite de la fonction de Green (3.4). Avant d'aborder la construction de la fonction de Green (3.6), nous notons que nous pouvons faire quelques simplifications. En utilisant l'opérateur impulsion radial  $\mathbf{P}_r = \frac{1}{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{P} - i)$ , l'opérateur de Dirac  $\mathbf{K} = \beta(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + 1)$  et la notation  $\boldsymbol{\alpha}_r = \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r}}{r}$ , l'opérateur  $\mathbf{M}$  prend la forme<sup>1</sup>

$$\mathbf{M} = -\beta \boldsymbol{\alpha}_r \cdot \mathbf{P}_r + \frac{i \boldsymbol{\alpha}_r \mathbf{K}}{r} + \beta(E - V_q(r)), \quad (3.8)$$

et l'Hamiltonien effectif (3.7) devient<sup>2</sup> alors

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{P}_r^2 + \frac{\mathbf{K}^2 - \beta \mathbf{K}}{r^2} - i \boldsymbol{\alpha}_r \frac{d}{dr} V_q(r) - (E - V_q(r))^2 + \mu^2 \right). \quad (3.9)$$

Notons que  $\beta$  a les valeurs propres données par  $\tilde{\beta} = \pm 1$  et  $\mathbf{K}^2 = \mathbf{J}^2 + \frac{1}{4}$ , où  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$  est l'opérateur moment cinétique total. Les valeurs propres de l'opérateur  $\mathbf{J}^2$  sont  $j(j+1)$ , où  $j = l \pm \frac{1}{2}$ , sauf pour les états  $s$  ( $l=0$ ), dans lesquels  $j$  peut prendre seulement la valeur  $\frac{1}{2}$ . Donc, l'opérateur  $\mathbf{K}^2$  a pour valeurs propres  $\kappa^2 = (j + \frac{1}{2})^2$ , de sorte que  $\kappa = \pm(j + \frac{1}{2}) = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

D'autre part, le potentiel du type Hulthén dans (3.9) dépend du paramètre réel arbitraire de déformation  $q$  et la fonction de Green (3.6) ne peut pas être évaluée exactement à cause de la présence du terme potentiel centrifuge. Cependant, si  $r/a \ll 1$ , il est facile de montrer que  $\frac{qe^{r/a}}{a^2(e^{r/a}-q)^2} + \frac{1}{12a^2}$  peut être utilisée comme une bonne approximation de  $\frac{1}{r^2}$  dans le terme centrifuge uniquement lorsque le paramètre  $q \geq 1$ . Ceci peut être vu en effectuant un dévelop-

<sup>1</sup>Un calcul détaillée se présenté dans l'annexe A pour obtenir l'expression (3.8).

<sup>2</sup>Voir aussi l'annexe A pour trouver le calcul détaillée de l'Hamiltonien (3.9).

pement de Taylor de  $\frac{qe^{r/a}}{a^2(e^{r/a}-q)^2}$ , ou immédiatement, en traçant  $\frac{1}{(r/a)^2}$  et  $\frac{qe^{r/a}}{(e^{r/a}-q)^2}$  en fonction de  $r/a$  pour des valeurs typiques de  $q$  sur la Figure. 3.2. La coordonnée  $r$  est exprimée en unités  $a$ . Cette figure montre que ces expressions ont un comportement similaire dans l'intervalle  $]0, +\infty[$  lorsque  $q \geq 1$ . Pour  $q < 1$ , les courbes coupent l'axe des ordonnées. Alors, à l'aide de cette approximation, l'Hamiltonien effectif (3.9) s'écrit sous la forme

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{P}_r^2 + \mathbf{\Gamma}(\mathbf{\Gamma} + 1) \frac{qe^{r/a}}{a^2(e^{r/a}-q)^2} + \frac{V_0 \left( \frac{V_0}{q} - 2E \right)}{e^{r/a} - q} + \frac{1}{12a^2} \mathbf{K}(\mathbf{K} - \boldsymbol{\beta}) + \mu^2 - E^2 \right), \quad (3.10)$$

où

$$\mathbf{\Gamma} = - \left( \boldsymbol{\beta} \mathbf{K} + i \frac{aV_0}{q} \boldsymbol{\alpha}_r \right), \quad (3.11)$$

est l'opérateur de Martin-Glauber [78, 79]. Par analogie avec le travail de Biedenharn sur le problème de Coulomb, nous avons trouvé une transformation de similarité  $\mathbf{S}$  définie par<sup>3</sup>

$$\mathbf{S} = \exp \left[ \frac{i}{2} \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\alpha}_r \tanh^{-1} \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right], \quad (3.12)$$

qui diagonalise  $\mathbf{\Gamma}$ . Ceci donne<sup>4</sup>

$$\mathbf{\Gamma}_s = \mathbf{S} \mathbf{\Gamma} \mathbf{S}^{-1} = -\boldsymbol{\beta} \mathbf{K} \left[ 1 - \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.13)$$

dont les valeurs propres sont, compte tenu de celles de  $\boldsymbol{\beta}$  et  $\mathbf{K}^2$  :

$$\gamma = \pm \left[ \kappa^2 - \left( \frac{aV_0}{q} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.14)$$

Sous la transformation (3.12), la relation (3.4) se met sous la forme :

$$\tilde{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = (\mu + \mathbf{M}_s) \tilde{g}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'), \quad (3.15)$$

où

<sup>3</sup>Le calcul explicite de cette transformation est donnée dans l'annexe B.

<sup>4</sup>Voir aussi l'annexe B.

$$\mathbf{M}_s = \mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{S}^{-1}, \quad (3.16)$$

et

$$\tilde{g}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda \langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}_S\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (3.17)$$

avec

$$\mathbf{H}_s = \mathbf{S}\mathbf{H}\mathbf{S}^{-1}. \quad (3.18)$$

L'intégrand dans (3.17) se développe en ondes partielles comme suit

$$\langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}_s\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{r''r'} \sum_\lambda \langle \theta'', \phi'' | \lambda \rangle \langle r'' | \exp(-i\mathbf{H}_\lambda\Lambda) | r' \rangle \langle \lambda | \theta', \phi' \rangle, \quad (3.19)$$

où nous avons dénoté par  $|\lambda\rangle = |j, m, \kappa; \tilde{\beta}\rangle$  les vecteurs propres simultanés des opérateurs  $\mathbf{J}^2$ ,  $\mathbf{J}_z$ ,  $\mathbf{K}$ ,  $\beta$ , et par  $\langle r'' | \exp(-i\mathbf{H}_\lambda\Lambda) | r' \rangle$  le propagateur radial, dans lequel

$$\mathbf{H}_\lambda = \frac{1}{2} \left( \mathbf{P}_r^2 + \lambda(\lambda+1) \frac{qe^{r/a}}{a^2 (e^{r/a} - q)^2} + \frac{V_0 \left( \frac{V_0}{q} - 2E \right)}{e^{r/a} - q} + \mu^2 - E^2 + \frac{\kappa(\kappa - \tilde{\beta})}{12a^2} \right), \quad (3.20)$$

avec

$$\lambda = |\gamma| + \frac{1}{2} (\text{sgn } \gamma - 1), \quad (3.21)$$

et par  $\langle \theta, \phi | j, m, \kappa, \tilde{\beta} \rangle$  la dépendance en termes des variables d'angles  $\theta, \phi$ , du spin et de  $\tilde{\beta}$  qui peut s'écrire explicitement ainsi

$$\begin{cases} \langle \theta, \phi | j, m, \kappa, -1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \Omega_\kappa^m(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \\ \langle \theta, \phi | j, m, \kappa, 1 \rangle = \begin{pmatrix} \Omega_{-\kappa}^m(\theta, \phi) \\ 0 \end{pmatrix}, \end{cases} \quad (3.22)$$

où  $\Omega_\kappa^m(\theta, \phi)$  sont des harmoniques hypersphériques définies par

$$\Omega_{\kappa}^m(\theta, \phi) = -\operatorname{sgn} \kappa \sqrt{\frac{\kappa - m + \frac{1}{2}}{2\kappa + 1}} \chi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{\kappa + m + \frac{1}{2}}{2\kappa + 1}} \chi_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi), \quad (3.23)$$

dans lesquelles  $\chi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$  et  $\chi_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}}$  sont des fonctions d'onde de spin, et  $\operatorname{sgn} \kappa = \pm \operatorname{sgn} \gamma$  pour  $\tilde{\beta} = \mp 1$ .

En utilisant (3.22), le propagateur (3.19) peut s'écrire comme suit

$$\langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}_s\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{r''r'} \sum_{j,\kappa} \langle r'' | \exp(-i\mathbf{H}_\lambda\Lambda) | r' \rangle \Omega_{\kappa,\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \beta^2, \quad (3.24)$$

où

$$\Omega_{\kappa,\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') = \sum_m \Omega_{\kappa}^m(\theta'', \phi'') \Omega_{\kappa}^{m*}(\theta', \phi'). \quad (3.25)$$

En insérant (3.24) dans (3.17), nous obtenons

$$\tilde{g}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \frac{1}{r''r'} \sum_{j,\kappa} g_{j,\kappa}(r'', r') \Omega_{\kappa,\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \beta^2, \quad (3.26)$$

avec la fonction de Green radiale donnée par

$$g_{j,\kappa}(r'', r') = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'' | \exp \left\{ -\frac{i}{2} \left[ \mathbf{P}_r^2 + \frac{q\lambda(\lambda+1)e^{r/a}}{a^2(e^{r/a}-q)^2} + \frac{V_0\left(\frac{V_0}{q} - 2E\right)}{e^{r/a}-q} + \epsilon^2 \right] \Lambda \right\} | r' \rangle, \quad (3.27)$$

où

$$\epsilon = \sqrt{\mu^2 - E^2 + \frac{\kappa(\kappa - \tilde{\beta})}{12a^2}}. \quad (3.28)$$

L'expression (3.27) peut maintenant se résoudre par la technique des intégrales de chemin.



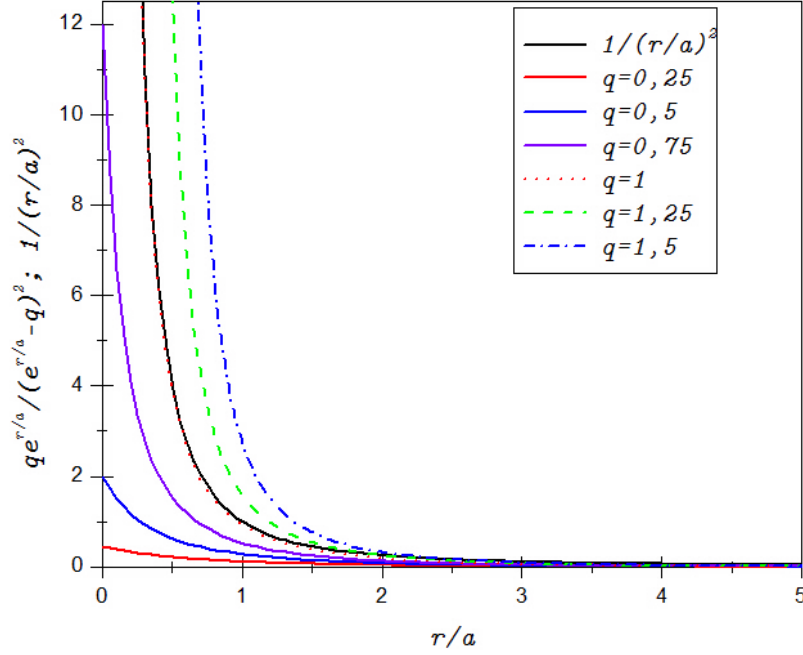


Fig. 3.2 : Allure de l'approximation du terme centrifuge pour différentes valeurs de  $q$ .

### 3.3 Solution par l'intégrale de chemin

Il est facile d'exprimer (3.27) sous la forme d'une intégrale de chemin

$$g_{j,\kappa}(r'', r') = \frac{i}{2} \int_0^\infty dS' P_{j,\kappa}(r'', r'; S'), \quad (3.29)$$

où

$$\begin{aligned}
P_{j,\kappa}(r'', r'; S') &= f_R(r'')f_L(r')\langle r'' | \exp \left\{ -\frac{i}{2}f_L(r) \left[ \mathbf{P}_r^2 + \frac{q\lambda(\lambda+1)e^{r/a}}{a^2(e^{r/a}-q)^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{V_0\left(\frac{V_0}{q}-2E\right)}{e^{r/a}-q} + \epsilon^2 \right] f_R(r)S' \right\} | r' \rangle \\
&= f_R(r'')f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \\
&\quad \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right\}, \tag{3.30}
\end{aligned}$$

et

$$dS' = \frac{d\Lambda}{f_R(r'')f_L(r')}. \tag{3.31}$$

Ici  $f_L(r)$  et  $f_R(r)$  sont les fonctions régularisatrices définies par Kleinert [21] ainsi

$$f(r) = f_L(r)f_R(r) = f^{1-\delta}(r)f^\delta(r), \tag{3.32}$$

où  $\delta$  est le paramètre de dédoublement et  $\mathcal{A}_1^n$ , est l'action élémentaire modifiée sous la forme canonique. Avec les notations,  $\varepsilon_{s'} = \frac{S'}{N+1} = ds' = \frac{ds}{f_L(r_n)f_R(r_{n-1})}$ ,  $ds = \varepsilon_s = \frac{\Lambda}{N+1}$ ,  $(P_r)_n = P_r(s_n)$ ,  $r_n = r(s_n)$  et  $\Delta r_n = r_n - r_{n-1}$ , nous avons

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[ (P_r)_n^2 + \frac{q\lambda(\lambda+1)e^{r_n/a}}{a^2(e^{r_n/a}-q)^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{V_0\left(\frac{V_0}{q}-2E\right)}{e^{r_n/a}-q} + \epsilon^2 \right] f_R(r_{n-1}). \tag{3.33}
\end{aligned}$$

Afin de simplifier le calcul du noyau  $P_{j,\kappa}(r'', r'; S')$ , posons le paramètre de dédoublement  $\delta = \frac{1}{2}$ , c'est à dire nous choisissons un développement limité de l'action et de la mesure autour du point moyen puisque le résultat final ne dépend pas de ce paramètre. Alors en effectuant l'intégration par rapport à la variable  $(P_r)_n$ , nous trouvons

$$\begin{aligned}
P_{j,\kappa}(r'', r'; S') &= [f'(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \prod_{n=1}^N \left[ \int \frac{dr_n}{\sqrt{f(r_n)}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right\}, \tag{3.34}
\end{aligned}$$

avec l'action élémentaire dans l'espace de configuration donnée par

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_2^n &= \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'} \sqrt{f(r_n) f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left[ \frac{q\lambda(\lambda+1) e^{r_n/a}}{a^2 (e^{r_n/a} - q)^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{V_0 \left( \frac{V_0}{q} - 2E \right)}{e^{r_n/a} - q} + \varepsilon^2 \right] \sqrt{f(r_n) f(r_{n-1})}. \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Pour évaluer l'intégrale de chemin (3.34), nous effectuons la transformation spatiale

$$r \in ]r_0; +\infty[ \rightarrow \xi \in ]-\infty; +\infty[, \tag{3.36}$$

définie par

$$r = a \ln [\exp (2\xi/a) + q], \tag{3.37}$$

accompagnée de la fonction régulatrice appropriée

$$f(r(\xi)) = \frac{e^{2\xi/a}}{\cosh_q^2(\xi/a)} = g'^2(\xi). \tag{3.38}$$

Sous ces transformations, le noyau (3.34) prend la forme :

$$\begin{aligned}
P_{j,\kappa}(r'', r'; S') &= [f'(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[ \int d\xi_n \right] \\
&\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta\xi_n)^2}{2\varepsilon_{s'}} + \frac{1}{8\varepsilon_{s'}} \left( \left( \frac{g''}{g'} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{g'''}{g'} \right) (\Delta\xi_n)^4 \right. \right. \\
&- \frac{\varepsilon_{s'}}{a^2} [\tilde{\varepsilon}^2 + \lambda(\lambda+1)] + \frac{\varepsilon_{s'}}{2a^2} \frac{(q\tilde{\varepsilon}^2 - \omega^2)}{\cosh_q^2(\xi_n/a)} \\
&\left. \left. - \frac{\varepsilon_{s'}}{a^2} [\tilde{\varepsilon}^2 - \lambda(\lambda+1)] \tanh_q(\xi_n/a) \right] \right\}, \tag{3.39}
\end{aligned}$$

où

$$\tilde{\varepsilon} = a \sqrt{\mu^2 - E^2 + \frac{\kappa(\kappa - \tilde{\beta})}{12a^2}}, \tag{3.40}$$

et

$$\omega = a \sqrt{V_0 \left( \frac{V_0}{q} - 2E \right)}. \tag{3.41}$$

Dans les relations (3.38) et (3.39), nous avons utilisé les fonctions hyperboliques déformées introduites pour la première fois par Arai [34], et dénotées par

$$\cosh_q x = \frac{1}{2} (e^x + qe^{-x}), \quad \sinh_q x = \frac{1}{2} (e^x - qe^{-x}), \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}, \tag{3.42}$$

où  $q$  est un paramètre réel.

Signalons que le terme en  $(\Delta\xi_n)^4$  apparaissant dans l'action contenue dans l'expression (3.39) contribue de façon significative à l'intégrale de chemin. Il peut être estimé en utilisant la procédure de Mc Laughlin et Schulman [80] et remplacé par

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left( \frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ \frac{i}{2\varepsilon_{s'}} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3\varepsilon_{s'}^2. \tag{3.43}$$

Après les changements de variables  $\xi_n/a$  en  $y_n$  et  $\varepsilon_{s'}$  en  $a^2\varepsilon_\tau$ , nous obtenons pour la fonction de Green radiale (3.29) l'expression suivante :

$$g_{j,\kappa}(r'', r') = \frac{a}{2} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}(y'', y'; \tilde{E}), \quad (3.44)$$

où

$$G_{RM}(y'', y'; \tilde{E}) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}\sigma) P_{j,\kappa}^{RM}(y'', y'; \sigma), \quad (3.45)$$

avec

$$\tilde{E} = - \left( \tilde{\epsilon}^2 + \lambda(\lambda + 1) + \frac{1}{4} \right), \quad (3.46)$$

et

$$P_{j,\kappa}^{RM}(y'', y'; \sigma) = \int \mathcal{D}y(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{y}^2}{2} - V_{j,\kappa}^{RM}(y) \right] d\tau \right\} \quad (3.47)$$

est le propagateur relatif au potentiel général de Rosen-Morse [12] défini en termes des fonctions hyperboliques  $q$ -déformées ainsi

$$V_{j,\kappa}^{RM}(y) = A \tanh_q y - \frac{B}{\cosh_q^2 y}; \quad y \in \mathbb{R}, \quad (3.48)$$

où les constantes  $A$  et  $B$  sont données par

$$\begin{cases} A = \tilde{\epsilon}^2 - \lambda(\lambda + 1) - \frac{1}{4}, \\ B = \frac{1}{2} (q\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2 - \frac{q}{4}). \end{cases} \quad (3.49)$$

Comme sa solution par l'intégrale de chemin est bien connue dans la littérature [48, 50, 81], nous pouvons alors écrire directement l'expression de la fonction de Green ainsi :

$$\begin{aligned}
G_{RM}(y'', y'; \tilde{E}) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}}) \Gamma(L_{\tilde{E}} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{1 - \tanh_q y' \ 1 - \tanh_q y''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left( \frac{1 + \tanh_q y' \ 1 + \tanh_q y''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh_q y_{<}}{2} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh_q y_{>}}{2} \right),
\end{aligned} \tag{3.50}$$

où les paramètres  $L_{\tilde{E}}$ ,  $E_{PT'}$ ,  $M_{1,2}$  ont dans le cas présent les valeurs suivantes :

$$\begin{cases} L_{\tilde{E}} = -\frac{1}{2} + \left( \frac{1}{16} + 2E_{PT'} \right)^{\frac{1}{2}} \\ E_{PT'} = \frac{1}{2} \left( \tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q} - \frac{1}{16} \right), \\ M_{1,2} = \tilde{\epsilon} \pm \left( \lambda + \frac{1}{2} \right). \end{cases} \tag{3.51}$$

${}_2F_1(a, b, c; z)$  est la fonction hyperg om etrique et les symboles  $y_{>}$  et  $y_{<}$  d enotent le  $\max(y'', y')$  et le  $\min(y'', y')$ , respectivement.

### 3.4 Fonction de Green et spectre d' nergie

Ayant compl et e l'int egration des chemins, nous substituons (3.50) dans (3.44) et ensuite dans (3.26). Alors, en revenant   la variable radiale d efinie par (3.37) et en tenant compte des notations (3.51), nous obtenons l'expression finale de la fonction de Green associ ee   l' equation

de Dirac de deuxième ordre :

$$\begin{aligned}
\tilde{g}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') &= \frac{a}{r'' r'} \sum_{j, \kappa} \frac{\Gamma\left(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}\right) \Gamma\left(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}\right)}{\Gamma(2\tilde{\epsilon} + 1) \Gamma(2\lambda + 2)} \\
&\times \left(q^2 e^{-(r''+r')/a}\right)^{\tilde{\epsilon}} \left[\left(1 - qe^{-r''/a}\right) \left(1 - qe^{-r'/a}\right)\right]^{\lambda+1} \\
&\times {}_2F_1\left(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 2\tilde{\epsilon} + 1; qe^{-r''/a}\right) \\
&\times {}_2F_1\left(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 2\lambda + 2; 1 - qe^{-r'/a}\right) \\
&\times \Omega_{\kappa, \kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \boldsymbol{\beta}^2. \tag{3.52}
\end{aligned}$$

Nous passons maintenant à l'évaluation de la fonction de Green relative à l'équation de Dirac de premier ordre (3.15). Pour cela, notons d'abord que l'opérateur transformé  $\mathbf{M}_s$  appliqué aux états  $\kappa$  peut se mettre sous la forme suivante :

$$\mathbf{M}_s = i\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r \left[ \frac{d}{dr} + \frac{1 - \gamma\boldsymbol{\beta}}{r} + \frac{aV_0 E}{q\gamma} \boldsymbol{\beta} \right] + \frac{\kappa E}{\gamma} \boldsymbol{\beta} + \frac{V_0 \boldsymbol{\beta}}{e^{r/a} - q} - \frac{aV_0 \boldsymbol{\beta}}{qr}. \tag{3.53}$$

Alors, compte tenu des relations

$$\begin{cases} \boldsymbol{\alpha}_r = \sigma_r \gamma^5 = i\sigma_r \boldsymbol{\beta} \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3, \\ \gamma^i = \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\alpha}_i; \quad i = 1, 2, 3, \end{cases} \tag{3.54}$$

et de l'équation

$$\sigma_r \Omega_{\kappa}^m(\theta, \phi) = -\Omega_{-\kappa}^m(\theta, \phi), \tag{3.55}$$

nous arrivons à l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
\tilde{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') &= \frac{a}{r''} \sum_{j, \kappa} \frac{\Gamma\left(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}\right) \Gamma\left(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}\right)}{\Gamma(2\tilde{\epsilon} + 1) \Gamma(2\lambda + 2)} \\
&U(r'') \left\{ \left( \mu - \frac{\kappa E}{\gamma} + \frac{V_0 \tilde{\beta}}{e^{r'/a} - q} - \frac{a V_0 \tilde{\beta}}{q r'} \right) \frac{U(r')}{r'} \Omega_{\kappa, \kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \beta^2 \right. \\
&\left. - \tilde{\beta} \left( \frac{d}{dr'} + \frac{1 + \tilde{\beta} \gamma}{r'} - \frac{a V_0 \tilde{\beta} E}{q \gamma} \right) \frac{1}{r'} U(r') \Omega_{\kappa, -\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \right\},
\end{aligned} \tag{3.56}$$

où

$$\begin{aligned}
U(r') &= \left( q e^{-r'/a} \right)^{\tilde{\epsilon}} \left( 1 - q e^{-r'/a} \right)^{\lambda+1} \\
&\times {}_2F_1 \left( 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 2\lambda + 2; 1 - q e^{-r'/a} \right),
\end{aligned} \tag{3.57}$$

et

$$\begin{aligned}
U(r'') &= \left( q e^{-r''/a} \right)^{\tilde{\epsilon}} \left( 1 - q e^{-r''/a} \right)^{\lambda+1} \\
&\times {}_2F_1 \left( 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}}, 2\tilde{\epsilon} + 1; q e^{-r''/a} \right).
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Les pôles de la fonction de Green (3.56), provenant de la première fonction gamma contenue dans le numérateur, sont

$$1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \frac{\omega^2}{q}} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \tag{3.59}$$

Ils déterminent les énergies des états liés. La conversion de (3.59) en énergie en utilisant (3.40)



et (3.41) donne

$$\left(E_{n_r, \kappa} - \frac{V_0}{2q}\right)^2 = \frac{(n_r + \lambda + 1)^2}{(n_r + \lambda + 1)^2 + \left(\frac{aV_0}{q}\right)^2} \left[\mu^2 + \frac{1}{12a^2} \kappa (\kappa - \tilde{\beta})\right] - \frac{1}{4a^2} (n_r + \lambda + 1)^2 \quad (3.60)$$

où  $q \geq 1$  et  $\lambda$  a été défini par (3.21).

## 3.5 Cas particuliers

### 3.5.1 Premier cas : potentiel standard de Hulthén

En posant  $q = 1$  dans l'expression (3.1), nous obtenons le potentiel standard de Hulthén

$$V_1(r) = -\frac{V_0}{e^{r/a} - 1}. \quad (3.61)$$

Les paramètres (3.14) et (3.41) deviennent dans ce cas

$$\gamma = \pm \left[\kappa^2 - (aV_0)^2\right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.62)$$

et

$$\omega = a\sqrt{V_0(V_0 - 2E)}. \quad (3.63)$$

La fonction de Green satisfaisant l'équation de Dirac de deuxième ordre peut être déduite à partir de la relation (3.56) :

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') &= \frac{a}{r''} \sum_{j, \kappa} \frac{\Gamma(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2}) \Gamma(1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2})}{\Gamma(2\tilde{\epsilon} + 1) \Gamma(2\lambda + 2)} \\ &U(r'') \left\{ \left( \mu - \frac{\kappa E}{\gamma} + \frac{V_0 \tilde{\beta}}{e^{r'/a} - 1} - \frac{aV_0 \tilde{\beta}}{r'} \right) \frac{U(r')}{r'} \Omega_{\kappa, \kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \beta^2 \right. \\ &\left. - \tilde{\beta} \left( \frac{d}{dr'} + \frac{1 + \tilde{\beta}\gamma}{r'} - \frac{aV_0 \tilde{\beta} E}{\gamma} \right) \frac{1}{r'} U(r') \Omega_{\kappa, -\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \right\}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

avec

$$\begin{aligned}
U(r') &= \left( e^{-r'/a} \right)^{\tilde{\epsilon}} \left( 1 - e^{-r'/a} \right)^{\lambda+1} \\
&\times {}_2F_1 \left( 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2}, 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2}, 2\lambda + 2; 1 - e^{-r'/a} \right),
\end{aligned} \tag{3.65}$$

et

$$\begin{aligned}
U(r'') &= \left( e^{-r''/a} \right)^{\tilde{\epsilon}} \left( 1 - e^{-r''/a} \right)^{\lambda+1} \\
&\times {}_2F_1 \left( 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2}, 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2}, 2\tilde{\epsilon} + 1; e^{-r''/a} \right).
\end{aligned} \tag{3.66}$$

Le spectre d'énergie est alors trouvé à partir de la relation (3.60) ainsi

$$\left( E_{n_r, \kappa} - \frac{V_0}{2} \right)^2 = \frac{(n_r + \lambda + 1)^2}{(n_r + \lambda + 1)^2 + (aV_0)^2} \left[ \mu^2 + \frac{\kappa(\kappa - \tilde{\beta})}{12a^2} \right] - \frac{(n_r + \lambda + 1)^2}{4a^2}. \tag{3.67}$$

Si nous éliminons la quantité  $\frac{\kappa(\kappa - \tilde{\beta})}{12a^2}$  dans (3.67), nous retrouvons le résultat obtenu à travers la solution de l'équation de Dirac [71] avec l'approximation  $\frac{1}{r^2} \approx \delta^2 \frac{e^{-\delta r}}{(1 - e^{-\delta r})^2}$  en posant  $a = \frac{1}{\delta}$ .

### 3.5.2 Deuxième cas : potentiel de Coulomb

Quand  $q = 1$  et  $a \rightarrow \infty$ , le potentiel de Hulthén déformé donné par (3.1) devient le potentiel de Coulomb

$$V_c(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{3.68}$$

où nous avons posé  $Ze^2 = V_0a$  avec  $Ze$  étant la charge du noyau.

Dans ce cas, on voit à partir des relations (3.40) et (3.41) que

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{\epsilon} \underset{a \rightarrow \infty}{\simeq} a\sqrt{\mu^2 - E^2} \\ 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2} \underset{a \rightarrow \infty}{\simeq} 1 + \lambda_0 - \frac{Ze^2E}{\sqrt{\mu^2 - E^2}} \\ 1 + \lambda + \tilde{\epsilon} + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 - \omega^2} \underset{a \rightarrow \infty}{\simeq} 1 + \lambda_0 + \frac{Ze^2E}{\sqrt{\mu^2 - E^2}} + 2a\sqrt{\mu^2 - E^2} \underset{a \rightarrow \infty}{\rightarrow} \infty. \end{array} \right. \quad (3.69)$$

D'autre part, en utilisant la formule de transformation de Gauss (voir Ref. [51], p. 1043, Eq. (9.131.2))

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) \\ &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \end{aligned} \quad (3.70)$$

ainsi que la formule [82]

$$\lim_{b \rightarrow \infty} {}_2F_1(a, b, c; \frac{z}{b}) = {}_1F_1(a, c; z). \quad (3.71)$$

et le lien entre les fonctions hypergéométriques confluentes et les fonctions standards de Whittaker  $M_{a,b}(z)$  et  $W_{a,b}(z)$  (voir Ref. [51], p. 1059, Eqs. (9.220.2) et (9.220.4))

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{a,b}(z) = z^{b+\frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}} {}_1F_1(b-a+\frac{1}{2}, 2b+1; z), \\ W_{a,b}(z) = \frac{\Gamma(-2b)}{\Gamma(\frac{1}{2}-b-a)} M_{a,b}(z) + \frac{\Gamma(2b)}{\Gamma(\frac{1}{2}+b-a)} M_{a,-b}(z), \end{array} \right. \quad (3.72)$$

il est facile de montrer que, à la limite  $a \rightarrow \infty$ , la forme finale (3.52) de la fonction de Green de l'équation de Dirac de deuxième ordre, pour  $q = 1$ , devient ( $r'' > r'$ ) :

$$\begin{aligned}
\lim_{a \rightarrow \infty} \tilde{g}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') &= \tilde{g}_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \\
&= \frac{1}{2r''r'} \sum_{j,\kappa} \frac{\Gamma\left(1 + \lambda_0 - \frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}\right)}{\tilde{\omega}\Gamma(2\lambda_0 + 2)} M_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0 + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r') \\
&\quad \times W_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0 + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r'') \Omega_{\kappa,\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \beta^2.
\end{aligned} \tag{3.73}$$

où  $\tilde{\omega} = \sqrt{\mu^2 - E^2}$ , et  $\lambda_0 = |\gamma_0| - \frac{1}{2}(\text{sgn}\gamma_0 - 1)$ , avec  $\gamma_0 = \pm\sqrt{\kappa^2 - Z^2e^4}$ .

Pour le potentiel de Coulomb, l'opérateur (3.53) devient

$$\mathbf{M}_s = i\beta\alpha_r \left[ \frac{d}{dr} + \frac{1 - \gamma_0\beta}{r} + \frac{Ze^2E}{\gamma_0}\beta \right] + \frac{\kappa E}{\gamma_0}\beta, \tag{3.74}$$

et la fonction de Whittaker  $M_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0(\gamma_0) + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r)$  dans (3.73) vérifie les relations de récurrence [72, 74, 79]

$$D_{\pm} \left[ \frac{1}{r} M_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0(\pm\gamma_0) + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r) \right] = \pm i \text{sgn}\gamma_0 \left[ \mu^2 - \left( \frac{\kappa E}{\gamma_0} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} M_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0(\mp\gamma_0) + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r), \tag{3.75}$$

où  $D_{\pm} = \frac{d}{dr} + \frac{1 \pm \gamma_0}{r} \mp \frac{Ze^2E}{\gamma_0}$ .

Dans ce cas, la fonction de Green associée au problème de Dirac-Coulomb est

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') &= (\mu + \mathbf{M}_s(r')) \tilde{g}_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \\
&= \frac{1}{2r''r'} \sum_{j,\kappa} \frac{\Gamma\left(1 + \lambda_0 - \frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}\right)}{\tilde{\omega}\Gamma(2\lambda_0 + 2)} W_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0 + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r'') \\
&\quad \times \left\{ \left( \mu - \frac{\kappa E}{\gamma_0} \right) M_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \lambda_0 + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r') \Omega_{\kappa,\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \beta^2 \right. \\
&\quad \left. - i\tilde{\omega} \text{sgn}\gamma_0 M_{\frac{Ze^2E}{\tilde{\omega}}, \tilde{\lambda}_0 + \frac{1}{2}}(2\tilde{\omega}r') \Omega_{\kappa,-\kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \right\},
\end{aligned} \tag{3.76}$$

avec  $\lambda_0 = \lambda_0(\gamma_0)$  et  $\tilde{\lambda}_0 = \lambda_0(-\gamma_0)$ .

Le spectre d'énergie discret est donné par

$$E_{n_r, \kappa} = \mu \left[ 1 + Z^2 e^4 (n_r + \lambda_0 + 1)^{-2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.77)$$

Ce résultat coïncide avec celui obtenu par l'approche des intégrales de chemin [74].

### 3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que le problème d'un système relativiste de spin  $\frac{1}{2}$  en présence du potentiel de Hulthén déformé peut être résolu pour des états  $\kappa$  en utilisant une approximation appropriée pour le terme en  $\frac{1}{r^2}$ . Il est important de mentionner que le problème d'une particule de Dirac en mouvement dans un potentiel standard de Hulthén ne peut pas être résolu exactement, et même dans le cas des ondes  $s$  ( $l = 0$ ) à cause du terme potentiel centrifuge contenu dans les deux équations d'onde radiales (voir par exemple Eqs. (47) dans Ref. [71]) contrairement à ce qui est affirmé par Guo et ses collaborateurs [69] et Alhaidari [70]. Ces auteurs avaient effectué plusieurs manipulations incorrectes en appliquant une contrainte pour éliminer le terme centrifuge dépendant des valeurs propres de l'opérateur de Martin-Glauber [78, 79]. Par conséquent, les spectres d'énergie obtenus ne sont pas satisfaisants. En outre, on peut observer que le spectre d'énergie relativiste des ondes  $s$  pour le potentiel de Coulomb ne peut pas être retrouvé à partir des résultats obtenus à l'aide de l'approche de Alhaidari. Pour le potentiel standard de Hulthén ( $q = 1$ ) et celui de Coulomb ( $q = 1$  et  $a \rightarrow \infty$ ), nos résultats concernant les spectres d'énergie sont identiques à ceux obtenus par résolution de l'équation de Dirac [71] (voir aussi les références [74, 83] pour le potentiel de Coulomb).

## Chapitre 4

# Mouvement de particules relativistes dans un potentiel vecteur plus un potentiel scalaire de type

$$\frac{V_0}{2} \tanh^2 (r/d)$$

### 4.1 Introduction

La recherche des solutions des équations de Klein-Gordon et de Dirac avec une mixture de potentiels vecteur et scalaire à symétrie sphérique, est abordée dans de nombreux domaines de la physique et même en chimie quantique. Durant ces dernières années, en considérant le potentiel scalaire égal au potentiel vecteur, plusieurs auteurs ont étudié les solutions des équations de Klein-Gordon et de Dirac à travers différentes méthodes pour des potentiels exactement solubles tels que l'oscillateur harmonique [84], le potentiel  $Ar^{-2} - Br^{-1}$  [85], l'oscillateur pseudo harmonique [86] l'oscillateur non sphérique en forme d'anneau [87], et pour des potentiels de type exponentiel en adoptant une approximation appropriée pour le terme centrifuge. Les solutions des états  $l$  et  $\kappa$  ont été obtenues pour certains potentiels tels que le potentiel hyperbolique [88], le potentiel de Eckart [89], le potentiel de Deng-Fan [90] et le potentiel de Rosen-Morse à  $N$  dimensions [91].

Dans ce chapitre, en utilisant l'approche des intégrales de chemin, nous allons reprendre l'étude du problème des états liés des particules de Klein-Gordon et de Dirac en mouvement dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire égaux de la forme

$$V(r) = \frac{V_0}{2} \tanh^2(r/d). \quad (4.1)$$

Ce problème a été analysé d'abord par la méthode standard (les équations différentielles) [92]. Ensuite il a été discuté dans le cadre de l'approche de l'invariance de forme et à l'aide de l'approximation WKB en supersymétrie pour déterminer les spectres d'énergie. Les fonctions d'onde étaient obtenues par résolution d'équations différentielles [93]. De plus il a été étudié comme cas particulier dans la référence [94]. Mais les résultats obtenus sont indiscutablement incorrects car les fonctions d'onde radiales ne remplissent pas la condition à la limite à l'origine. Par conséquent, il est utile de réexaminer rigoureusement le problème.

Le second paragraphe est consacré à l'étude du problème d'une particule de Klein-Gordon. Nous construisons la fonction de Green radiale associée à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire égaux. Nous montrons que cette fonction de Green radiale pour les ondes  $s$  ( $l = 0$ ) se réduit à celle relative au potentiel  $V_{mPT}(y)$  de Pöschl-Teller modifié défini sur  $\mathbb{R}^+$ . Ensuite, nous calculons la fonction de Green à l'aide de l'astuce utilisée dans le premier chapitre qui est basée sur l'incorporation d'une perturbation représentée par une fonction  $\delta$  de Dirac. Les pôles de la fonction de Green donnent un spectre d'énergie représenté par une équation transcendante. Les fonctions d'onde sont également trouvées. Dans le troisième paragraphe, pour calculer la fonction de Green pour une particule de Dirac en présence des potentiels  $v(r)$  et  $s(r)$ , nous construisons la fonction de Green dite de second ordre associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) dont la partie radiale est similaire à celle de la particule de Klein-Gordon. Les pôles de la fonction de Green donnent une équation transcendante pour les niveaux d'énergie, et après avoir éliminé les états superflus, nous obtenons les fonctions d'onde correspondantes formées de deux composantes (supérieure et inférieure). Le dernier paragraphe est une conclusion.

## 4.2 Particule de Klein-Gordon

### 4.2.1 Fonction de Green

Pour déterminer les états liés d'une particule sans spin, de masse  $\mu$  et de charge  $(-e)$  en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux, nous commençons par formuler dans le cadre des intégrales de chemin, l'expression de la fonction de Green  $G(x'', x')$  qui obéit à l'équation de Klein-Gordon suivante (dans un système d'unité où  $c = \hbar = 1$ )

$$\left[ (P - eA)^2 - (\mu + V(r))^2 \right] G(x'', x') = \delta^4(x'' - x'), \quad (4.2)$$

où  $eA = \begin{pmatrix} V(r) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$  dans l'espace-temps plat de Minkowski muni de la métrique pseudo-Euclidienne  $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ .

Dans la représentation intégrale de Schwinger [77], la fonction de Green qui représente la solution de l'équation (4.2) s'écrit

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

et comme le potentiel (4.1) possède la symétrie sphérique, elle se développe en ondes partielles ainsi

$$G(\mathbf{r}'', t'', \mathbf{r}', t') = \frac{1}{r' r''} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (4.4)$$

où  $P_l(\cos \Theta)$  est un polynôme de Legendre de degré  $l$  en  $\cos \Theta$  avec  $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\phi'' - \phi')$ , et  $G_l(r'', t'', r', t')$  est la fonction de Green radiale donnée par l'expression suivante :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'', t'' | \exp \left[ \frac{i}{2} \left[ -P_r^2 + (P_0 - V(r))^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (\mu + V(r))^2 \right] \Lambda \right] | r', t' \rangle, \quad (4.5)$$



qui se met sous la forme d'une intégrale de chemin ainsi

$$G_l(r'', t'', r', t', \Lambda) = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', t'', r', t', \Lambda), \quad (4.6)$$

où  $P_l(r'', t'', r', t', \Lambda)$  est le propagateur défini explicitement sous forme compacte par

$$P_l(r'', t'', r', t', \Lambda) = \int \int D_r(\tau) D_t(\tau) \int \int \frac{DP_r(\tau) DP_0(\tau)}{(2\pi)^2} \left[ \exp i \int_0^\Lambda -P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} \left[ -P_r^2 + (P_0 - V(r))^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (\mu + V(r))^2 \right] d\tau \right]. \quad (4.7)$$

Sous forme discrète, il s'écrit

$$P_l(r'', t'', r', t', \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int \int dr_n dt_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \times \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right], \quad (4.8)$$

avec l'action élémentaire  $\mathcal{A}_1^n$  donnée par

$$\mathcal{A}_1^n = -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ -(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V(r))^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (\mu + V(r))^2 \right], \quad (4.9)$$

où  $\Delta r_n = r_n - r_{n-1}$ ,  $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$  et  $\varepsilon_\tau = d\tau = \Lambda / (N + 1)$ .

Afin d'évaluer l'expression (4.8), nous observons d'abord que les intégrations sur les variables temporelles  $t_n$  dans l'expression (4.8) donnent  $N$  distributions de Dirac  $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$ , ensuite en effectuant les intégrations sur les variables  $(P_0)_n$ , nous trouvons

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots = (P_0)_{N+1} = E. \quad (4.10)$$

Alors, le propagateur (4.8) devient

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; \Lambda), \quad (4.11)$$

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

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right], \quad (4.12)$$

avec l'action élémentaire

$$\mathcal{A}_2^n = -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ -(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + (E^2 - \mu^2) - 2(E + \mu)V(r) \right]. \quad (4.13)$$

Maintenant, nous pouvons facilement effectuer les intégrations sur les variables  $(P_r)_n$ , et mettre le noyau (4.12) sous la forme d'une intégrale de chemin dans l'espace de configuration :

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_3^n \right\}, \quad (4.14)$$

avec l'action élémentaire donnée par

$$\mathcal{A}_3^n = \frac{\Delta r_n^2}{2\varepsilon_\tau} - \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ 2(E + \mu)V(r) + \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (E^2 - \mu^2) \right]. \quad (4.15)$$

Après substitution de (4.11) dans (4.6), nous remarquons que le terme dépendant du temps  $t$  ne contient pas la variable pseudo-temporelle  $\Lambda$ , ce qui nous permet de réécrire la fonction de Green (4.6) ainsi :

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

où

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \exp \left[ \frac{i}{2} [(E^2 - \mu^2) - V_0(E + \mu)] \Lambda \right] K_l(r'', r'; \Lambda), \quad (4.17)$$

avec

$$K_l(r'', r'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \right] \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\tau} - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + \varepsilon_\tau(\mu + E) \frac{V_0}{\cosh^2(r/d)} \right] \right\}. \quad (4.18)$$

Comme le propagateur radial (4.18) et la fonction de Green radiale (4.17) ne sont pas analytiquement solubles pour  $l \neq 0$ , nous nous limiterons à l'étude du problème des ondes  $s$  ( $l = 0$ ).

En effectuant maintenant le changement des variables suivantes :  $(\frac{r_n}{d}, \varepsilon_\tau)$  en  $(y, d^2\varepsilon_s)$ , et  $\Lambda$  en  $d^2S$ , la fonction de Green radiale (4.17), pour les états  $s$  ( $l = 0$ ), s'écrit

$$G_0(r'', r') = -\frac{d}{2} \tilde{G}_{mPT}^0(y'', y', \tilde{E}^2), \quad (4.19)$$

avec

$$\tilde{G}_{mPT}^0(y'', y', \tilde{E}^2) = i \int_0^\infty dS \exp(i\tilde{E}^2 S) K_{mPT}^0(y'', y'; S), \quad (4.20)$$

et

$$K_{mPT}^0(y'', y'; S) = \int Dy(s) \exp \left\{ \left[ i \int_0^S \frac{\dot{y}^2}{2} + \frac{A}{\cosh^2 y} \right] ds \right\}; y \in \mathbb{R}^+, \quad (4.21)$$

où nous avons utilisé les notations

$$\begin{cases} \tilde{E}^2 = \frac{d^2}{2} [(E^2 - \mu^2) - V_0(E + \mu)], \\ A = \frac{d^2}{2} V_0(E + \mu). \end{cases} \quad (4.22)$$

Le propagateur (4.21) a une forme similaire à l'intégrale de chemin relative au potentiel de Pöschl-Teller modifié. Il est bien connu que le potentiel  $V_{smPT}(y)$  de Pöschl-Teller modifié

et symétrique est défini pour  $y \in ]-\infty, +\infty[$ , mais, dans le cas qui nous intéresse, l'intégrale de chemin pour le potentiel radial (4.1) est converti en celle du potentiel de type Pöschl-Teller modifié  $V_{mPT}(y)$  défini sur  $\mathbb{R}^+$ , c'est à dire que la particule se déplace sur un demi-axe  $y > y_0 = 0$ . En suivant la même démarche exposée au premier chapitre, nous arrivons à l'expression suivante de la fonction de Green

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{mPT}^0(y'', y', \tilde{E}^2) &= \lim_{\eta \rightarrow \infty} G_{mPT}^\delta(y'', y', \tilde{E}^2) \\ &= G_{smPT}^0(y'', y', \tilde{E}^2) - \frac{G_{smPT}^0(y'', y_0, \tilde{E}^2) G_{smPT}^0(y_0, y', \tilde{E}^2)}{G_{smPT}^0(y_0, y_0, \tilde{E}^2)}.\end{aligned}\tag{4.23}$$

où  $G_{smPT}^0(y'', y', \tilde{E}^2)$  est la fonction de Green associée au potentiel de type Pöschl-Teller modifié et symétrique défini par

$$V_{smPT}(y) = -\frac{A}{\cosh^2 y}; y \in \mathbb{R}.\tag{4.24}$$

Comme la solution par l'intégrale de chemin pour ce potentiel est bien connue dans la littérature [6, 50], on peut écrire directement le résultat

$$\begin{aligned}G_{smPT}^0(y'', y', \tilde{E}^2) &= \Gamma\left(\sqrt{-2\tilde{E}^2} - \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}\right) \times \Gamma\left(\sqrt{-2\tilde{E}^2} + \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}\right) \\ &\quad \times P_{\tilde{\lambda}-\frac{1}{2}}^{-\sqrt{-2\tilde{E}^2}}(\tanh y_<) \times P_{\tilde{\lambda}-\frac{1}{2}}^{-\sqrt{-2\tilde{E}^2}}(-\tanh y_>),\end{aligned}\tag{4.25}$$

où  $P_b^a(z)$  représente la fonction de Legendre associée de première espèce, et

$$\tilde{\lambda} = \sqrt{d^2 V_0(E + \mu) + \frac{1}{4}}.\tag{4.26}$$

Compte tenu de la relation entre les fonctions hypergéométriques et les fonctions de Legendre associées de première espèce ( voir Ref. [51] P. 999. Eq. (8.704))

$$P_\omega^\rho(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\rho)} \left[\frac{1+x}{1-x}\right]^{\rho/2} \times {}_2F_1\left(-\omega, \omega+1, 1-\rho; \frac{1-x}{2}\right),\tag{4.27}$$

et employant l'identité des fonctions hypergéométriques (voir Ref. [51] P. 1043. Eq. (9.131.1))

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c; z), \quad (4.28)$$

la fonction de Green (4.25) se met sous la forme :

$$\begin{aligned} G_{smPT}^0(y', y'', \tilde{E}^2) &= \frac{\Gamma\left(\sqrt{-2\tilde{E}^2} - \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\sqrt{-2\tilde{E}^2} + \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \sqrt{-2\tilde{E}^2}\right) \Gamma\left(1 + \sqrt{-2\tilde{E}^2}\right)} \\ &\times \left(\frac{1 - \tanh y'}{2} \frac{1 - \tanh y''}{2}\right)^{\frac{\sqrt{-2\tilde{E}^2}}{2}} \\ &\times \left(\frac{1 + \tanh y'}{2} \frac{1 + \tanh y''}{2}\right)^{\frac{\sqrt{-2\tilde{E}^2}}{2}} \\ &\times {}_2F_1\left(\sqrt{-2\tilde{E}^2} + \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}, \sqrt{-2\tilde{E}^2} - \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}, 1 + \sqrt{-2\tilde{E}^2}; \frac{1 - \tanh y_{<}}{2}\right) \\ &\times {}_2F_1\left(\sqrt{-2\tilde{E}^2} + \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}, \sqrt{-2\tilde{E}^2} - \tilde{\lambda} + \frac{1}{2}, 1 + \sqrt{-2\tilde{E}^2}; \frac{1 + \tanh y_{>}}{2}\right). \end{aligned} \quad (4.29)$$

#### 4.2.2 Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Le spectre d'énergie discret s'obtient à partir des pôles de l'équation (4.23), c'est à dire, à partir de l'équation :  $G_{smPT}^0(y_0, y_0, \tilde{E}^2) = 0$ . Nous obtenons par conséquent la condition de quantification pour les niveaux d'énergie des états liés

$${}_2F_1\left(\gamma, \eta, 2\nu + 1; \frac{1}{2}\right) = 0, \quad (4.30)$$

où les paramètres  $\nu$ ,  $\gamma$  et  $\eta$  sont définis par

$$\begin{cases} \nu = \frac{d}{2} \sqrt{V_0 (E_{n_r} + \mu) - (E_{n_r}^2 - \mu^2)}, \\ \gamma = 2\nu + \frac{1}{2} + \sqrt{V_0 d^2 (E_{n_r} + \mu) + \frac{1}{4}}, \\ \eta = 2\nu + \frac{1}{2} - \sqrt{V_0 d^2 (E_{n_r} + \mu) + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (4.31)$$

Notons que l'équation transcendante (4.30) peut être résolue numériquement pour déterminer les énergies  $E_{n_r}$  des états liés. Les fonctions d'onde correspondantes (4.30) sont données par :

$$R_{n_r}(r) = C \left( \frac{1}{e^{2r/d} + 1} \right)^\nu \left( \frac{e^{2r/d}}{e^{2r/d} + 1} \right)^\nu \times {}_2F_1 \left( \gamma, \eta, 2\nu + 1; \frac{1}{e^{2r/d} + 1} \right). \quad (4.32)$$

où  $C$  est un facteur constant. Ces fonctions d'onde (4.32) satisfont bien les conditions aux limites :  $R_{n_r}(0) = R_{n_r}(+\infty) = 0$ .

## 4.3 Particule de Dirac

### 4.3.1 Fonction de Green

La fonction de Green  $\bar{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$  pour le potentiel vecteur  $v(r)$  et le potentiel scalaire  $s(r)$  vérifie l'équation de Dirac ( $c = \hbar = 1$ )

$$(\mu(r) - \mathbf{M}) \bar{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'), \quad (4.33)$$

où

$$\mu(r) = \mu + s(r), \quad (4.34)$$

et

$$\mathbf{M} = -\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P} + \beta (E - v(r)). \quad (4.35)$$

Ici,  $\mu$  est la masse d'une particule chargée de spin  $\frac{1}{2}$ ,  $\boldsymbol{\alpha}$  et  $\beta$  sont les matrices de Dirac ordinaires,  $\mathbf{P}$  est la quantité de mouvement et  $E$  est l'énergie.

On peut réitérer l'équation de Dirac (4.33) en écrivant la fonction de Green  $\bar{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$  de la manière suivante :

$$\bar{G}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = (\mu(r) + \mathbf{M}) g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'), \quad (4.36)$$

dont la fonction de Green  $g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$  vérifie l'équation de Dirac du second ordre

$$(\mu(r) - \mathbf{M})(\mu(r) + \mathbf{M}) g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'). \quad (4.37)$$

Maintenant, en employant la représentation intégrale de Schwinger [77], la solution de l'équation

(4.37) peut s'exprimer sous forme intégrale comme suit

$$g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \frac{i}{2} \int_0^\infty \langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle d\Lambda, \quad (4.38)$$

où l'intégrand  $\langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle$  a une forme d'un propagateur décrivant l'évolution d'un système physique évoluant dans le temps  $\Lambda$  de  $\mathbf{r}'$  à  $\mathbf{r}''$  avec l'Hamiltonien effectif

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} [(\mu(r) - \mathbf{M})(\mu(r) + \mathbf{M})]. \quad (4.39)$$

L'opérateur  $\mathbf{M}$  donné par l'équation (4.35) s'écrit<sup>1</sup>

$$\mathbf{M} = -\beta\alpha_r \cdot \mathbf{P}_r - i\frac{\alpha_r \mathbf{K}}{r} + \beta(E - v(r)), \quad (4.40)$$

avec l'opérateur impulsion radial  $\mathbf{P}_r = \frac{1}{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{P} - i)$ , l'opérateur de Dirac<sup>2</sup>  $\mathbf{K} = -\beta(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + 1)$  et la notation  $\alpha_r = \frac{\alpha \cdot \mathbf{r}}{r}$ . L'Hamiltonien effectif (4.39) s'écrit alors<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \frac{1}{2} \left[ \mathbf{P}_r^2 + (\mu + s(r))^2 - (E - v(r))^2 + \frac{\mathbf{K}(\mathbf{K} + \beta)}{r^2} \right. \\ & \left. + i\alpha_r \left( \beta \cdot \frac{ds(r)}{dr} - \frac{dv(r)}{dr} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Notons que les valeurs propres de  $\beta$  sont données par  $\tilde{\beta} = \pm 1$  et  $\mathbf{K}^2 = \mathbf{J}^2 + \frac{1}{4}$ , où  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$  est l'opérateur moment cinétique total. Les valeurs propres de l'opérateur  $\mathbf{J}^2$  sont  $j(j+1)$ , où  $j = l \pm \frac{1}{2}$ . Donc, l'opérateur  $\mathbf{K}^2$  a pour valeurs propres  $\kappa^2 = (j + \frac{1}{2})^2$ , de sorte que  $\kappa = \pm(j + \frac{1}{2}) = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Alors, l'intégrand dans (4.38) peut se développer en ondes partielles ainsi

$$\langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{r' r''} \sum_{\lambda} \langle \theta'', \phi'' | \lambda \rangle \langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\tilde{\mathbf{H}}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle \langle \lambda | \theta', \phi' \rangle, \quad (4.42)$$

<sup>1</sup>En suivant la même procédure donnée dans l'annexe A.

<sup>2</sup>On prend dans ce chapitre l'opérateur  $\mathbf{K}$  avec le signe  $(-)$  en conformité avec les problèmes de ce type étudiés dans la littérature.

<sup>3</sup>En utilisant la même démarche concernant l'Hamiltonien dans l'annexe A.

où  $|\lambda\rangle = |j, m, \kappa, \tilde{\beta}\rangle$  représente les vecteurs propres simultanés des opérateurs  $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_z, \mathbf{K}, \beta$ , et  $\langle r'' | \exp(-i\tilde{\mathbf{H}}\Lambda) | r' \rangle$  est le propagateur radial avec l'Hamiltonien

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}} = & \frac{1}{2} \left[ \mathbf{P}_r^2 + (\mu + s(r))^2 - (E - v(r))^2 + \frac{\kappa(\kappa + \tilde{\beta})}{r^2} \right. \\ & \left. + i\alpha_r \left( \tilde{\beta} \cdot \frac{ds(r)}{dr} - \frac{dv(r)}{dr} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.43)$$

et le terme  $\langle \theta, \phi | j, m, \kappa, \tilde{\beta} \rangle$  dépendant des variables d'angles  $\theta, \phi$ , du spin et de  $\tilde{\beta}$  peut s'écrire explicitement ainsi

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \theta, \phi | j, m, \kappa, 1 \rangle = \begin{pmatrix} \Omega_{\kappa}^m(\theta, \phi) \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \langle \theta, \phi | j, m, \kappa, -1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \Omega_{-\kappa}^m(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \end{array} \right. \quad (4.44)$$

où  $\Omega_{\kappa}^m(\theta, \phi)$  représente les harmoniques hypersphériques définies par

$$\Omega_{\kappa}^m(\theta, \phi) = -\text{sgn } \kappa \sqrt{\frac{\kappa - m + \frac{1}{2}}{2\kappa + 1}} \chi_{1/2}^{1/2} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) + \sqrt{\frac{\kappa + m + \frac{1}{2}}{2\kappa + 1}} \chi_{1/2}^{-1/2} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi). \quad (4.45)$$

dans lesquelles  $\chi_{1/2}^{1/2}$  et  $\chi_{1/2}^{-1/2}$  sont les fonctions d'onde de spin. Ceci nous permet de mettre le propagateur (4.42) sous la forme :

$$\langle \mathbf{r}'' | \exp(-i\mathbf{H}\Lambda) | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{r' r''} \sum_{j, \kappa} \langle r'' | \exp(-i\tilde{\mathbf{H}}\Lambda) | r' \rangle \Omega_{\kappa, \kappa}^m(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \cdot \beta^2, \quad (4.46)$$

où

$$\Omega_{\kappa, \kappa}^j(\theta'', \phi'', \theta', \phi') = \sum_m \Omega_{\kappa}^m(\theta'', \phi'') \Omega_{\kappa}^{m*}(\theta', \phi'). \quad (4.47)$$

En insérant maintenant l'expression (4.46) dans l'équation (4.38), nous obtenons

$$g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \frac{1}{r' r''} \sum_{j, \kappa} g_{j, \kappa}(r'', r') \Omega_{\kappa, \kappa}^m(\theta'', \phi'', \theta', \phi') \cdot \beta^2, \quad (4.48)$$

avec la fonction de Green radiale pour l'équation de Dirac de deuxième ordre donnée par



$$g_{j,\kappa}(r'', r') = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'' | \exp \left\{ -\frac{i}{2} \left[ \mathbf{P}_r^2 + (\mu + s(r))^2 - (E - v(r))^2 + \frac{\kappa(\kappa + \tilde{\beta})}{r^2} + i\alpha_r \left( \tilde{\beta} \frac{ds(r)}{dr} - \frac{dv(r)}{dr} \right) \right] \Lambda \right\} | r' \rangle, \quad (4.49)$$

En se limitant à l'étude des ondes  $s$  ( $l = 0$ ),  $\kappa = -1$ , dans ce cas, pour  $\tilde{\beta} = 1$ , et  $v(r) = s(r) = V(r)$  le terme potentiel centrifuge et celui dépendant de  $\alpha_r$  disparaissent. En conséquence, l'équation (4.49) se simplifie :

$$g_{1/2,-1}(r'', r') = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda \langle r'' | \exp \left\{ -\frac{i}{2} \left[ \mathbf{P}_r^2 + (\mu^2 - E^2) + 2V(r)(\mu + E) \right] \Lambda \right\} | r' \rangle. \quad (4.50)$$

Dans la formulation de l'intégrale de chemin de Feynman, l'expression (4.50) s'écrit sous forme discrète par rapport au pseudo-temps  $\Lambda$  comme

$$g_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda) = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda P_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda), \quad (4.51)$$

où le propagateur  $P_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda)$  est donné par

$$P_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}^n \right]. \quad (4.52)$$

L'action élémentaire  $\mathcal{A}^n$  est définie par

$$\mathcal{A}^n = - (P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ (-P_r)_n^2 + (E^2 - \mu^2) - 2V(r)(E + \mu) \right], \quad (4.53)$$

avec les notations habituelles :  $\Delta r_n = r_n - r_{n-1}$ ,  $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$  et  $\varepsilon_\tau = d\tau = \Lambda / (N + 1)$ .

En intégrant par rapport aux variables  $(P_r)_n$ , nous obtenons

$$P_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left( \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\tau} - \frac{\varepsilon_\tau}{2} [2V(r)(E + \mu) - (E^2 - \mu^2)] \right) \right\}, \quad (4.54)$$

et en insérant (4.54) dans (4.51), nous arrivons à

$$g_{1/2,-1}(r'', r') = \frac{i}{2} \int_0^\infty d\Lambda \exp \left[ \frac{i}{2} [(E^2 - \mu^2) - V_0(E + \mu)] \Lambda \right] K_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda), \quad (4.55)$$

avec

$$K_{1/2,-1}(r'', r'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\tau}} \right] \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\tau} + \varepsilon_\tau (\mu + E) \frac{V_0}{\cosh^2(r/d)} \right] \right\}. \quad (4.56)$$

Nous remarquons que la fonction de Green radiale (4.55) a une forme similaire à la fonction de Green radiale (4.17) pour les états  $s$  associée à la particule de Klein-Gordon.

En effectuant maintenant le changement des variables :  $(\frac{r_n}{d}, \varepsilon_\tau)$  en  $(y, d^2\varepsilon_s)$ , et  $d\Lambda$  en  $dS$ , la fonction de Green (4.55) devient

$$g_{1/2,-1}(r'', r') = \frac{d}{2} \tilde{g}_{1/2,-1}^{mPT}(y'', y'; \tilde{E}^2), \quad (4.57)$$

où

$$\tilde{g}_{1/2,-1}^{mPT}(y'', y'; \tilde{E}^2) = i \int_0^\infty dS \exp(i\tilde{E}^2 S) K_{1/2,-1}^{mPT}(y'', y'; S), \quad (4.58)$$

avec

$$K_{1/2,-1}^{mPT}(y'', y'; S) = \int Dy(s) \exp \left\{ \left[ i \int_0^S \frac{\dot{y}^2}{2} + \frac{A}{\cosh^2 y} \right] ds \right\}. \quad (4.59)$$

Comme la fonction de Green (4.58) a exactement la même forme que la fonction de Green (4.20)

obtenue dans le cas de la particule de Klein-Gordon, nous trouvons par la même stratégie le résultat suivant :

$$\tilde{g}_{1/2,-1}^{mPT} (y'', y'; \tilde{E}^2) = g_{1/2,-1}^{smPT} (y'', y', \tilde{E}^2) - \frac{g_{1/2,-1}^{smPT} (y'', y_0; \tilde{E}^2) g_{1/2,-1}^{smPT} (y_0, y', \tilde{E}^2)}{g_{1/2,-1}^{smPT} (y_0, y_0, \tilde{E}^2)}, \quad (4.60)$$

où  $g_{1/2,-1}^{smPT} (y'', y', \tilde{E}^2)$  est la fonction de Green relative au potentiel de Pöschl-Teller modifié et symétrique donnée par la même expression explicite de la fonction de Green (4.29) du paragraphe précédent.

### 4.3.2 Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Le spectre d'énergie des états liés est déterminé à partir des pôles de la fonction de Green (4.60). Il est donné par l'équation transcendante suivante :

$${}_2F_1 \left( \gamma, \eta, 2\nu + 1; \frac{1}{2} \right) = 0, \quad (4.61)$$

qui peut être résolue numériquement.

En utilisant la relation entre (4.57) et (4.48) pour  $\kappa = -1$  et avec la valeur propre de  $\beta$  égale à 1, la fonction de Green de deuxième ordre (4.48) peut s'écrire sous la forme :

$$g(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \sum_{\xi=\pm 1/2} (\mu + E_{n_r})^2 \varphi_{n_r}^{\xi}(\mathbf{r}'') \bar{\varphi}_{n_r}^{\xi}(\mathbf{r}'), \quad (4.62)$$

où

$$\varphi_{n_r}^{\xi}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{(\mu + E_{n_r})} \cdot \frac{F_{n_r}(r)}{r} \frac{\chi_{1/2}^{\xi}}{2\sqrt{\pi}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.63)$$

avec

$$F_{n_r}(r) = C \left( \frac{1}{e^{2r/d} + 1} \right)^{\nu} \left( \frac{e^{2r/d}}{e^{2r/d} + 1} \right)^{\nu} {}_2F_1 \left( \gamma, \eta; 2\nu + 1; \frac{1}{e^{2r/d} + 1} \right). \quad (4.64)$$

$C$  étant un facteur constant. Signalons ici que  $\varphi_{n_r}^{\xi}(\mathbf{r})$  représente la solution de l'équation de

Dirac de deuxième ordre pour les états  $s$ .

Pour trouver la fonction d'onde satisfaisant l'équation de Dirac du premier ordre, il faut éliminer les états superflus en faisant agir l'opérateur  $(\mu(r) + \mathbf{M})$  sur  $\varphi_{n_r}^\xi(\mathbf{r})$ . L'expression de l'opérateur  $(\mu(r) + \mathbf{M})$  s'écrit explicitement ainsi

$$(\mu(r) + \mathbf{M}) = \begin{pmatrix} \mu + E_{n_r} + s(r) - v(r) & i\sigma_r \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1-\kappa}{r} \right) \\ -i\sigma_r \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1+\kappa}{r} \right) & \mu - E_{n_r} + s(r) + v(r) \end{pmatrix}, \quad (4.65)$$

Alors, pour  $\kappa = -1$  et compte tenu de  $s(r) = v(r)$ , la fonction d'onde  $\Psi_{n_r}^\xi(\mathbf{r})$  obéissant à l'équation de Dirac du premier ordre est donnée par

$$\Psi_{n_r}^\xi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \frac{F_{n_r}(r)}{r} \\ \frac{-i\sigma_r}{(\mu + E_{n_r})} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{F_{n_r}(r)}{r} \right) \end{pmatrix} \cdot \frac{\chi_{1/2}^\xi}{2\sqrt{\pi}}. \quad (4.66)$$

En utilisant l'expression de la dérivée de la fonction hypergéométrique

$$\frac{d}{dz} [{}_2F_1(a, b; c; z)] = \left( \frac{ab}{c} \right) {}_2F_1(a+1, b+1; c+1; z), \quad (4.67)$$

la fonction d'onde  $\Psi_{n_r}^\xi(\mathbf{r})$  est finalement

$$\Psi_{n_r}^\xi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F_{n_r}(r) \\ -i\sigma_r \check{G}_{n_r}(r) \end{pmatrix} \cdot \frac{\chi_{1/2}^\xi}{2\sqrt{\pi}}, \quad (4.68)$$

où la composante radiale inférieure  $\check{G}_{n_r}(r)$  est donnée par

$$\begin{aligned} \check{G}_{n_r}(r) &= \frac{1}{(\mu + E_{n_r})} \left\{ \left( \frac{4\nu}{d(e^{2r/d} + 1)} - \frac{2\nu}{d} - \frac{1}{r} \right) F_{n_r}(r) \right. \\ &\quad \left. - C \frac{2\gamma\eta}{d(2\nu + 1)} \left( \frac{1}{e^{2r/d} + 1} \right)^{\nu+1} \left( \frac{e^{2r/d}}{e^{2r/d} + 1} \right)^{\nu+1} \right. \\ &\quad \left. \times {}_2F_1 \left( \gamma + 1, \eta + 1; 2(\nu + 1); \frac{1}{e^{2r/d} + 1} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Notons que la fonction d'onde (4.68) a une structure semblable à celles obtenues dans la littérature pour ce type de problèmes.

## 4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, à l'aide de l'approche des intégrales de chemin de Feynman, nous avons résolu exactement le problème de particules de Klein-Gordon et de Dirac soumises à un potentiel scalaire et un potentiel vecteur de la forme :  $\frac{V_0}{2} \tanh^2 (r/d)$ . Dans chaque cas, la fonction de Green radiale est construite par la méthode des perturbations qui consiste à introduire un potentiel auxiliaire représenté par une fonction  $\delta$  de Dirac à une barrière infranchissable. Dans les deux cas, les conditions de quantification de l'énergie sont des équations transcendentes comportant une fonction hypergéométrique dont la solution ne peut être que numérique pour déterminer les niveaux d'énergie des états liés. Il faut mentionner que l'expression de la fonction d'onde radiale  $R_{n_r}(r)$  associée à la particule de Klein-Gordon coïncide avec celle des grandes composantes  $F_{n_r}(r)$  de la fonction d'onde associée à la particule de Dirac. Enfin, nous pouvons signaler que l'étude réalisée pour une particule de Dirac dans le cas où  $v(r) = s(r)$  peut être aisément étendue au cas de la symétrie de spin  $v(r) - s(r) = C_s$  et à celui de la symétrie de pseudospin  $v(r) + s(r) = C_{ps}$ .

# Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement précis, par l'approche des intégrales de chemin de Feynman, d'un ensemble de quatre systèmes quantiques à symétrie sphérique intéressant la physique théorique et la chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons d'abord étudié le cas du potentiel radial de Rosen-Morse dépendant d'un paramètre de déformation  $q > 0$ . Pour ce problème avec les conditions aux limites de Dirichlet, la fonction de Green est construite sous forme compacte à l'aide d'un artifice de calcul. La condition de quantification de l'énergie est déterminée par une équation transcendante impliquant une fonction hypergéométrique. Cette équation peut être résolue numériquement pour connaître les niveaux d'énergie. Les fonctions d'onde sont aussi obtenues. Nous avons ensuite analysé les états liés d'une particule soumise au potentiel dit de Schiöberg déformé aussi par un paramètre  $q$ . Le traitement du problème est présenté de façon différente suivant la valeur que prend  $q$ . Nous avons distingué trois cas. Pour  $q \geq 1$  et  $r \geq \frac{1}{2\alpha} \ln q$ , la fonction de Green associée à l'onde partielle d'ordre  $l$  est calculée en adoptant une approximation appropriée pour remplacer le terme potentiel centrifuge. Nous avons trouvé un spectre d'énergie analytique qui ne dépend pas de  $q$ . Les fonctions d'onde normalisées sont également obtenues. Lorsque  $0 < q < 1$  ou  $q < 0$ , nous nous sommes limités à l'étude des états de l'onde  $s$  ( $l = 0$ ). Nous nous sommes trouvés dans une situation analogue à celle du problème précédent. Dans les deux cas ( $0 < q < 1$  et  $q < 0$ ), le spectre d'énergie est caractérisé par une équation transcendante.

Dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, nous avons d'abord examiné le problème des états liés d'une particule de Dirac placée dans un potentiel vecteur de type Hulthén déformé par un paramètre  $q \geq 1$ . Comme dans le cas du système précédent, en substituant au

terme potentiel centrifuge une expression adéquate et en diagonalisant l'opérateur de Martin-Glauber par une transformation de similarité analogue à celle utilisée par Biedenharn dans le traitement du problème de Coulomb, nous avons construit la fonction de Green radiale obéissant à l'équation de Dirac du deuxième ordre puis celle relative à l'équation de Dirac linéaire. Le spectre d'énergie est obtenu à partir des pôles de la fonction de Green. Nous avons montré clairement que les solutions de ce problème sont approximatives même pour les états  $s$  ( $l = 0$ ), contrairement aux allégations par lesquelles Guo [69] et Alhaidari [70] prétendent avoir obtenu des solutions exactes. Nous avons ensuite traité les problèmes d'une particule de Klein-Gordon et d'une particule de Dirac placées dans un champ central représenté par un potentiel vecteur et un potentiel scalaire égaux. Dans les deux cas, la fonction de Green radiale associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ;  $\kappa = -1$  pour la particule de Dirac) est obtenue sous forme compacte. Dans chaque cas, la condition de quantification de l'énergie est déterminée par une équation transcendante résoluble numériquement. Nous avons également déterminé les fonctions d'onde.

Il faut mentionner que nos résultats sont certainement corrects puisque les spectres et les fonctions d'onde concernant plusieurs cas particuliers bien connus dans la littérature ont été retrouvés.

Pour terminer, il faut souligner l'avantage de l'approche des intégrales de chemin par rapport à d'autres méthodes (Nikiforov-Uvarov, SUSYQM, algèbre de Lie et groupes, itération asymptotique . . . ) dans la recherche des résultats des problèmes avec des conditions aux limites de Dirichlet et de ceux des potentiels déformés.

## Annexe A

# Opérateur $\mathbf{M}$ et Hamiltonien effectif pour un champ central

Pour construire l'opérateur  $\mathbf{M}$  dans le cas d'un potentiel central, nous partons de l'expression donnée par

$$\mathbf{M} = -\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{P} + \beta(E - V_q(r)), \quad (\text{A.1})$$

où le vecteur  $\mathbf{P}$  est l'opérateur associé à la quantité de mouvement,  $\boldsymbol{\alpha}$  et  $\boldsymbol{\beta}$  sont des matrices hermétiques  $4 \times 4$  définies dans la représentation de Pauli par

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

$\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3)$  est un vecteur ayant les matrices de Pauli pour composantes.

En utilisant l'identité

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{A} \times \mathbf{B}), \quad (\text{A.3})$$

nous pouvons écrire

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L}) = i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{P})), \quad (\text{A.4})$$



et compte tenu de la formule

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \cdot \mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}, \quad (\text{A.5})$$

il s'ensuit que

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}) \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) = i\boldsymbol{\sigma} [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{P}) \cdot \mathbf{r} - r^2 \cdot \mathbf{P}]. \quad (\text{A.6})$$

De (A.6), nous avons

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P} = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{P} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}), \quad (\text{A.7})$$

et donc

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r})}{r} \\ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r})}{r} & 0 \end{pmatrix} \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{P}) + i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L})}{r}. \quad (\text{A.8})$$

Si, nous introduisons l'opérateur  $\mathbf{P}_r$  associé à la composante radiale de la quantité de mouvement, la vitesse radiale  $\boldsymbol{\alpha}_r$  et l'opérateur de Dirac :

$$\mathbf{P}_r = \frac{1}{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{P} - i), \quad (\text{A.9})$$

$$\boldsymbol{\alpha}_r = \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r}}{r}, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{K} = \boldsymbol{\beta} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + 1), \quad (\text{A.11})$$

l'opérateur  $\mathbf{M}$  se met sous la forme finale :

$$\mathbf{M} = -\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\alpha}_r \cdot \mathbf{P}_r + \frac{i\boldsymbol{\alpha}_r \mathbf{K}}{r} + \boldsymbol{\beta} (E - V_q(r)). \quad (\text{A.12})$$

L'Hamiltonien effectif  $\mathbf{H}$  du système est défini par :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} (\mu^2 - \mathbf{M}^2) \quad (\text{A.13})$$

Compte tenu des relations de commutation et d'anticommuration

$$\left\{ \begin{array}{l} [\mathbf{K}, \boldsymbol{\beta}] = [\mathbf{K}, \boldsymbol{\alpha}_r] = 0, \\ [\mathbf{P}, f(\mathbf{R})] = -i\nabla f(\mathbf{R}), \\ [\boldsymbol{\alpha}_r, \boldsymbol{\beta}]_+ = 0, \end{array} \right. \quad (\text{A.14})$$

et de la propriété

$$\boldsymbol{\alpha}_r^2 = \boldsymbol{\beta}^2 = 1, \quad (\text{A.15})$$

l'Hamiltonien (A.13) prend la forme :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{P}_r^2 + \frac{\mathbf{K}^2 - \boldsymbol{\beta}\mathbf{K}}{r^2} - i\boldsymbol{\alpha}_r \frac{d}{dr} V_q(r) - (E - V_q(r))^2 + \mu^2 \right). \quad (\text{A.16})$$

## Annexe B

# Transformation S de Biedenharn et diagonalisation de l'opérateur $\Gamma$ de Martin-Glauber

L'opérateur de Martin et Glauber pour une particule de Dirac dans le potentiel de Hulthén  $q$ -déformé est adapté à partir de celui introduit par ces derniers dans le cadre de l'étude de l'équation de Dirac avec le potentiel de Coulomb. Il est défini par :

$$\Gamma = - \left( \beta \mathbf{K} + i \frac{aV_0}{q} \boldsymbol{\alpha}_r \right), \quad (\text{B.1})$$

où  $\beta$  et  $\boldsymbol{\alpha}_r$  sont les matrices habituelles,  $\mathbf{K}$  est l'opérateur de Dirac,  $V_0$  et  $a$  désignent respectivement la profondeur du puits de potentiel et sa portée,  $q$  étant la paramètre de déformation du potentiel.

Pour diagonaliser l'opérateur  $\Gamma$ , nous allons employer une transformation de similarité très générale de la forme :

$$\mathbf{S} = \exp \left[ \frac{i}{2} \beta \boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right], \quad (\text{B.2})$$

où  $f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right)$  est une fonction quelconque dépendant des paramètres  $V_0$ ,  $a$ ,  $q$  et de l'opérateur de Dirac  $\mathbf{K}$ . L'opérateur  $\Gamma$  se transforme par  $\mathbf{S}$  suivant la loi

$$\mathbf{S}\mathbf{\Gamma}\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{\Gamma}_s. \quad (\text{B.3})$$

Puisque

$$[\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}_r]_+ = 0, \quad (\text{B.4})$$

et

$$[\mathbf{K}, \boldsymbol{\alpha}_r] = [\mathbf{K}, \boldsymbol{\beta}] = 0, \quad (\text{B.5})$$

il s'ensuit que

$$\mathbf{\Gamma}_s = \exp \left[ i\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] \mathbf{\Gamma}. \quad (\text{B.6})$$

Pour calculer l'opérateur  $\mathbf{\Gamma}_s$ , nous utilisons pour cela la définition d'une exponentielle d'opérateur :

$$\begin{aligned} \exp \left[ i\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] &= 1 + i\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] - \frac{1}{2!} \left[ \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^2 \\ &\quad - \frac{i}{3!} \left[ \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^3 + \frac{1}{4!} \left[ \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^4 \\ &\quad + \frac{i}{5!} \left[ \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^5 + \dots, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

En tenant compte de la relation d'anticommutation (B.4) et de  $\boldsymbol{\beta}^2 = \boldsymbol{\alpha}_r^2 = 1$ , nous obtenons en regroupant les termes pairs et impairs, le développement suivant :

$$\begin{aligned} \exp \left[ i\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] &= \left\{ 1 + \frac{1}{2!} \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^2 + \frac{1}{4!} \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^4 + \dots \right\} \\ &\quad + i\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_r \left\{ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) + \frac{1}{3!} \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^3 + \frac{1}{5!} \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]^5 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

C'est à dire finalement :

$$\begin{aligned} \Gamma_s = & -\beta \left\{ \mathbf{K} \cosh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] - \frac{aV_0}{q} \sinh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] \right\} \\ & + i\alpha_r \left\{ \mathbf{K} \sinh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] - \frac{aV_0}{q} \cosh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

En annulant le terme non diagonal, c'est à dire, en posant

$$\mathbf{K} \sinh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] - \frac{aV_0}{q} \cosh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] = 0, \quad (\text{B.10})$$

nous obtenons pour  $f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right)$  l'expression :

$$f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) = \tanh^{-1} \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right). \quad (\text{B.11})$$

Par conséquent

$$\mathbf{S} = \exp \left[ \frac{i}{2} \beta \alpha_r \tanh^{-1} \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right], \quad (\text{B.12})$$

et

$$\Gamma_s = -\beta \left\{ \mathbf{K} \cosh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] - \frac{aV_0}{q} \sinh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] \right\}. \quad (\text{B.13})$$

Pour simplifier l'expression de  $\Gamma_s$ , il est commode de remarquer que

$$\begin{cases} \cosh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]}}, \\ \sinh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] = \frac{\tanh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]}{\sqrt{1 - \tanh^2 \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right]}}, \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

et en utilisant (B.11), les équations (B.14) s'écrivent

$$\begin{cases} \cosh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] = \frac{\mathbf{K}}{\sqrt{\mathbf{K}^2 - \left( \frac{aV_0}{q} \right)^2}}, \\ \sinh \left[ f \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right) \right] = \frac{\frac{aV_0}{q}}{\sqrt{\mathbf{K}^2 - \left( \frac{aV_0}{q} \right)^2}}. \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

En reportant (B.15) dans (B.13), nous obtenons finalement

$$\mathbf{\Gamma}_s = -\beta\mathbf{K} \left[ 1 - \left( \frac{aV_0}{q\mathbf{K}} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (\text{B.16})$$

qui est la forme diagonalisée de l'opérateur de Martin-Glauber.

# Bibliographie

- [1] W. Heisenberg, *Zeitsch. f. Phys.* **33** (1925) 879 ; M. Born et P. Jordon, *Zeitsch. f. Phys.* **34** (1925) 858 ; M. Born, W. Heisenberg et P. Jordon, *Zeitsch. f. Phys.* **35** (1926) 557 ; P. M. A. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* **109** (1925) 642.
- [2] E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* **79** (1925) 361 et 489 ; **80** (1926) 437 ; **81** (1926) 109.
- [3] P. M. Dirac, *Phys. Zeitschr. d. Sowjetunion.* **3** (1933) 64.
- [4] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.
- [5] I. H. Duru et H. Kleinert, *Phys. Lett.* **B 84** (1979) 185 ; *Fortschr. Phys.* **30** (1982) 401.
- [6] C. Grosche et F. Steiner, *Handbook of Feynman Path integrals. Springer Tracts in Modern Physics* **145**. Springer, Berlin, Heidelberg, 1998.
- [7] C. Grosche, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 1.
- [8] M. M. Nieto, *Phys. Rev.* **A 17** (1978) 1273.
- [9] J. Wu, Y. Alhassid et F. Gürsey, *Ann. Phys. (Leipzig)* **196** (1989) 163.
- [10] A. F. Nikiforov et V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics* (Birkhäuser, Basel, 1988).
- [11] F. Cooper, A. Khare et U. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics* (World Scientific, Singapore, 2001).
- [12] N. Rosen et P. M. Morse, *Phys. Rev.* **42** (1932) 210.
- [13] C. H. Townes et A. L. Schawlow, *Microwave Spectroscopy* (Mc Graw-Hill, New York) 1955.
- [14] M. A. Smondryev, B. Gerlach et M. O. Dzero, *Phys. Rev.* **B 62** (2000) 16692.
- [15] L. Infeld et T. E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951) 21.

- [16] Ali R. Amani, *J. Phys. : Conf. Series* **622** (2015) 012045.
- [17] C. L. Ho, *Ann. Phys.* **324** (2009) 1095.
- [18] G. Junker et A. Inomata, *Path Integral From meV To MeV*, Bielfeld Encounters in Physics and Mathematics VII, Edited by M. C. Gutzwiller, A. Inomata, J. R. Klauder and L. Streit (World Scientific, Singapor, 1986).
- [19] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **23** (1990) 5205.
- [20] H. Kleinert et I. Mustapic, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 643.
- [21] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics Polymer Physics and Financial Markets* (fifth ed., World Scientific, Singapore, 2009).
- [22] H. Yilmaz, D. Demirhan et F. Büyükkiliç, *J. Math. Chem.* **47** (2010) 539.
- [23] F. Büyükkiliç, H. Egrifès and D. Demirhan, *Theor. Chem. Acc.* **98** (1997) 192.
- [24] H. Egrifès, D. Demirhan et F. Büyükkiliç, *Phys. Scr.* **60** (1999) 195.
- [25] H. Egrifès, D. Demirhan et F. Büyükkiliç, *Phys. Lett. A* **275** (2000) 229.
- [26] F. Taskin, *Int. J. Theor. Phys.* **48** (2009) 2692.
- [27] J. Y. Liu, X. T. Hu et C. S. Jia, *Can. J. Chem.* **92** (2014) 40.
- [28] C. S. Jia, T. Chen, L. Z. Yi et S. R. Lin, *J. Math. Chem.* **51** (2013) 2165.
- [29] A. Diaf et M. Hachama, *Can. J. Phys.* **91** (2013) 1.
- [30] A. Diaf et M. Hachama, *J. Phys. : Conf. Series*, **490** (2014) 012049.
- [31] A. D. Antia, *Am. J. Phys. Chem.* **4** (2015) 38.
- [32] C. S. Jia, Y. F. Diao, X. J. Liu, P. Q. Wang, J. Y. Liu et G. D. Zhang, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 014101.
- [33] X. T. Hu, L. H. Zhang et C. S. Jia, *Can. J. Chem.* **92** (2014) 386.
- [34] A. Arai, *J. Phys. A : Math. Gen.* **34** (2001) 4281.
- [35] D. Peak et A. Inomata, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1422.
- [36] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, *Phys. Rev. D* **22** (1980) 3012.
- [37] R. P. Feynman et A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Mc Graw Hill, New York, 1965).



- [38] S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, *Phys. Lett. A* **131** (1988) 8.
- [39] P. M. Morse, *Phys. Rev.* **34** (1929) 57.
- [40] Schiöberg D 1986 *Mol. Phys.* **59** 1123.
- [41] J. Lu, *Physica Scripta* **72** (2005) 349.
- [42] S. M. Ikhdaïr, R. Sever, *Ann. Phys. (Berlin)* **18** (2009) 747.
- [43] C. Berkdemir, *J. Math. Chem.* **46** (2009) 492.
- [44] O. Mustafa, *Phys. Scr.* **90** (2015) 065002.
- [45] C. H. Jia, X. L. Zeng, S. C. Li, L. T. Sun et Q. B. Yang, *Comm. Theor. Phys.* **37** (2002) 523.
- [46] A. Amrouche, A. Diaf et M. Hachama. *Can. J. Phys.* **95** (2017) 25.
- [47] A. Zouache, Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009, Université Mentouri de Constantine.
- [48] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri, et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 032301.
- [49] M. F. Manning et N. Rosen, *Phy. Rev.* **44** (1933) 953.
- [50] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38** (2005) 2947.
- [51] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [52] S. Dong, J. García-Ravelo et S. H. Dong, *Phys. Scr.* **76** (2007) 393.
- [53] S. Dong, S. G. Miranda, F. M. Enriquez et S. H. Dong, *Mod. Phys. Lett. B* **22** (2008) 483.
- [54] F. Benamira, S. Boudoukha et L. Guechi, *Phys. Scr.* **80** (2009) 017002.
- [55] S. M. Ikhdaïr et R. Sever, *Ann. Phys. (Berlin)*. **18** (2009) 189.
- [56] B. J. Flaye, *Few-Body Syst.* **53** (2012) 557.
- [57] A. Ghoumaid, F. Benamira et L. Guechi, *Can. J. Phys.* **91** (2013) 120.
- [58] C. A. Onate, K. J. Oyewumi et B. J. Falaye, *Few-Body Syst.* **55** (2014) 61.
- [59] O. P. Bahethi et M. G. Fuda, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 2076 ; C. S. Lam et Y. P. Varshni, *Phys. Rev. A* **4** (1971) 1874 ; H. Van Haeringen, *Phys. Rev. A* **18** (1978) 56 ; B. Durand et L. Durand, *Phys. Rev. D* **23** (1981) 1092 ; R. Dutt et Y. P. Varshni, *J. Math. Phys.* **24** (1983) 2770 ; L. Hall. *Phys. Rev. A* **32** (1985) 14.

- [60] J. Lindhard et A. Winther, Nucl. Phys. **A 166** (1971) 413; U. Myhrman, J. Math. Phys. **23** (1980) 1732; J. Phys. A : Math. Gen. **16** (1983) 263; R. Dutt, K. Chowdhury et Y. P. Varshni, J. Phys. A : Math. Gen. **18** (1985) 1379.
- [61] A. A. Berezin, Phys.Stat. Sol. (**B**) **50** (1979) 71; J. Phys. **C 12** (1972) L 363; Phys. Rev. **B 33** (1986) 2122.
- [62] J. Gruninger, J. Chem. Phys. **55** (1971) 3561; K. Szalcwicz et H. J. Mokhorst, J. Chem. Phys. **75** (1981) 5785; G. Malli, Chem. Phys. Lett. **26** (1981) 578.
- [63] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. **A 28** (1942) 5.
- [64] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer Verlag, Berlin, 1974).
- [65] E. D. Filho et R. M. Ricotta, Mod. Phys. Lett. **A 10** (1995) 1613.
- [66] B. Gonul, O. Ozer, Y. Gancelik et M. Kocak, Phys. Lett. **A 275** (2000) 238.
- [67] O. Bayrak, G. Kocak et I. Boztosun, J. Phys. A : Math. Gen. **39** (2006) 11521.
- [68] J. M. Cai, P. Y. Cai et A. Inomata, Phys. Rev. **A 34** (1986) 4621.
- [69] J. Y. Guo, J. Meng et F. X. Xu, Chin. Phys. Lett. **20** (2003) 602.
- [70] A. D. Alhaidari, J. Phys. A : Math. Gen. **37** (2004) 5805.
- [71] S. Haouat and L. Chetouani, Phys. Scr. **77** (2008) 025005.
- [72] L. C. Biedenharn, Phys. Rev. **126** (1962) 845.
- [73] G. J. Papadopoulos et J. T. Devreese, Phys. Rev. **D 13** (1976) 2227.
- [74] M. A. Kayed et A. Inomata, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 107.
- [75] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, Phys. Scr. **46** (1992) 289; Nuovo Cimento B **109** (1994) 219; B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, Nuovo Cimento B **111** (1996) 99.
- [76] C. C. Bernido, M. V. Carpio-Bernido et N. S. Lam, Phys. Lett. **A 231** (1997) 395.
- [77] J. Schwinger, Phys. Rev. **82** (1951) 664.
- [78] P. C. Martin et R. J. Glauber, Phys. Rev. **109** (1958) 1307.
- [79] M. K. F. Wong et H. Y. Yeh, Phys. Rev. **D 25** (1982) 3396.
- [80] D. W. Mc Laughlin et L. S. Schulman, J. Math. Phys. **12** (1971) 2520.

- [81] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **48** (2007) 032102.
- [82] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [83] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics* (Third ed., Mc Graw-Hill Kogakusha, Ltd Tokyo, 1968).
- [84] W. C. Qiang, *Chin. Phys.* **11** (2002) 0757.
- [85] W. C. Qiang, *Chin. Phys.* **12** (2003) 1054.
- [86] G. Chen, Z. D. Chen et Z. M. Lou, *Chin. Phys.* **13** (2004) 0279.
- [87] X. A. Zhang, K. Chen et Z. L. Duan, *Chin. Phys.* **14** (2005) 0042.
- [88] G. F. Wei et X. Y. Liu, *Phys. Scr.* **78** (2008) 065009.
- [89] X. Y. Liu, G. F. Wei et C. Y. Long, *Int. J. Theor. Phys.* **48** (2009) 463.
- [90] O. J. Oluwadare, K. J. Oyewuni, C. O. Akoshile et O. A. Babalola, *Phys. Scr.* **86** (2012) 035002.
- [91] T. T. Ibrahim, K. J. Oyewumi et S. M. Wyngaardt, *Eur. Phys. J. Plus* **127** (2012) 100.
- [92] W. C. Qiang, *Chin. Phys.* **13** (2004) 0571.
- [93] W. C. Qiang et S. H. Dong, *Phys. Scr.* **72** (2005) 127.
- [94] X. Q. Zhao, C. S. Jia et Q. B. Yang, *Phys. Lett. A* **337** (2005) 189.

# دراسة كمونات متعددة الذرات بواسطة تكامل المسار

## ملخص

يتعلق هذا العمل بدراسة صارمة باستعمال تكامل المسار لفانيمان (Feynman) لمجموعة من أربعة جمل كمية ذات تناظر كروي درست في الماضي بواسطة طرق أخرى غير مفيدة.

في إطار ميكانيك الكم اللانسي، كل من كمون روزن-مورس (Rosen-Morse) ذو التناظر الكروي و كمون شويبيرغ (Schiöberg) في شكله العام و الموصوفين بمعامل تشوه حقيقي قد تم إعادة معالجتهم بالأخذ في عين الاعتبار الشروط الحدية لدركليه (Dirichlet) عند صياغة تكامل المسار. في كل حالة، قد تم إنشاء دالة غرين (Green) في شكل تحليلي. طيف الطاقة و كذا دوال الموجة المتعلقة بالحالات المرتبطة قد تم الحصول عليها.

أما في نطاق ميكانيك الكم النسبي، قمنا أولاً بدراسة مسألة جسيمة ديراك (Dirac) تتحرك في وجود كمون شعاعي لهولتن (Hulthén) مشوه بمعامل تشوه  $q$ . من أجل  $q$  أكبر أو يساوي 1، تم بناء دالة غرين المتعلقة بالموجة | بمساعدة تحويل تماثلي مماثل لتحويل بيدنهان (Biedenharn) و كذلك تحويل مكاني-زمني، بالإضافة إلى اختيار مناسب لتقريب يحل محل الحد المتعلق بالكمون المركزي. ثانياً ناقشنا مسألة كل من جسيمة كلاين-غوردن (Klein-Gordon) و كذلك جسيمة ديراك خاضعتين في نفس الوقت إلى كمون شعاعي و كمون سلمي من نوع بوشل-تيلر (Pöschl-Teller) معدّل أخدين في الاعتبار الشروط الحدية لدركليه. في كل حالة، دالة غرين المتعلقة بالموجات  $s$  ( $l=0$ ) قد تم حسابها. طيف الطاقة و دوال الموجة قد تم استخراجها.

**الكلمات المفاتيح:** تكامل المسار، الناشر، دالة غرين، كمون روزن-مورس، كمون شويبيرغ، كمون هولتن، كمون بوشل-تيلر، حالات مرتبطة.

# Study of polyatomic potentials by path integral

## Abstract

This work concerns a rigorous treatment by the Feynman path integral of a set containing four spherically symmetric quantum systems studied in the past by means of other ineffective methods.

In the framework of nonrelativistic quantum mechanics, the radial Rosen-Morse potential and the general Schiöberg potential characterized by a real deformation parameter are re-examined by taking into consideration the Dirichlet boundary conditions when formulating the path integral. In each case, the Green's function is built in closed form. The energy spectrum as well as the wave functions corresponding to the bound states are obtained.

In the context of the relativistic quantum mechanics, we first considered the problem of a Dirac particle placed in a vector  $q$ -deformed Hulthén potential. For  $q \geq 1$ , The Green's function associated with  $l$  wave is constructed with the help of a similarity transformation analog with that of Biedenharn and of a space-time transformation, in addition to the choice of an adequate approximation to replace the centrifugal potential term. We then discussed the problems of a Klein-Gordon particle and a Dirac particle subjected in the same time to a vector potential and a scalar potential of the modified Pöschl-Teller-type by considering the Dirichlet boundary conditions. In each case, the Green's function associated with  $s$ -waves ( $l = 0$ ) is calculated. The energy spectrum and the wave functions are deduced.

**Key words :** Path integral, propagator, Green's function, Rosen-Morse potential, Schiöberg potential, Hulthén potential, Pöschl-Teller potential, bound states.

# Résumé

Ce travail concerne un traitement rigoureux par l'intégrale de chemin de Feynman d'un ensemble de quatre systèmes quantiques à symétrie sphérique étudiés dans le passé au moyen d'autres méthodes inopérantes.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, le potentiel radial de Rosen-Morse et le potentiel général de Schiöberg caractérisés par un paramètre réel de déformation sont réexaminés en prenant en considération les conditions aux limites de Dirichlet lors de la formulation de l'intégrale de chemin. Dans chaque cas, la fonction de Green est construite sous forme compacte. Le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde correspondant aux états liés sont obtenus.

Dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, nous avons d'abord considéré le problème d'une particule de Dirac placée dans un potentiel vecteur de Hulthén  $q$ -déformé. Pour  $q \geq 1$ , la fonction de Green associée à l'onde  $l$  est construite à l'aide d'une transformation de similarité analogue à celle de Biedenharn et d'une transformation spatio-temporelle, en plus du choix d'une approximation adéquate pour remplacer le terme potentiel centrifuge. Nous avons ensuite discuté les problèmes d'une particule de Klein-Gordon et d'une particule de Dirac soumise à la fois à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type Pöschl-Teller modifié en envisageant les conditions aux limites de Dirichlet. Dans chaque cas, la fonction de Green associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) est calculée. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde sont déduits.

**Mots clés :** Intégrale de chemin, propagateur, fonction de Green, potentiel de Rosen-Morse, potentiel de Schiöberg, potentiel de Hulthén, potentiel de Pöschl-Teller, états liés.