

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE FRERES MENTOURI CONSTANTINE 1
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre : 86 / D 3 C / 2018

Série : 06 / P h y / 2018

THESE
PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT DE
3EME CYCLE (LMD) EN PHYSIQUE
SPECIALITE : PHYSIQUE THEORIQUE
THEME

Etude complète de certains potentiels diatomiques déformés
par l'intégrale de chemin de Feynman

Par

Asma Khodja

Soutenue le 01/07/2018

devant le Jury :

Président :	F. Benamira	Prof.	Univ. Frères Mentouri Constantine 1
Rapporteur :	L. Guechi	Prof.	Univ. Frères Mentouri Constantine 1
Examineurs :	F. Benrachi	Prof.	Univ. Frères Mentouri Constantine 1
	M. T. Meftah	Prof.	Univ. Kasdi Merbah Ouargla

Remerciements

Ce mémoire conclue mon travail de thèse réalisé au Laboratoire de physique Théorique du Département de Physique de l'université frères Mentouri de Constantine.

Je tiens d'abord à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Le Professeur **Larbi GUECHI**, de m'avoir accueilli au sein de son équipe de recherche. J'ai accompli mon travail de thèse dans les meilleures conditions. Je le remercie pour m'avoir proposé ce sujet puis encadré avec compétence, efficacité et une patience sans bornes. Je pense avoir reçu son message sur la rigueur dans toute entreprise de recherche et j'espère pouvoir l'honorer dans le futur.

Je remercie ensuite fortement Monsieur **Farid BENAMIRA**, Professeur à l'université frères Mentouri de Constantine et directeur du Laboratoire de Physique Théorique de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de cette thèse.

Je remercie également et tout particulièrement Madame **Fatima BENRACHI**, Professeur à l'université frères Mentouri de Constantine et Monsieur **Mohamed Tayeb MEFTAH**, Professeur à l'université de Ouargla d'avoir accepté avec gentillesse d'examiner ce travail.

Enfin, je n'oublie pas de remercier mes **parents**. Leur soutien et leurs encouragements m'ont donné de bonnes raisons pour progresser dans mon travail. J'espère être toujours digne de leur confiance et les laisser fiers de moi.

Table des matières

Introduction	4
1 Généralités sur les intégrales de chemin	7
1.1 Introduction	7
1.2 Intégrale de chemin en coordonnées polaires	8
1.3 Transformations spatio-temporelles	13
1.3.1 Transformation spatiale	13
1.3.2 Reparamétrisation des chemins	15
1.3.3 Cas d'un potentiel singulier	16
1.4 Intégrale de chemin pour une particule de Klein-Gordon	20
1.5 Méthode des perturbations	24
2 Mouvement d'une particule dans le potentiel de Tietz amélioré	28
2.1 Introduction	28
2.2 Fonction de Green	30
2.3 Potentiel de Manning-Rosen modifié et déformé	31
2.3.1 Premier cas : $ q \geq 1$ et $r_0 < r < \infty$	32
2.3.2 Deuxième cas : $0 < q < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$	38
2.4 Potentiel de Rosen-Morse modifié et déformé	40
2.5 Potentiel de Morse	43
2.6 Conclusion	46

3	Mouvement d'une particule dans le potentiel de Tietz-Wei	48
3.1	Introduction	48
3.2	Fonction de Green	50
3.3	Potentiel de Manning-Rosen déformé	51
3.3.1	Premier cas : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$	51
3.3.2	Deuxième cas : $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$	55
3.4	Potentiel de Rosen-Morse déformé	57
3.5	Potentiel de Morse	60
3.6	Conclusion	61
4	Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Rosen-Morse déformé	62
4.1	Introduction	62
4.2	Fonction de Green	64
4.3	Potentils radiaux de Manning-Rosen déformés	67
4.3.1	Premier cas : $q \leq -1$	67
4.3.2	Deuxième cas : $-1 < q < 0$ et $r \in \mathbb{R}^+$	69
4.4	Potentils radiaux de Rosen-Morse	72
4.5	Cas particuliers	76
4.5.1	Premier cas : potentiels de Manning-Rosen standard	76
4.5.2	Deuxième cas : potentiels de Rosen-Morse standard	77
4.5.3	Troisième cas : potentiel de Eckart	77
4.5.4	Conclusion	78
5	Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Tietz amélioré	79
5.1	Introduction	79
5.2	Fonction de Green	81
5.3	Potentils de Hulthén généralisés	84
5.3.1	Premier cas : $q \leq -1$	85
5.3.2	Deuxième cas : $-1 < q < 0$ et $r \in \mathbb{R}^+$	90

5.4	Potentiels de Woods- Saxon generalisés	93
5.5	Cas particuliers	96
5.5.1	Premier cas : potentiels de Hulthén standard	96
5.5.2	Deuxième cas : potentiels de Woods-Saxon	97
5.5.3	Troisième cas : potentiels de Morse	98
5.6	Conclusion	99
6	Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Tietz-Wei	101
6.1	Introduction	101
6.2	Fonction de Green	102
6.3	Potentiels radiaux de Manning-Rosen déformés	105
6.3.1	Premier cas : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$	105
6.3.2	Deuxième cas : $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ et $r \in \mathbb{R}^+$	108
6.4	Potentiels radiaux de Rosen-Morse	110
6.5	Potentiels de Morse	114
6.6	conclusion	116
	Conclusion	118
	Bibliographie	121

Introduction

Peu de temps après la fondation de la mécanique quantique dans les années trente [1, 2] et le succès de la résolution de l'équation d'onde d'une particule dans le potentiel de Coulomb par Schrödinger, un progrès considérable est fait dans la recherche des modèles de potentiels pour décrire de façon réaliste des interactions nucléaires, inter-atomiques ou moléculaires. À titre d'exemples, dans le domaine de la physique moléculaire, nous pouvons citer, en premier lieu, le potentiel à une dimension introduit en 1932 par Rosen et Morse pour traiter analytiquement les états de vibration des molécules poly-atomiques [3], suivi de la fonction potentielle suggérée par Manning et Rosen en 1933 pour étudier les vibrations des molécules diatomiques [4] et dans le domaine nucléaire, il y a le potentiel d'interaction entre un neutron et un proton proposé en 1935 par Yukawa [5]. Dans un espace à trois dimensions, ces potentiels appartiennent à deux vastes classes de potentiels dits potentiels de Natanzon [6] à symétrie sphérique qui dépendent de six paramètres indépendants : h_0 , h_1 , f , a , b_0 , et c_0 . Les paramètres h_0 , h_1 et f apparaissent dans l'expression du potentiel radial $U(r)$ et les trois autres sont contenus dans la transformation qui convertit l'équation de Schrödinger radiale en une équation différentielle hypergéométrique. Il existe deux types de potentiels de Natanzon. Le type confluent (par référence à l'équation différentielle confluyente) comporte l'oscillateur harmonique radial, le potentiel de coulomb et le potentiel de Morse radial comme des cas particuliers et le type hypergéométrique contient des potentiels à symétrie sphérique tels que le potentiel de Pöschl-Teller général [7], le potentiel de Rosen-Morse général [3], le potentiel de Manning-Rosen [4] et le potentiel de Eckart [8]. Chaque type de potentiel résulte d'un choix particulier des paramètres h_0 , h_1 , f , a , b_0 , et c_0 .

L'élaboration des modèles de potentiels par les théoriciens ne se fait pas seulement par une modification des potentiels élémentaires (le potentiel de l'oscillateur harmonique, le potentiel

de Coulomb, le potentiel de Morse), mais aussi par une déformation paramétrique qui remonte à une vingtaine d'années. Ce nouveau type de potentiels construits sur la base d'une déformation des potentiels hyperboliques en introduisant un paramètre réel q est dû à Arai [9] dans une étude d'une classe de potentiels invariants de forme réalisée dans le cadre de la supersymétrie en mécanique quantique. L'introduction du paramètre q sert comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions inter-atomiques et en outre, dans un problème radial, le paramètre q permet, en particulier, de définir la position du centre de masse de la molécule par rapport à l'origine des coordonnées.

Cependant, il faut noter que la méthode de Natanzon qui consiste à transformer l'équation de Schrödinger radiale en une équation différentielle hypergéométrique et l'approche de l'algèbre de Lie $SO(2, 2)$ proposée par Wu et coll. [10] ne permettent pas de traiter de façon unifiée à la fois la classe de potentiels qui comporte le potentiel de Pöschl-Teller radial, le potentiel de Manning-Rosen radial et le potentiel de Rosen-Morse radial. Ce dernier potentiel figure également dans un travail effectué par Barut et coll. [11] dans le cadre d'une méthode basée sur l'algèbre du groupe de Lie non compact $SO(2, 1)$. Il faut signaler que le spectre d'énergie défini par l'équation,

$$\sqrt{f + 1 - aE_n} - \sqrt{h_0 + 1 - c_0E_n} - \sqrt{h_1 + 1 - c_1E_n} = 2n + 1,$$

et les fonctions d'onde des états liés exprimées en termes des polynômes de Jacobi obtenus dans les travaux de Natanzon et de Wu et coll. ne sont pas satisfaisants. La raison est simple : il s'agit d'un problème avec une condition à la limite de Dirichlet au point $r = 0$ puisque dans ce cas, le mouvement a lieu dans le demi-espace $r > 0$. Comme la théorie des groupes est construite sur la base de la méthode de factorisation de Infeld-Hull-Miller [12], elle se heurte à la difficulté d'incorporation des conditions aux limites de Dirichlet. Dans une autre étude [13], une solution incorrecte de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Rosen-Morse radial (appelé aussi potentiel de Pöschl-Teller modifié radial) a été proposée pour les ondes $s(l = 0)$ à partir de celle avec le potentiel de Rosen-Morse symétrique en imposant que la fonction d'onde générale doit avoir des dérivées continues à l'origine pour garder uniquement les solutions impaires.

Le but de ce travail est d'étudier en détail, par l'intermédiaire du formalisme simplifié des in-

tégrales de chemin de Feynman, divers systèmes dynamiques importants en physique théorique (nucléaire, atomique ou moléculaire) et en chimie quantique. Il s'agit en fait de réexaminer rigoureusement ces systèmes dynamiques discutés récemment à l'aide d'autres méthodes inappropriées.

Ce mémoire comporte six chapitres. Le premier chapitre est consacré à une présentation simplifiée du formalisme des intégrales de chemin en coordonnées polaires dans un espace Euclidien à trois dimensions, de la technique des transformations d'espace-temps et de la théorie des perturbations pour résoudre des problèmes avec des conditions aux limites de Dirichlet. Nous abordons ensuite le domaine des applications, en commençant par la plus simple relative au problème du mouvement d'une particule dans le potentiel de Tietz amélioré dans le chapitre 2. Nous étudions en détail les états liés du système quantique en distinguant tous les cas définis par le paramètre q de déformation. Dans chaque cas, nous calculons la fonction de Green pour déduire l'équation d'énergie et les fonctions d'onde. Le chapitre 3 concerne l'analyse du problème d'une molécule diatomique placée dans le potentiel de Tietz-Wei dépendant en particulier d'un paramètre réel de déformation $-1 < c_h < 1$. Comme dans le chapitre précédent, nous nous intéressons au problème des états liés en suivant une démarche similaire pour construire la fonction de Green radiale et donner le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde en considérant tous les cas caractérisés par le paramètre d'optimisation c_h . Le chapitre 4 traite le problème d'une particule relativiste sans spin, de masse M et de charge $(-e)$, en mouvement dans une mixture de potentiels composée d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux et dont la forme est celle du potentiel de Rosen-Morse radial q -déformé. Le problème de la construction de la fonction de Green se présente ici aussi de façon différente suivant la valeur que prend le paramètre q de déformation. Nous déduisons la condition de quantification de l'énergie et les fonctions d'onde. Enfin, les chapitres 5 et 6 reprennent respectivement la discussion du potentiel de Tietz amélioré et du potentiel de Tietz-Wei dans le cadre relativiste (particule sans spin).

Une partie de ce travail de recherche original a donné lieu à trois publications dans des revues de renom international.

Chapitre 1

Généralités sur les intégrales de chemin

1.1 Introduction

Ce chapitre est destiné à exposer de manière simplifiée un ensemble de notions de base de l'intégrale de chemin et des techniques d'intégration des chemins qui nous serviront par la suite dans la discussion des problèmes que nous nous proposons d'aborder dans cet ouvrage.

Le paragraphe 2 est consacré à la formulation de l'intégrale de chemin pour une particule non relativiste dans un potentiel central $V(r)$. Le traitement général est présenté en coordonnées polaires dans l'espace des phases. Nous montrons que l'intégrale de chemin se décompose en deux parties : une partie angulaire et une autre radiale. Le paragraphe 3 rappelle les techniques de transformations qui sont en général une combinaison d'une transformation spatiale et d'une transformation temporelle dite couramment reparamétrisation des chemins. L'introduction d'une fonction régulatrice est aussi abordée dans le cas d'un potentiel singulier. Dans le paragraphe 4, nous formulons l'intégrale de chemin pour une particule de Klein-Gordon en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire. Enfin, dans le paragraphe 5, nous présentons succinctement la méthode des perturbations appliquée à un problème avec les conditions aux limites de Dirichlet.

1.2 Intégrale de chemin en coordonnées polaires

Considérons une particule de masse μ en mouvement dans un potentiel à symétrie sphérique. Si \vec{P} est l'impulsion de la particule, \vec{r} son vecteur position, l'Hamiltonien est

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + V(r). \quad (1.1)$$

Pour exprimer H à l'aide d'opérateurs hermitiques, nous construisons les opérateurs suivants associés aux composantes de l'impulsion :

$$P_a = \frac{\hbar}{i} \left(\partial_a + \frac{\Gamma_a}{2} \right); \quad (a = r, \theta, \varphi), \quad (1.2)$$

où les symboles de Christoffel Γ_a sont définis par :

$$\Gamma_a = \partial_a (\ln \sqrt{g}). \quad (1.3)$$

g étant le déterminant du tenseur métrique $g_{ab} = \text{diag}(1, r^2, r^2 \sin^2 \theta)$.

L'Hamiltonien (1.1) s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{LB} + V(r), \quad (1.4)$$

avec Δ_{LB} l'opérateur de Laplace-Beltrami donné par :

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_a g^{ab} \sqrt{g} \partial_b, \quad (1.5)$$

où g^{ab} est le tenseur réciproque du tenseur g_{ab} . Ses composantes sont définies par :

$$g^{ab} = \frac{\text{cofacteur de } g_{ab}}{g}. \quad (1.6)$$

En termes des opérateurs (1.2), l'Hamiltonien (1.4) se met sous la forme :

$$H = \frac{P_r^2}{2\mu} + \frac{P_\theta^2 - \frac{\hbar^2}{4}}{2\mu r^2} + \frac{P_\varphi^2 - \frac{\hbar^2}{4}}{2\mu r^2 \sin^2 \theta} + V(r). \quad (1.7)$$

Pour construire l'intégrale de chemin, nous considérons les états propres $|\vec{r}\rangle$ avec la propriété

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r}'' | \vec{r}' \rangle &= \delta(\vec{r}'' - \vec{r}') \\
&= \left(r''^2 r'^2 \sin \theta'' \sin \theta' \right)^{-1/2} \delta(r'' - r') \delta(\theta'' - \theta') \delta(\varphi'' - \varphi'), \quad (1.8)
\end{aligned}$$

et le propagateur infinitésimal

$$K(\vec{r}_n, t_n; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}) = \langle \vec{r}_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H} | \vec{r}_{n-1} \rangle. \quad (1.9)$$

À $\varepsilon = t_n - t_{n-1} \rightarrow 0$, l'élément de matrice (1.9) s'écrit

$$\langle \vec{r}_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H} | \vec{r}_{n-1} \rangle \approx \langle \vec{r}_n | \vec{r}_{n-1} \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \langle \vec{r}_n | H | \vec{r}_{n-1} \rangle. \quad (1.10)$$

En tenant compte de la relation

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r}_n | \vec{r}_{n-1} \rangle &= \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1}) \\
&= \left(r_n^2 r_{n-1}^2 \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \right)^{-\frac{1}{2}} \delta(r_n - r_{n-1}) \delta(\theta_n - \theta_{n-1}) \delta(\varphi_n - \varphi_{n-1}) \\
&= \left(r_n^2 r_{n-1}^2 \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \right)^{-\frac{1}{2}} \int \frac{dP_{r_n}}{2\pi\hbar} \frac{dP_{\theta_n}}{2\pi\hbar} \frac{dP_{\varphi_n}}{2\pi\hbar} \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[P_{r_n} (r_n - r_{n-1}) + P_{\theta_n} (\theta_n - \theta_{n-1}) + P_{\varphi_n} (\varphi_n - \varphi_{n-1}) \right] \right\}, \quad (1.11)
\end{aligned}$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}
K(\vec{r}_n, t_n; \vec{r}_{n-1}, t_{n-1}) &\approx \left(r_n^2 r_{n-1}^2 \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \right)^{-\frac{1}{2}} \int \frac{dP_{r_n}}{2\pi\hbar} \frac{dP_{\theta_n}}{2\pi\hbar} \frac{dP_{\varphi_n}}{2\pi\hbar} \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[P_{r_n} \Delta r_n + P_{\theta_n} \Delta \theta_n + P_{\varphi_n} \Delta \varphi_n - \varepsilon H(n, n-1) \right] \right\}, \quad (1.12)
\end{aligned}$$

où

$$H(n, n-1) = \frac{P_{r_n}^2}{2\mu} + \frac{P_{\theta_n}^2 - \frac{\hbar^2}{4}}{2\mu r_n r_{n-1}} + \frac{P_{\varphi_n}^2 - \frac{\hbar^2}{4}}{2\mu r_n r_{n-1} \sin \theta_n \sin \theta_{n-1}} + V(r_n). \quad (1.13)$$

En utilisant la formule du produit de Trotter

$$e^{-\frac{i}{\hbar}HT} = e^{-\frac{i}{\hbar}(A+B)T} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}A \frac{T}{N}} e^{-\frac{i}{\hbar}B \frac{T}{N}} \right)^N, \quad (1.14)$$

et l'équation (1.12), le propagateur s'écrit dans l'espace des phases

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int d\vec{r}_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \langle \vec{r}_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H} | \vec{r}_{n-1} \rangle \\ &= (r''^2 r'^2 \sin \theta'' \sin \theta')^{-\frac{1}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n d\theta_n d\varphi_n \right] \\ &\quad \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dP_{r_n}}{2\pi\hbar} \frac{dP_{\theta_n}}{2\pi\hbar} \frac{dP_{\varphi_n}}{2\pi\hbar} \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [P_{r_n} \Delta r_n + P_{\theta_n} \Delta \theta_n + P_{\varphi_n} \Delta \varphi_n - \varepsilon H(n, n-1)] \right\}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

L'intégration sur les variables P_{θ_n} et P_{φ_n} de cette équation donne

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \prod_{n=1}^N \left[\int r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\varphi_n \right] \\ &\quad \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dP_{r_n}}{2\pi\hbar} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} S(n, n-1) \right], \end{aligned} \quad (1.16)$$

où

$$\begin{aligned} S(n, n-1) &= P_{r_n} \Delta r_n - \varepsilon \left[\frac{P_{r_n}^2}{2\mu} + V(r_n) - \frac{\hbar^2}{8\mu r_n r_{n-1}} \left(1 + \frac{1}{\sin \theta_n \sin \theta_{n-1}} \right) \right] \\ &\quad + \frac{\mu}{2\varepsilon} r_n r_{n-1} (\Delta \theta_n)^2 + \frac{\mu}{2\varepsilon} r_n r_{n-1} \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} (\Delta \varphi_n)^2. \end{aligned} \quad (1.17)$$

À ce stade, nous notons que la variable r_n et les variables angulaires (θ_n, φ_n) ne sont pas séparées. Pour exprimer autrement les termes en $(\Delta\theta_n)$ et $(\Delta\varphi_n)$ de l'action, nous pouvons indiquer que

$$\cos(\Delta\theta_n) \approx 1 - \frac{(\Delta\theta_n)^2}{2!} + \frac{(\Delta\theta_n)^4}{4!}, \quad (1.18)$$

et au moyen de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [14], nous pouvons effectuer les substitutions suivantes :

$$(\Delta\theta_n)^4 \rightarrow \frac{3}{(r_n r_{n-1})^2} \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{\mu} \right)^2, \quad (1.19)$$

$$(\Delta\varphi_n)^4 \rightarrow \frac{3}{(r_n r_{n-1} \sin\theta_n \sin\theta_{n-1})^2} \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{\mu} \right)^2. \quad (1.20)$$

Par suite,

$$\frac{\mu}{2\varepsilon} r_n r_{n-1} (\Delta\theta_n)^2 \simeq \frac{\mu r_n r_{n-1}}{\varepsilon} [1 - \cos(\Delta\theta_n)] - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu r_n r_{n-1}}, \quad (1.21)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{2\varepsilon} r_n r_{n-1} \sin\theta_n \sin\theta_{n-1} (\Delta\varphi_n)^2 &\simeq \frac{\mu r_n r_{n-1}}{\varepsilon} \sin\theta_n \sin\theta_{n-1} [1 - \cos(\Delta\varphi_n)] \\ &\quad - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu r_n r_{n-1} \sin\theta_n \sin\theta_{n-1}}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

En sommant les expressions (1.21) et (1.22), nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{2\varepsilon} r_n r_{n-1} \left[(\Delta\theta_n)^2 + \sin\theta_n \sin\theta_{n-1} (\Delta\varphi_n)^2 \right] &\simeq \frac{\mu}{\varepsilon} r_n r_{n-1} [1 - \cos\Theta_n] \\ &\quad - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu r_n r_{n-1}} \left(1 + \frac{1}{\sin\theta_n \sin\theta_{n-1}} \right), \end{aligned} \quad (1.23)$$

où

$$\cos \Theta_n = \cos \theta_n \cos \theta_{n-1} + \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \cos (\Delta \varphi_n). \quad (1.24)$$

En reportant (1.23) dans (1.17), l'action élémentaire se réécrit sous la forme :

$$S(n, n-1) \approx P_{nr} \Delta r_n - \varepsilon \left[\frac{P_{r_n}^2}{2\mu} + V(r_n) \right] + \frac{\mu}{\varepsilon} r_n r_{n-1} [1 - \cos \Theta_n]. \quad (1.25)$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \prod_{n=1}^N \left[\int r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\varphi_n \right] \\ &\times \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dP_{r_n}}{2\pi\hbar} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} S(n, n-1) \right\}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Maintenant, nous pouvons nous servir de la formule (voir Ref. [15], Eq. (8.534), p. 980)

$$e^{z \cos \Theta_n} = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \sum_{l_n=0}^{\infty} (2l_n + 1) I_{l_n + \frac{1}{2}}(z) P_{l_n}(\cos \Theta_n), \quad (1.27)$$

en tenant compte du théorème d'addition (voir Ref. [15], Eq. (8.794.1), p. 1013)

$$P_{l_n}(\cos \Theta_n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{(l_n - m)!}{(l_n + m)!} P_{l_n}^{m_n}(\cos \theta_n) P_{l_n}^{m_n}(\cos \theta_{n-1}) e^{im_n(\varphi_n - \varphi_{n-1})}, \quad (1.28)$$

où $P_l^m(\cos \theta)$ sont des fonctions de Legendre avec la propriété d'orthogonalité

$$\int_0^{\pi} P_l^m(\cos \theta_n) P_{l'}^{m'}(\cos \theta_n) \sin \theta_n d\theta_n = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l,l'}, \quad (1.29)$$

et

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi_n} d\varphi_n = 2\pi \delta_{m,m'}, \quad (1.30)$$

pour effectuer les intégrations sur les variables θ_n et φ_n . En utilisant ensuite le comportement asymptotique (voir Ref. [15], Eq. (8.451), p. 961) de la fonction de Bessel modifiée, pour ε petit :

$$I_m \left(\frac{u}{\varepsilon} \right) \approx \left(\frac{\varepsilon}{2\pi u} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{u}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon}{2u} \left(m^2 - \frac{1}{4} \right) \right], \quad (1.31)$$

tous calculs faits, le propagateur (1.26) se développe en ondes partielles sphériques ainsi :

$$K \left(\vec{r}'' , \vec{r}' ; T \right) = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} K_l (r'' , r' ; T) P_l (\cos \Theta), \quad (1.32)$$

où $P_l (\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos (\varphi'' - \varphi')$ et $K_l (r'' , r' ; T)$ est le propagateur radial défini par :

$$\begin{aligned} K_l (r'' , r' ; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi\hbar} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(P_r)_n \Delta r_n - \varepsilon H_l (n, n-1)] \right\}. \end{aligned} \quad (1.33)$$

avec

$$H_l (n, n-1) = \frac{(P_r)_n^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r_n r_{n-1}} + V(r_n). \quad (1.34)$$

1.3 Transformations spatio-temporelles

1.3.1 Transformation spatiale

Afin de faciliter, dans certains cas, le calcul de l'intégrale de chemin, nous sommes amenés à effectuer un changement de variable qui n'est pas aussi simple comme dans le cadre des équations différentielles. Considérons un système quantique à une dimension caractérisé par le Lagrangien

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} \mu \dot{x}^2 - V(x), \quad (1.35)$$

dans lequel le potentiel $V(x)$ est une fonction compliquée qui nécessite une transformation spatiale pour simplifier l'évaluation de l'intégrale de chemin. Supposons que nous devons faire le changement de variable $x \rightarrow \xi$, défini par :

$$x = g(\xi). \quad (1.36)$$

Dans ce cas, le Lagrangien (1.35) devient

$$L(\xi, \dot{\xi}; t) = \frac{1}{2}\mu [g'(\xi)]^2 \dot{\xi}^2 - V(\xi), \quad (1.37)$$

où $g'(\xi) = \frac{d}{d\xi}g(\xi)$.

Pour appliquer la transformation spatiale (1.36) à l'expression de l'action élémentaire

$$\mathcal{A}_n = \frac{\mu}{2\varepsilon} (\Delta x_n)^2 - \varepsilon V(\tilde{x}_n); \quad \tilde{x}_n = \frac{x_n + x_{n-1}}{2}, \quad (1.38)$$

nous écrivons

$$x_n = g(\xi_n), \quad (1.39)$$

et en adoptant un développement limité autour du point moyen $\tilde{\xi} = \frac{\xi_n + \xi_{n-1}}{2}$, un calcul simple donne

$$(\Delta x_n)^2 \approx [g'(\tilde{\xi}_n)]^2 (\Delta \xi_n)^2 + \frac{1}{12} g'(\tilde{\xi}_n) g'''(\tilde{\xi}_n) (\Delta \xi_n)^4. \quad (1.40)$$

En substituant ce développement dans (1.38), nous obtenons l'action élémentaire en termes de la nouvelle variable,

$$\mathcal{A}_n \approx \frac{\mu}{2\varepsilon} \left([g'(\tilde{\xi}_n)]^2 (\Delta \xi_n)^2 + \frac{1}{12} g'(\tilde{\xi}_n) g'''(\tilde{\xi}_n) (\Delta \xi_n)^4 \right) - \varepsilon V(\tilde{\xi}_n). \quad (1.41)$$

Nous remarquons que la transformation spatiale (1.36) simplifie l'expression du potentiel, mais dans le terme énergie cinétique, la masse devient explicitement dépendante de la nouvelle variable ξ .

1.3.2 Reparamétrisation des chemins

Pour rendre le terme énergie cinétique indépendant du changement de variable, nous appliquons une transformation temporelle définie par :

$$\frac{dt}{ds} = g'^2(\xi), \quad (1.42)$$

où s est le nouveau paramètre temporel. Sous forme discrète, l'expression symétrique de cette transformation s'écrit

$$\begin{aligned} \varepsilon &= g'(\xi_n) g'(\xi_{n-1}) \sigma_n \\ &\approx g'^2(\tilde{\xi}_n) \left[1 + \frac{(\Delta\xi_n)^2}{4} \left(\frac{g'''(\tilde{\xi}_n)}{g'(\tilde{\xi}_n)} - \frac{g''^2(\tilde{\xi}_n)}{g'^2(\tilde{\xi}_n)} \right) \right] \sigma_n. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Compte tenu de (1.43), l'action élémentaire (1.41) se récrit

$$\mathcal{A}_n = \frac{\mu}{2\sigma_n} (\Delta\xi_n)^2 + \frac{\mu}{8\sigma_n} \left(\frac{g''^2(\tilde{\xi}_n)}{g'^2(\tilde{\xi}_n)} - \frac{2}{3} \frac{g'''(\tilde{\xi}_n)}{g'(\tilde{\xi}_n)} \right) (\Delta\xi_n)^4 - g'^2(\tilde{\xi}_n) V(\tilde{\xi}_n). \quad (1.44)$$

Notons que, sous les transformations spatiale (1.36) et temporelle (1.42), le développement de la mesure et de l'action autour du point moyen fait apparaître un terme en $(\Delta\xi_n)^4$ qui s'exprime sous la forme d'une correction quantique calculable à l'aide de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [14]. En se servant de la formule :

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left[\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i\mu}{2\hbar\sigma_n} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3 \left(\frac{\hbar\sigma_n}{\mu} \right)^2, \quad (1.45)$$

nous pouvons écrire le propagateur ainsi :

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= \frac{1}{\sqrt{g'(x'') g'(x')}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\times \prod_{n=1}^N \left[\int d\xi_n \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu}{2\sigma_n} (\Delta\xi_n)^2 \right. \right. \\
&\left. \left. - \frac{3\hbar^2}{8\mu} \left(\frac{g''^2(\tilde{\xi}_n)}{g'^2(\tilde{\xi}_n)} - \frac{2}{3} \frac{g'''(\tilde{\xi}_n)}{g'(\tilde{\xi}_n)} \right) \sigma_n - g'^2(\tilde{\xi}_n) V(\tilde{\xi}_n) \sigma_n \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{1.46}$$

La fonction de Green

$$G(x'', x'; E) = \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K(x'', x'; T), \tag{1.47}$$

peut maintenant être évaluée en insérant la transformation temporelle globale $dT = g'(\xi') g'(\xi'') dS$ et le propagateur (1.47). Ce qui donne

$$G(x'', x'; E) = \sqrt{g'(\xi'') g'(\xi')} \int_0^\infty dSP(\xi'', \xi'; S), \tag{1.48}$$

où

$$\begin{aligned}
P(\xi'', \xi'; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\xi_n \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu}{2\sigma_n} (\Delta\xi_n)^2 \right. \right. \\
&\left. \left. - \frac{3\hbar^2}{8\mu} \left(\frac{g''^2(\tilde{\xi}_n)}{g'^2(\tilde{\xi}_n)} - \frac{2}{3} \frac{g'''(\tilde{\xi}_n)}{g'(\tilde{\xi}_n)} \right) \sigma_n + g'^2(\tilde{\xi}_n) (E - V(\tilde{\xi}_n)) \sigma_n \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{1.49}$$

1.3.3 Cas d'un potentiel singulier

Supposons que le potentiel $V(x)$ possède une singularité à l'origine. Dans ce cas, le propagateur de Feynman $K(x'', x'; T)$ n'est pas défini à cause de l'affaissement des chemins. Suivant Kleinert [16], on peut contourner ce problème en partant de l'opérateur résolvante

$$\hat{G}(E) = \frac{i\hbar}{E - \hat{H} + i0} \quad (1.50)$$

et en définissant \hat{f}_l et \hat{f}_r deux opérateurs qui dépendent de l'opérateur \hat{x} associé à la position et appelés fonctions régulatrices. On suppose que

$$\hat{f}_l = \hat{f}^{1-\lambda} \quad \text{et} \quad \hat{f}_r = \hat{f}^\lambda, \quad (1.51)$$

et que

$$\hat{f}_l \hat{f}_r = \hat{f}. \quad (1.52)$$

λ étant le paramètre de fractionnement. On peut écrire (1.50) ainsi :

$$\hat{G}(E) = \hat{f}_r \frac{i\hbar}{\hat{f}_l (E - \hat{H} + i0) \hat{f}_r} \hat{f}_l. \quad (1.53)$$

En se servant de l'expression de l'opérateur $\frac{i\hbar}{\hat{f}_l (E - \hat{H} + i0) \hat{f}_r}$ dans la représentation de Schwinger [17], on peut associer à l'opérateur résolvante (1.50) un élément de matrice dans l'espace des configurations appelé amplitude de transition pour une énergie fixée ou fonction de Green

$$\begin{aligned} \langle x'' | \hat{G}(E) | x' \rangle &= G(x'', x'; E) \\ &= f_r(x'') f_l(x') \int_0^\infty dS \langle x'' | \hat{U}_E(S) | x' \rangle, \end{aligned} \quad (1.54)$$

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

$$\hat{U}_E(S) = e^{-\frac{i}{\hbar} S \hat{f}_l(\hat{x})(\hat{H} - E) \hat{f}_r(\hat{x})}. \quad (1.55)$$

Subdivisons l'intervalle de pseudo-temps S en $N + 1$ intervalles infinitésimaux ε_s et décomposons l'opérateur (1.55) en $N + 1$ opérateurs élémentaires ainsi :

$$\hat{U}_E(S) = \hat{U}_E(S - s_N) \hat{U}_E(s_N - s_{N-1}) \dots \hat{U}_E(s_n - s_{n-1}) \dots \hat{U}_E(s_1) \quad (1.56)$$

et insérons ensuite N relations de fermeture de la forme $\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n| = 1$ entre les opérateurs pseudo-temporels dans l'élément de matrice $\langle x'' | \hat{U}_E(S) | x' \rangle$. Ce qui donne

$$\begin{aligned} \langle x'' | \hat{U}_E(S) | x' \rangle &= \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n | \hat{U}_E(\varepsilon_s) | x_{n-1} \rangle \\ &= \prod_{n=1}^N \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \mathcal{I}(n, n-1); \quad \varepsilon_s = s_n - s_{n-1}, \end{aligned} \quad (1.57)$$

avec

$$\mathcal{I}(n, n-1) = \langle x_n | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_s f_l(x_n) [H(P_n, x_n) - E] f_r(x_{n-1}) \right\} | x_{n-1} \rangle. \quad (1.58)$$

Notons que l'élément de matrice peut s'écrire approximativement

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(n, n-1) &= \langle x_n | x_{n-1} \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_s \langle x_n | f_l(x_n) [H(P_n, x_n) - E] f_r(x_{n-1}) | x_{n-1} \rangle \\ &= \langle x_n | x_{n-1} \rangle \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_s f_l(x_n) [H(P_n, x_n) - E] f_r(x_{n-1}) \right) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [P_n \Delta x_n - \varepsilon_s f_l(x_n) [H(P_n, x_n) - E] f_r(x_{n-1})] \right\}, \end{aligned} \quad (1.59)$$

avec $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$.

Par conséquent, l'intégrale de chemin pour la fonction de Green (1.54) s'écrit sous la forme :

$$G(x'', x'; E) = \int_0^\infty dSP(x'', x'; S), \quad (1.60)$$

où le noyau $P(x'', x'; S)$ est donné explicitement par :

$$\begin{aligned}
P(x'', x'; S) &= f_r(x'') f_l(x') \prod_{n=1}^N \left[\int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dP_n}{2\pi\hbar} \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} [P_n \Delta x_n - \varepsilon_s f_l(x_n) [H(P_n, x_n) - E] f_r(x_{n-1})] \right\}. \quad (1.61)
\end{aligned}$$

En effectuant l'intégration sur les variables P_n , nous obtenons une intégrale de chemin dans l'espace des configurations

$$\begin{aligned}
P(x'', x'; S) &= \frac{f_r(x'') f_l(x')}{\sqrt{2i\pi\hbar\varepsilon_s f_l(x'') f_r(x') / \mu}} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2i\pi\hbar\varepsilon_s f_r(x_n) f_l(x_n) / \mu}} \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu (\Delta x_n)^2}{2\varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1})} - \varepsilon_s f_l(x_n) (V(x_n) - E) f_r(x_{n-1}) \right] \right\}. \quad (1.62)
\end{aligned}$$

Notons qu'en comparant les termes cinétiques contenus dans les expressions (1.38) et (1.62), on a

$$dt = \varepsilon = \varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1}) = ds f_l(x_n) f_r(x_{n-1}). \quad (1.63)$$

Ce résultat signifie que l'introduction d'une fonction régulatrice pour contourner le problème de la singularité à l'origine des coordonnées se traduit par une application d'une transformation temporelle appelée également reparamétrisation des chemins [18, 19].

D'autre part, comme la masse dans le terme énergie cinétique dépend de la position, il est commode de la rendre constante en effectuant une transformation spatiale. En adoptant le développement limité de l'action et de la mesure autour du point moyen, nous posons $\lambda = \frac{1}{2}$, c'est à dire,

$$f_l(x) = f_r(x) = f^{\frac{1}{2}}(x). \quad (1.64)$$

Si on effectue la transformation spatiale $x \rightarrow \xi$ définie par :

$$x = g(\xi), \quad (1.65)$$

le terme énergie cinétique se transforme en

$$\frac{\mu(\Delta x_n)^2}{2\varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1})} \simeq \frac{\mu}{2\varepsilon_s} (\Delta \xi_n)^2 + \frac{\mu}{8\varepsilon_s} \left(\frac{g''^2(\tilde{\xi}_n)}{g'^2(\tilde{\xi}_n)} - \frac{2g'''(\tilde{\xi}_n)}{3g'(\tilde{\xi}_n)} \right) (\Delta \xi_n)^4, \quad (1.66)$$

après avoir posé

$$f(x) = g'^2(\xi), \quad (1.67)$$

avec $g'(\xi) = \frac{d}{d\xi}g(\xi)$.

Compte tenu de (1.65), (1.66) et (1.45), le noyau (1.62) devient finalement

$$P(x'', x'; S) = \frac{[g'(\xi'') g'(\xi')]^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{2i\pi\hbar\varepsilon_s/\mu}} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{d\xi_n}{\sqrt{2i\pi\hbar\varepsilon_s/\mu}} \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu}{2\varepsilon_s} (\Delta \xi_n)^2 - \frac{3\hbar^2}{8\mu} \left(\frac{g''^2(\tilde{\xi}_n)}{g'^2(\tilde{\xi}_n)} - \frac{2g'''(\tilde{\xi}_n)}{3g'(\tilde{\xi}_n)} \right) \varepsilon_s - g'^2(\tilde{\xi}_n) (V(\tilde{\xi}_n) - E) \varepsilon_s \right] \right\}. \quad (1.68)$$

1.4 Intégrale de chemin pour une particule de Klein-Gordon

Pour étudier le problème des états liés d'une particule relativiste sans spin en mouvement dans un potentiel vecteur $V(r)$ et un potentiel scalaire $S(r)$ à l'aide de l'approche des intégrales de chemin de Feynman, considérons la fonction de Green qui vérifie l'équation de Klein-Gordon

$$\left[(P - eA)^2 - (\mu - S)^2 \right] G(x'', x') = \delta^4(x'' - x'), \quad (1.69)$$

où $eA = \begin{pmatrix} V(r) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$ et μ est la masse au repos de la particule de charge $(-e)$ dans l'espace-temps de Minkowski muni de la métrique $g_{ab} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$.

La construction de la solution de l'équation (1.69) peut être abordée en partant de l'expression de la fonction de Green écrite dans la représentation intégrale de Schwinger [17]:

$$G(x'', x') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \langle x'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [(P - eA)^2 - (\mu + S)^2] \Lambda \right\} | x' \rangle. \quad (1.70)$$

Comme les potentiels $V(r)$ et $S(r)$ possèdent la symétrie sphérique, la fonction de Green (1.70) se développe sur la base des ondes sphériques ainsi :

$$G_l(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t''; r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (1.71)$$

expression dans laquelle $G_l(r'', t''; r', t')$ est la fonction de Green radiale donnée par :

$$G_l(r'', t''; r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda), \quad (1.72)$$

où le noyau $P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda)$ représente l'intégrale de chemin définie explicitement sous la forme compacte par :

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[-P_r^2 + (P_0 - V)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (\mu + S)^2 \right] \Lambda \right\} | r', t' \rangle. \quad (1.73)$$

Afin d'obtenir une intégrale de chemin stable et une forme discrète de l'expression (1.72) définie, nous pouvons introduire une fonction régulatrice appropriée suivant la référence [16] et écrire (1.72) sous la forme :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'', t'', r', t'; S'), \quad (1.74)$$

où le noyau $P_l(r'', t'', r', t'; S')$ est l'intégrale de chemin transformée définie explicitement sous forme canonique compacte par :

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} f_L(r) \left[-P_r^2 + (P_0 - V)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (\mu + S)^2 \right] f_R(r) S' \right\} | r', t' \rangle \\
&= f_R(r'') f_L(r') \int Dr(s') Dt(s') \int \frac{DP_r(s')}{2\pi} \frac{DP_0(s')}{2\pi} \\
&\quad \times \exp \left\{ i \int_0^{S'} \left[-P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r) \left(-P_r^2 + (P_0 - V)^2 \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (\mu + S)^2 \right) \right] f_R(r) ds' \right\}. \tag{1.75}
\end{aligned}$$

Sous forme discrète, le noyau $P_l(r'', t'', r', t'; S')$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n dt_n \right] \\
&\quad \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{d(P_r)_n}{2\pi} \frac{d(P_0)_n}{2\pi} \right] \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right], \tag{1.76}
\end{aligned}$$

où \mathcal{A}_1^n est l'action élémentaire donnée par :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[-(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V(r_n))^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (\mu + S(r_n))^2 \right] f_R(r_{n-1}), \tag{1.77}
\end{aligned}$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_{s'} = \frac{S'}{N+1} = ds' = \frac{d\tau}{f_L(r_n) f_R(r_{n-1})}, \quad d\tau = \varepsilon_\tau = \frac{\Lambda}{N+1}. \tag{1.78}$$

Dans l'expression (1.76), il est clair que le calcul des intégrales sur les variables t_n produit N distributions de Dirac $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$ et qu'en effectuant ensuite les intégrations sur les variables $(P_0)_n$, on trouve

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots = (P_0)_{n+1} = E. \tag{1.79}$$

Par conséquent, le propagateur $P_l(r'', t', r', t'; S')$ s'écrit simplement sous la forme :

$$P_l(r'', t', r', t'; S') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; S'), \quad (1.80)$$

où le noyau $P_l(r'', r'; S')$ a pour expression :

$$P_l(r'', r'; S') = f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right], \quad (1.81)$$

avec l'action élémentaire donnée par :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_2^n = & -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) f_R(r_{n-1}) \left[-(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right. \\ & \left. + (E - V(r_n))^2 - (\mu + S(r_n))^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.82)$$

En effectuant l'intégration sur les variables $(P_r)_n$, nous obtenons une intégrale de chemin dans l'espace des configurations

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S') = & \frac{f_R(r'') f_L(r')}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f_R(r') f_L(r'')}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f_L(r_n) f_R(r_n)}} \right] \\ & \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'} f(r_n) f(r_{n-1})} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) f_R(r_{n-1}) \left(\frac{l(l+1)}{r_n^2} \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + (\mu + S(r_n))^2 - (E - V(r_n))^2 \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.83)$$

En reportant maintenant (1.80) dans (1.72), on voit que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle S' . Par conséquent, la fonction de Green partielle (1.72) se met sous la forme :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (1.84)$$

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{+\infty} dS' P_l(r'', r'; S'). \quad (1.85)$$

Si l'on pose

$$f_L(r) = f_R(r) = f^{\frac{1}{2}}(r), \quad (1.86)$$

l'expression (1.83) s'écrit

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; S') &= \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f(r_n)}} \right] \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'} \sqrt{f(r_n) f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \sqrt{f(r_n) f(r_{n-1})} \left(\frac{l(l+1)}{r_n^2} \right. \right. \right. \\ &\left. \left. \left. + (\mu + S(r_n))^2 - (E - V(r_n))^2 \right) \right] \right\}. \quad (1.87) \end{aligned}$$

Le calcul de la fonction de Green partielle (1.85) sera entrepris une fois les potentiels $V(r)$ et $S(r)$ sont spécifiés.

1.5 Méthode des perturbations

La méthode des perturbations est couramment utilisée pour résoudre des problèmes de mécanique quantique qui conduisent à des équations trop compliquées ne se laissant pas traiter exactement. Cette méthode et en particulier le développement en une série entière de perturbations s'appliquent également dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin de façon très pratique. Nous allons présenter ici un rappel concernant cette technique qui sera mise en oeuvre dans certains cas abordés dans la suite. Pour cet usage, considérons un potentiel composé $W(x) = V(x) + \tilde{V}(x)$ trop compliqué pour que l'on puisse évaluer directement le propagateur par l'approche des intégrales de chemin et tel que $V(x)$ est un potentiel pour lequel l'intégrale de chemin est supposée connue et donnée par :

$$K^{(V)}(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) dt \right\}, \quad (1.88)$$

avec $T = t'' - t'$.

Le propagateur

$$K(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 - W(x) \right) dt \right\}, \quad (1.89)$$

se rapportant au potentiel $W(x)$ s'écrit

$$\begin{aligned} K(x'', x'; T) &= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 - V(x) - \tilde{V}(x) \right) dt \right\} \\ &= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) dt \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \tilde{V}(x) dt \right\}. \end{aligned} \quad (1.90)$$

En effectuant un développement en série de puissances du terme contenant $\tilde{V}(x)$ de l'intégrale de chemin et en considérant $\tilde{V}(x)$ comme une perturbation, on obtient [20–23]

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \left(\prod_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \int_{t'}^{t''} dt_j \right) \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; t_1 - t') \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; t'' - t_n) \\
&= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \left(\prod_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \int_{t'}^{t_{j+1}} dt_j \right) \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; t_1 - t') \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; t'' - t_n).
\end{aligned} \tag{1.91}$$

Dans la seconde étape, on a ordonné les variables temporelles de la manière suivante : $t' = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n+1} = t''$ et où on a posé $T = t'' - t'$.

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

$$G^{(V)}(x'', x'; E) = \int_0^{\infty} dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) K^{(V)}(x'', x'; T), \tag{1.92}$$

et

$$G(x'', x'; E) = \int_0^{\infty} dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) K(x'', x'; T). \tag{1.93}$$

Considérons maintenant un potentiel $W(x)$ qui se compose d'un potentiel quelconque $V(x)$ et d'une perturbation $\tilde{V}(x)$ représentée par :

$$\tilde{V}(x) = -\alpha\delta(x - a), \tag{1.94}$$

où la fonction δ est une distribution de Dirac. En utilisant le théorème de convolution des transformations de Fourier, il est facile de montrer que la fonction de Green associée au potentiel $W(x) = V(x) - \alpha\delta(x - a)$ s'écrit sous la forme :

$$G^{(\delta)}(x'', x'; E) = G^{(V)}(x'', x'; E) - \frac{G^{(V)}(x'', a; E) G^{(V)}(a, x'; E)}{G^{(V)}(a, a; E) - \frac{1}{\alpha}}, \quad (1.95)$$

où nous supposons que la fonction de Green $G^{(V)}(a, a; E)$ existe effectivement.

Les niveaux d'énergie sont déterminés à partir des solutions de l'équation

$$G^{(V)}(a, a; E) = \frac{1}{\alpha} \quad (1.96)$$

qui est en général une équation transcendante.

Lorsque le potentiel $V(x)$ est défini sur la demi-droite $x > a$, le mouvement du système physique est borné par une barrière infiniment répulsive (c'est à dire $\alpha \rightarrow -\infty$) localisée au point $x = a$. Dans ce cas, la fonction de Green est donnée par :

$$\begin{aligned} \tilde{G}(x'', x'; E) &= \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} G^{(\delta)}(x'', x'; E) \\ &= G^{(V)}(x'', x'; E) - \frac{G^{(V)}(x'', a; E) G^{(V)}(a, x'; E)}{G^{(V)}(a, a; E)}, \end{aligned} \quad (1.97)$$

et le spectre d'énergie est déterminé par l'équation

$$G^{(V)}(a, a; E) = 0. \quad (1.98)$$

Chapitre 2

Mouvement d'une particule dans le potentiel de Tietz amélioré

2.1 Introduction

Comme modèle de remplacement très utile du potentiel de Morse pour ajuster les courbes d'énergie potentielle de certaines interactions diatomiques, Tietz [24] avait suggéré, en 1963, une fonction d'énergie potentielle donnée par :

$$U(r) = D_e \left[1 + \frac{(a+b)e^{-2\beta r} - be^{-\beta r}}{(1+ce^{-\beta r})^2} \right] \quad (2.1)$$

qui continue à stimuler de nombreux travaux théoriques [25–36] réalisés dans le cadre de méthodes algébriques variées et dont les résultats sont souvent discutables (voir à titre d'exemple la ref. [36]). En 2012, Jia et ses collaborateurs [37] avaient proposé une version améliorée de ce potentiel ayant la forme :

$$V_T(r) = D_e \left(1 - \frac{e^{2\alpha r_e} + q}{e^{2\alpha r} + q} \right)^2, \quad (2.2)$$

dans laquelle D_e désigne l'énergie de dissociation de la molécule diatomique, r_e est la distance entre les deux noyaux à la position d'équilibre, α^{-1} est la portée du potentiel et q est un paramètre réel de déformation. L'introduction du paramètre q peut servir comme un paramètre

additionnel dans la description des interactions inter-atomiques, et particulièrement dans des problèmes à trois dimensions, il permet d'établir l'emplacement du centre de masse d'une molécule à une certaine distance de l'origine des coordonnées. Ce potentiel a reçu une attention considérable immédiatement après. L'équivalence entre le potentiel de Rosen-Morse déformé et le potentiel de Tietz pour des molécules diatomiques a été étudiée récemment [38, 39]. Notons aussi que le potentiel de Tietz amélioré et le potentiel de Rosen-Morse modifié ont été examinés à partir de différents points de vue au cours de ces dernières années [40–44]. Un autre cas intéressant qui, en dépit des apparences, présente une certaine parenté avec les potentiels ci-dessus, est le nouveau potentiel du type de Schiöberg déformé introduit par Mustafa [45] pour calculer les niveaux d'énergie de rotation-vibration de certaines molécules diatomiques dans le contexte de la supersymétrie en mécanique quantique. Ce potentiel a été aussi discuté dans une approche basée sur l'intégrale de chemin de Feynman [46].

La fonction potentielle (2.2) contient trois genres de potentiels à savoir le potentiel de Manning-Rosen modifié et déformé [4] pour $q < 0$, le potentiel de Rosen-Morse modifié et déformé [3] lorsque $q > 0$ et le potentiel de Morse [47] à la limite $q \rightarrow 0$. Donc, il est clair que le paramètre q aura une influence sur la forme des solutions du problème. Pour $q \neq 0$, nous allons considérer chaque cas séparément en utilisant la méthode des intégrales de chemin.

Dans le second paragraphe, nous formulons brièvement l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée au potentiel à symétrie sphérique $V_T(r)$. Dans le troisième paragraphe, nous examinons le problème pour $q < 0$ en distinguant deux cas : $q \leq -1$ et $-1 < q < 0$. Lorsque $q \leq -1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln |q| < r < +\infty$, nous calculons la fonction de Green radiale associée au potentiel de Manning-Rosen modifié et déformé pour un état d'une onde l en utilisant une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge pour trouver le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées. Pour $-1 < q < 0$, le potentiel de Manning-Rosen $|q|$ -déformé est converti en une forme du potentiel de Manning-Rosen standard définie dans le demi-espace $\xi > \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$. Dans ce cas, nous nous contenterons de l'évaluation de la fonction de Green radiale relative aux états s ($l = 0$) puisque l'approximation choisie pour le potentiel centrifuge dans le cas précédent n'est plus valable. La méthode de calcul de la fonction de Green est basée sur la théorie des perturbations qui consiste à introduire une fonction δ de Dirac comme une perturbation du potentiel standard de Manning-Rosen et en rendant la force de cette perturbation

infiniment repulsive afin de créer une barrière infranchissable. De l'expression de la fonction de Green composée de deux termes compacts, nous déduisons une équation transcendante pour les niveaux d'énergie ainsi que les fonctions d'onde non-normalisées. Dans le quatrième paragraphe le potentiel (2.2), pour $q > 0$, est traité de la même manière. Nous le transformons d'abord en un potentiel de Rosen-Morse standard défini dans le demi-espace $u > \frac{1}{2\alpha} \ln q$. Nous construisons ensuite la fonction de Green radiale sous une forme compacte à partir de laquelle nous obtenons aussi une équation transcendante pour les niveaux d'énergie des états s ($l = 0$) et les fonctions d'onde non-normalisées. À la limite $q \rightarrow 0$, nous retrouvons les résultats du problème du potentiel de Morse pour la fonction de Green, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde dans le cinquième paragraphe. Le sixième paragraphe sera une conclusion.

2.2 Fonction de Green

La fonction de Green dépendante de l'énergie (transformée de Fourier du propagateur) associée à une particule de masse M , en mouvement dans le potentiel (2.2) peut être développée en ondes partielles [62] dans le système des coordonnées sphériques

$$G_l(\vec{r}'', \vec{r}'; E) = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', r'; E) P_l(\cos \Theta), \quad (2.3)$$

où $G_l(r'', r'; E)$ est la fonction de Green radiale donnée par :

$$G_l(r'', r'; E) = \int_0^{\infty} dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) \left\langle r'' \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_l T\right) \right| r' \right\rangle, \quad (2.4)$$

et $P_l(\cos \Theta)$ est le polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta = \frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'} = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\varphi'' - \varphi')$. L'opérateur Hamiltonien \hat{H}_l est défini par :

$$\hat{H}_l = \frac{\hat{P}_r^2}{2M} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V_T(r), \quad (2.5)$$

où $\hat{P}_r = -i\hbar(\partial/r\partial r)r$ est l'opérateur associé à la composante radiale de l'opérateur impulsion.

Dans le formalisme des intégrales de chemin, l'intégrand $\left\langle r'' \left| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_l T\right) \right| r' \right\rangle$ est explicitement donné par l'intégrale de chemin Hamiltonienne

$$\begin{aligned} \left\langle r'' \left| \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_l T \right) \right| r' \right\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi\hbar} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right\}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

où l'action élémentaire est

$$\mathcal{A}_1^n = (P_r)_n \Delta r_n - \varepsilon \left[\frac{(P_r)_n^2}{2M} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_n^2} + V_T(r_n) \right]. \quad (2.7)$$

Notons que $(P_r)_n = P_r(t_n)$, $r_n = r(t_n)$, $\Delta r_n = r_n - r_{n-1}$, $\varepsilon = t_n - t_{n-1}$ et $T = (N+1)\varepsilon$. En intégrant sur les variables $(P_r)_n$ nous obtenons l'intégrale de chemin Lagrangienne

$$\begin{aligned} \left\langle r'' \left| \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_l T \right) \right| r' \right\rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_n)^2 - \varepsilon \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_n^2} + V_T(r_n) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Pour construire la fonction de Green radiale relative à $V_T(r)$ via (2.4) en termes du formalisme des intégrales de chemin de Feynman [16], trois cas peuvent être distingués selon les valeurs réelles du paramètre q .

2.3 Potentiel de Manning-Rosen modifié et déformé

Lorsque le paramètre de déformation q est négatif, le potentiel de Tietz est équivalent au potentiel de Manning-Rosen modifié et déformé

$$V_{|q|}(r) = U_0 - U_1 \coth_{|q|}(\alpha r) + U_2 \coth_{|q|}^2(\alpha r), \quad (2.9)$$

où U_0 , U_1 et U_2 sont des constantes réelles données par :

$$\begin{cases} U_0 = \frac{D_e}{4} \left(\frac{e^{2\alpha r_e}}{|q|} + 1 \right)^2, \\ U_1 = \frac{D_e}{2} \left(\frac{e^{2\alpha r_e}}{|q|} + 1 \right) \left(\frac{e^{2\alpha r_e}}{|q|} - 1 \right), \\ U_2 = \frac{D_e}{4} \left(\frac{e^{2\alpha r_e}}{|q|} - 1 \right)^2. \end{cases} \quad (2.10)$$

Le potentiel (2.9) est obtenu en utilisant une déformation q des fonctions hyperboliques habituelles dénotées par :

$$\sinh_q x = \frac{e^x - qe^{-x}}{2}, \quad \cosh_q x = \frac{e^x + qe^{-x}}{2}, \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}, \quad \coth_q x = \frac{\cosh_q x}{\sinh_q x}. \quad (2.11)$$

Ces fonctions ont été introduites pour la première fois par Arai [9], avec le paramètre réel $q > 0$. Le paramètre de déformation q peut être étendu aux cas de $q < 0$ et d'un nombre complexe [48].

Maintenant, la fonction de Green dépendant de l'énergie pour le potentiel de Manning-Rosen modifié et déformé est donnée par :

$$G_l^{|q|}(r'', r'; E) = \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K_l^{|q|}(r'', r'; T), \quad (2.12)$$

où le propagateur $K_l^{|q|}(r'', r'; T)$ s'écrit formellement ainsi :

$$K_l^{|q|}(r'', r'; T) = \int Dr(t) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{M}{2} \dot{r}^2 - \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V_{|q|}(r) \right) \right] dt \right\}. \quad (2.13)$$

Pour évaluer l'expression (2.12) de la fonction de Green, nous devons distinguer deux cas : $|q| \geq 1$ et $0 < |q| < 1$.

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

Lorsque $|q| \geq 1$, le potentiel (2.9) a une forte singularité au point $r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$, créant une barrière impénétrable. Dans ce cas, il y a deux régions distinctes, l'une est définie par l'intervalle $]0, r_0[$ et l'autre par l'intervalle $]r_0, \infty[$. Comme dans le premier intervalle, le calcul de la fonction de Green est sans intérêt physique, nous construirons cette dernière seulement dans le second

intervalle pour un état de moment cinétique orbital l en nous servant de l'approximation suivante pour remplacer le terme potentiel centrifuge [49] :

$$\frac{1}{r^2} \approx C_0 + \frac{B_0}{e^{2\alpha r} - |q|} + \frac{A_0}{(e^{2\alpha r} - |q|)^2}, \quad \text{pour } \alpha r \ll 1 \text{ et } |q| \geq 1, \quad (2.14)$$

où $C_0 = \frac{\alpha^2}{12}$, B_0 et A_0 sont deux paramètres ajustables. Si nous prenons $C_0 = 0$, $B_0 = \frac{A_0}{|q|}$, $A_0 = \alpha^2 |q|^2$ et $|q| = 1$, l'équation (2.14) se réduit à l'approximation proposée par Greene et Aldrich [50].

Avec (2.14) et (2.11), le potentiel effectif s'écrit ainsi :

$$\begin{aligned} V_{eff}(r) &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + V_{|q|}(r) \\ &\approx V_0^l - V_1^l \coth_{|q|}(\alpha r) + \frac{V_2^l}{\sinh_{|q|}^2(\alpha r)}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} V_0^l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M} \left[C_0 + \frac{1}{2|q|} \left(\frac{A_0}{|q|} - B_0 \right) \right] + U_0 + U_2, \\ V_1^l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{4M|q|} \left(\frac{A_0}{|q|} - B_0 \right) + U_1, \\ V_2^l = \frac{\hbar^2 l(l+1)A_0}{8M|q|} + |q| U_2. \end{array} \right. \quad (2.16)$$

En changeant ensuite αr en $\xi = \alpha r - \frac{1}{2} \ln |q|$ et ε en $\alpha^{-2} \varepsilon_s$, nous pouvons récrire la fonction de Green (2.12) sous la forme :

$$G_l^{|q| \geq 1}(r'', r'; E) = \frac{1}{\alpha} G_{MR}^{|q| \geq 1}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_l), \quad (2.17)$$

où

$$G_{MR}^{|q| \geq 1}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_l) = \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i \tilde{E}_l}{\hbar \alpha^2} S\right) P_{MR}^l(\xi'', \xi'; S), \quad (2.18)$$

avec

$$\tilde{E}_l = E - \left(U_0 + U_2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M} \left[C_0 + \frac{1}{2|q|} \left(\frac{A_0}{|q|} - B_0 \right) \right] \right), \quad (2.19)$$

et

$$P_{MR}^l(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left[\frac{M}{2} \dot{\xi}^2 - V_{MR}^l(\xi) \right] ds \right\}, \quad (2.20)$$

est le propagateur relatif au potentiel standard de Manning-Rosen [4]

$$V_{MR}^l(\xi) = -\frac{V_1^l}{\alpha^2} \coth \xi + \frac{V_2^l}{\alpha^2 |q| \sinh^2 \xi}; \quad \xi > 0, \quad (2.21)$$

qui a été discuté dans la littérature par l'intégrale de chemin [51]. Nous pouvons écrire la solution de (2.18) immédiatement sous forme compacte ainsi :

$$\begin{aligned} G_{MR}^{|q| \geq 1}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_l) &= -\frac{iM}{\hbar} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\times \left(\frac{2}{\coth \xi' + 1} \cdot \frac{2}{\coth \xi'' + 1} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\ &\times \left(\frac{\coth \xi' - 1}{\coth \xi' + 1} \cdot \frac{\coth \xi'' - 1}{\coth \xi'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth \xi_{>} - 1}{\coth \xi_{>} + 1} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{\coth \xi_{<} + 1} \right), \end{aligned} \quad (2.22)$$

où les symboles $\xi_{>}$ et $\xi_{<}$ désignent le max (ξ'', ξ') et le min (ξ'', ξ') respectivement. ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; z)$ est la fonction hypergéométrique et les quantités L_E , M_1 et M_2 sont définies par :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} (U_0 + U_1 + U_2 - E) + l(l+1) \left(C_0 + \frac{A_0}{|q|^2} - \frac{B_0}{|q|} \right)}, \\ M_1 = \delta_l + \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} (U_0 - U_1 + U_2 - E) + l(l+1) C_0}, \\ M_2 = \delta_l - \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{2M}{\hbar^2} (U_0 - U_1 + U_2 - E) + l(l+1) C_0}, \end{cases} \quad (2.23)$$

avec

$$\delta_l = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8MU_2}{\hbar^2 \alpha^2} + \frac{l(l+1)}{\alpha^2} \frac{A_0}{|q|^2}}. \quad (2.24)$$

En substituant l'expression (2.22) dans l'équation (2.17) et en revenant à la variable r , nous obtenons

$$\begin{aligned} G_l^{|q| \geq 1}(r'', r'; E) &= -\frac{iM}{\hbar \alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\times \left[\left(1 - |q| e^{-2\alpha r'}\right) \left(1 - |q| e^{-2\alpha r''}\right) \right]^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\ &\times \left[|q|^2 e^{-2\alpha(r'' + r')} \right]^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; |q| e^{-2\alpha r >}) \\ &\times {}_2F_1(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; 1 - |q| e^{-2\alpha r <}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Les pôles de la fonction de Green radiale (2.25) dans le plan de l'énergie complexe correspondant aux états liés sont tous contenus dans la première fonction gamma se trouvant dans le numérateur. À partir de la condition

$$M_1 - L_E = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.26)$$

et après avoir inséré les expressions de L_E et M_1 contenues dans (2.23), nous trouvons l'expression suivante pour les niveaux d'énergie de rotation et de vibration de la molécule diatomique qui a les valeurs l du nombre quantique orbital et n_r du nombre quantique radial :

$$E_{n_r, l}^{|q| \geq 1} = U_0 + U_2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M} \left(\frac{A_0}{2|q|^2} - \frac{B_0}{2|q|} + C_0 \right) - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2M} \left(N_r^2 + \frac{\lambda_l^2}{N_r^2} \right), \quad (2.27)$$

où l'on a posé

$$N_r = n_r + \delta_l + \frac{1}{2}, \quad (2.28)$$

et

$$\lambda_l = \frac{MU_1}{\hbar^2 \alpha^2} + \frac{l(l+1)}{4\alpha^2} \left(\frac{A_0}{|q|^2} - \frac{B_0}{|q|} \right). \quad (2.29)$$

Pour obtenir les fonctions d'onde radiales réduites, nous approximations la fonction gamma $\Gamma(M_1 - L_E)$ près des pôles $M_1 - L_E = -n_r$ comme suit :

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!} \frac{\hbar^2 \alpha^2 \left(\frac{\lambda_l}{N_r} + N_r \right) \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right)}{N_r M \quad E - E_{n_r, l}^{|q| \geq 1}}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

et tenons compte de la formule de transformation de Gauss (voir Ref. [15], p. 1043, Eq. (9.131.2))

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{\Gamma(c) \Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a) \Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c) \Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a) \Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z), \end{aligned} \quad (2.31)$$

dans laquelle, dans ce cas, le second terme est nul car la fonction gamma $\Gamma(a)$ est infinie ($a = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$). Ainsi, nous arrivons à une expression sous la forme d'un développement spectral pour la fonction de Green radiale (2.25) :

$$G_l^{|q| \geq 1}(r'', r'; E) = i\hbar \sum_{n_r=0}^{n_r \max} \frac{\chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r'') \chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r')}{E - E_{n_r, l}^{|q| \geq 1}}, \quad (2.32)$$

où

$$\begin{aligned} \chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r) &= C_{n_r, l} (1 - |q| e^{-2\alpha r})^{\delta_l + \frac{1}{2}} (|q| e^{-2\alpha r})^{\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right)} \\ &\times {}_2F_1 \left(-n_r, \frac{\lambda_l}{N_r} + N_r - n_r, \frac{\lambda_l}{N_r} - N_r + 1; |q| e^{-2\alpha r} \right), \end{aligned} \quad (2.33)$$

sont les fonctions d'onde radiales (normalisées) réduites, avec pour coefficient de normalisation

$$C_{n_r, l} = \left[\frac{\alpha \left(\frac{\lambda_l}{N_r} + N_r \right) \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right) \Gamma \left(\frac{\lambda_l}{N_r} + N_r - n_r \right) \Gamma \left(1 + n_r + \frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right)}{N_r n_r! \Gamma(2N_r - n_r) \Gamma^2 \left(1 + \frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.34)$$

En se servant de la formule (voir Ref. [15], p. 952, Eq. (8.406.1))

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1 \left(-n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1 - t}{2} \right), \quad (2.35)$$

reliant la fonction hyperg om etrique et le polyn ome de Jacobi $P_n^{(\alpha, \beta)}(t)$, on peut exprimer (2.33) sous la forme :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r) &= \left[\frac{\alpha \left(\frac{\lambda_l}{N_r} + N_r \right) \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right) n_r! \Gamma \left(\frac{\lambda_l}{N_r} + N_r - n_r \right)}{N_r \Gamma(2N_r - n_r) \Gamma \left(1 + n_r + \frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times (|q| e^{-2\alpha r})^{\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right)} (1 - |q| e^{-2\alpha r})^{\delta_l + \frac{1}{2}} \\ &P_{n_r}^{\left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r, 2\delta_l \right)} (1 - 2|q| e^{-2\alpha r}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Maintenant, pour qu'elles soient acceptables physiquement, les fonctions d'onde $\chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r)$ doivent satisfaire les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} \chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r) = 0, \quad (2.37)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r) = 0. \quad (2.38)$$

Lorsque $r \rightarrow r_0$, il est évident que (2.36) remplit la condition à la limite (2.37) mais pour $r \rightarrow \infty$, nous obtenons de (2.36) le comportement asymptotique

$$\chi_{n_r, l}^{|q| \geq 1}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} (e^{-\alpha r})^{\left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r\right)}, \quad (2.39)$$

à partir duquel nous devons imposer la restriction que seules les fonctions d'onde avec $\left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r\right) > 0$, remplissent la condition à la limite (2.38) et donc la valeur de $n_{r_{\max}}$ dans (2.32) est donnée par $n_{r_{\max}} = \left\{ \sqrt{\lambda_l} - \delta_l - \frac{1}{2} \right\}$ qui désigne le plus grand entier $n_r \in N$ avec $n_r < \left(\sqrt{\lambda_l} - \delta_l - \frac{1}{2} \right)$. Cette condition détermine le nombre de niveaux d'énergie du système physique.

2.3.2 Deuxième cas : $0 < |q| < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$

Dans ce cas, nous nous limitons à l'évaluation de la fonction de Green associée aux ondes s ($l = 0$). En opérant le changement de variable défini par $\xi = \alpha r - \frac{1}{2} \ln |q|$, ($\xi \in]\xi_0, \infty[$, $\xi_0 = -\frac{1}{2} \ln |q|$) et en effectuant la transformation temporelle $\frac{dt}{ds} = \frac{1}{\alpha^2}$, nous pouvons récrire (2.12), pour $l = 0$, ainsi :

$$\begin{aligned} G_0^{0 < |q| < 1}(r'', r'; E) &= \frac{1}{\alpha} G_0^{0 < |q| < 1}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_0) \\ &= \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E}_0 S\right) K_0^{0 < |q| < 1}(\xi'', \xi'; S), \end{aligned} \quad (2.40)$$

où

$$\tilde{E}_0 = \frac{1}{\alpha^2} [E - (U_0 + U_2)], \quad (2.41)$$

et

$$K_0^{0 < |q| < 1}(\xi'', \xi'; S) = \int D\xi(s) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left(\frac{M}{2} \dot{\xi}^2 - \tilde{V}(\xi) \right) ds \right\}, \quad (2.42)$$

avec

$$\tilde{V}(\xi) = -\frac{U_1}{\alpha^2} \coth \xi + \frac{U_2}{\alpha^2 \sinh^2 \xi}; \quad \xi > \xi_0. \quad (2.43)$$

Notons que l'expression (2.43) est celle du potentiel de Manning-Rosen [4] pour $\xi > \xi_0$. Ceci signifie que le noyau $K_0^{0 < |q| < 1}(\xi'', \xi'; S)$ est le propagateur qui décrit le mouvement d'une particule soumise au potentiel de Manning-Rosen défini dans le demi-espace $\xi > \xi_0$. Comme une intégration directe des chemins n'est pas possible, nous pouvons construire la fonction de Green correspondante en termes de la fonction de Green dans l'intervalle \mathbb{R}^+ à l'aide de la méthode de développement en série de perturbation discutée en détail dans la littérature [51–53] et qu'il n'est pas nécessaire de rappeler ici. Tous calculs faits, nous trouvons

$$G^{0 < |q| < 1}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_0) = G_{MR}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{MR}(\xi'', \xi_0; \tilde{E}_0)G_{MR}(\xi_0, \xi'; \tilde{E}_0)}{G_{MR}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}_0)}, \quad (2.44)$$

où $G_{MR}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green (2.22), pour $l = 0$ et $0 < |q| < 1$.

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de la fonction de Green (2.44), c'est à dire par l'équation $G_{MR}(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}_0) = 0$, ou aussi bien par l'équation transcendante

$${}_2F_1(M_1 - L_{E_{n_r}}, L_{E_{n_r}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; |q|) = 0, \quad (2.45)$$

où

$$\begin{cases} L_{E_{n_r}} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\hbar\alpha} \sqrt{2M \left(\frac{D_e e^{4\alpha r_e}}{|q|^2} - E_{n_r} \right)}, \\ M_1 = \delta_0 + \frac{1}{2\hbar\alpha} \sqrt{2M (D_e - E_{n_r})}, \\ M_2 = \delta_0 - \frac{1}{2\hbar\alpha} \sqrt{2M (D_e - E_{n_r})}, \\ \delta_0 = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8MU_2}{\hbar^2 \alpha^2}}. \end{cases} \quad (2.46)$$

L'équation transcendante (2.45) peut être résolue numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie. les fonctions d'onde radiales réduites correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{0 < |q| < 1}(r) &= C (1 - |q| e^{-2\alpha r})^{\delta_0 + \frac{1}{2}} (|q| e^{-2\alpha r})^{\frac{1}{2\hbar\alpha}} \sqrt{2M(D_e - E_{n_r})} \\ &\times {}_2F_1(M_1 - L_{E_{n_r}}, L_{E_{n_r}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; |q| e^{-2\alpha r}), \end{aligned} \quad (2.47)$$

où C est un facteur constant.

2.4 Potentiel de Rosen-Morse modifié et déformé

Pour $q > 0$, le potentiel de Tietz est analogue au potentiel de Rosen-Morse modifié et déformé

$$V_q(r) = V_0 + V_1 \tanh_q(\alpha r) + V_2 \tanh_q^2(\alpha r). \quad (2.48)$$

Les constantes V_0 , V_1 et V_2 sont données par :

$$\begin{cases} V_0 = \frac{D_e}{4} \left(\frac{e^{2\alpha r_e}}{q} - 1 \right)^2, \\ V_1 = \frac{D_e}{2} \left(1 + \frac{e^{2\alpha r_e}}{q} \right) \left(1 - \frac{e^{2\alpha r_e}}{q} \right), \\ V_2 = \frac{D_e}{4} \left(\frac{e^{2\alpha r_e}}{q} + 1 \right)^2. \end{cases} \quad (2.49)$$

Comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée ci-dessus ne s'applique pas au cas du potentiel de Rosen-Morse (voir, par exemple, la discussion sur la validité d'une approximation de ce type dans notre précédent travail [54]), nous nous contenterons de l'étude des ondes s ($l = 0$) en évaluant la fonction de Green afin de trouver les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes des états liés. Dans ce cas, la fonction de Green radiale (2.4) s'écrit

$$G_0^{q>0}(r'', r'; E) = \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K_0^{q>0}(r'', r'; T), \quad (2.50)$$

où le propagateur $K_0^{q>0}(r'', r'; T)$ est donné par :

$$K_0^{q>0}(r'', r'; T) = \int Dr(t) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{M}{2} \dot{r}^2 - V_q(r) \right] dt \right\}. \quad (2.51)$$

Pour évaluer la fonction de Green (2.50), nous effectuons les transformations de coordonnée et temporelle $u = \alpha r - \frac{1}{2} \ln q$, ($u \in]u_0, \infty[$, $u_0 = -\frac{1}{2} \ln q$) et $\frac{dt}{ds} = \frac{1}{\alpha^2}$. Comme résultat de ces transformations, la fonction de Green (2.50) prend la forme :

$$\begin{aligned} G_0^{q>0}(r'', r'; E) &= \frac{1}{\alpha} G_0^{q>0}(u'', u'; \mathcal{E}_0) \\ &= \frac{1}{\alpha} \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon_0 S\right) P_0^{q>0}(u'', u'; S), \end{aligned} \quad (2.52)$$

où

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{\alpha^2} [E - (V_0 + V_2)], \quad (2.53)$$

et

$$P_0^{q>0}(u'', u'; S) = \int Du(s) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^S \left(\frac{M}{2} \dot{u}^2 - V(u)\right) ds\right\}, \quad (2.54)$$

avec

$$V(u) = \frac{V_1}{\alpha^2} \tanh u - \frac{V_2}{\alpha^2 \cosh^2 u}; \quad u > u_0. \quad (2.55)$$

À cause du fait que $V(u)$ est le potentiel de Rosen-Morse défini dans le demi-espace $u > u_0$, la fonction de Green (2.52) peut être construite en termes de la fonction de Green dans l'intervalle \mathbb{R} entier, par une méthode semblable à celle utilisée dans la littérature [51–53]. Par conséquent, la solution de (2.52) a par expression :

$$G_0^{q>0}(u'', u', \mathcal{E}_0) = G_{RM}(u'', u'; \mathcal{E}_0) - \frac{G_{RM}(u'', u_0; \mathcal{E}_0) G_{RM}(u_0, u'; \mathcal{E}_0)}{G_{RM}(u_0, u_0; \mathcal{E}_0)}, \quad (2.56)$$

avec la fonction de Green $G_{RM}(u'', u'; \mathcal{E}_0)$ donnée par :

$$\begin{aligned}
G_{RM}(u'', u'; \mathcal{E}_0) &= -\frac{iM}{\hbar} \frac{\Gamma(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}) \Gamma(L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{1 - \tanh u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh u''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left(\frac{1 + \tanh u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh u''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh u_{<}}{2} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh u_{>}}{2} \right),
\end{aligned} \tag{2.57}$$

dans laquelle nous avons employé les notations suivantes :

$$\begin{cases} L_{\mathcal{E}_0} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{2MV_2}{\hbar^2 \alpha^2}}, \\ M_1 = \frac{1}{2\hbar\alpha} \left(\sqrt{2M(V_0 + V_1 + V_2 - E)} + \sqrt{2M(V_0 - V_1 + V_2 - E)} \right), \\ M_2 = \frac{1}{2\hbar\alpha} \left(\sqrt{2M(V_0 + V_1 + V_2 - E)} - \sqrt{2M(V_0 - V_1 + V_2 - E)} \right). \end{cases} \tag{2.58}$$

Les niveaux d'énergie des états liés E_{n_r} peuvent être obtenus à partir des pôles de la fonction de Green radiale (2.56) et sont déterminés par l'équation transcendante

$${}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{q}{1+q} \right) = 0; \quad \text{pour } E = E_{n_r}, \tag{2.59}$$

qui peut être résolue numériquement. Les fonctions d'onde radiales réduites seront de la forme :

$$\begin{aligned}
\chi_{n_r}^{q>0}(r) &= C \left(\frac{q}{e^{2\alpha r} + q} \right)^{\frac{1}{2\hbar\alpha} \sqrt{2M(D_e - E)}} \left(\frac{1}{1 + qe^{-2\alpha r}} \right)^{\frac{1}{2\hbar\alpha} \sqrt{2M\left(\frac{D_e}{q^2} e^{4\alpha r} - E\right)}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{q}{e^{2\alpha r} + q} \right); \quad \text{pour } E = E_{n_r},
\end{aligned} \tag{2.60}$$

où C est un facteur constant.

2.5 Potentiel de Morse

En posant $q = 0$, le potentiel de Tietz donné par l'expression (2.2) se réduit au potentiel radial de Morse

$$V_M(r) = D_e \left(1 - e^{-2\alpha(r-r_e)}\right)^2. \quad (2.61)$$

Dans ce cas, on peut voir à partir des équations (2.58) que

$$\begin{cases} L_{\mathcal{E}_0} \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} + \lambda \left(1 + \frac{e^{2\alpha r_e}}{q}\right), \\ M_1 \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \mu + \lambda \frac{e^{2\alpha r_e}}{q}, \\ M_2 \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \mu - \lambda \frac{e^{2\alpha r_e}}{q}, \end{cases} \quad (2.62)$$

expressions dans lesquelles nous avons posé

$$\mu = \frac{\sqrt{2M(D_e - E)}}{2\hbar\alpha}, \quad (2.63)$$

et

$$\lambda = \frac{\sqrt{2MD_e}}{2\hbar\alpha}. \quad (2.64)$$

En utilisant à la fois la formule de transformation de Gauss (2.31), la propriété de la fonction hypergéométrique [55]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \quad (2.65)$$

les relations entre la fonction hypergéométrique confluyente et les fonctions de Whittaker (voir Ref. [15], p. 1059, Eqs. (9.220.2) et (9.220.3))

$$M_{\lambda, \mu}(z) = z^{\mu + \frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \lambda + \mu, 1 + 2\mu; z\right), \quad (2.66)$$

$$M_{\lambda,-\mu}(z) = z^{-\mu+\frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \lambda - \mu, 1 - 2\mu; z\right), \quad (2.67)$$

et la formule (voir Ref. [15], p. 1059, Eq. (9.220.4))

$$W_{\lambda,\mu}(z) = \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \lambda - \mu)} M_{\lambda,\mu}(z) + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \lambda + \mu)} M_{\lambda,-\mu}(z), \quad (2.68)$$

après quelques calculs simples, on montre que la fonction de Green (2.56) se réduit à la fonction de Green bien connue associée au potentiel radial de Morse

$$G_M(r'', r'; E_0) = -\frac{iM}{\hbar} \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - \lambda + \mu)}{\Gamma(2\mu + 1)} \frac{e^{\frac{z''+z'}{2}}}{\sqrt{z''z'}} M_{\lambda,\mu}(z') W_{\lambda,\mu}(z''); \quad z'' > z', \quad (2.69)$$

où $z = 2\lambda e^{-2\alpha(r-r_e)}$.

Pour déduire le spectre d'énergie, nous nous reportons à l'équation (2.59) et nous notons que

$$\begin{aligned} & \lim_{q \rightarrow 0} {}_2F_1\left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{q}{1+q}\right) \\ &= {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \lambda + \mu, 2\mu + 1; 2\lambda e^{2\alpha r_e}\right) = 0. \end{aligned} \quad (2.70)$$

C'est une équation transcendante compliquée à résoudre analytiquement pour déterminer les niveaux d'énergie, mais comme, en général les valeurs de λ et $e^{2\alpha r_e}$ sont telles que $\lambda e^{2\alpha r_e} \gg 1$ pour les molécules diatomiques standard [56], nous pouvons donc utiliser le comportement asymptotique de la fonction hypergéométrique confluyente

$$F(a, c; z) \underset{|z| \rightarrow \infty}{\approx} e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} z^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c} = 0. \quad (2.71)$$

En posant $a = \frac{1}{2} - \lambda + \mu$, $c = 1 + 2\mu$ et $z = 2\lambda e^{2\alpha r_e}$ dans (2.71), celle-ci peut s'écrire

$$\begin{aligned}
{}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \lambda + \mu, 1 + 2\mu; 2\lambda e^{2\alpha r_e}\right) &\approx \Gamma(1 + 2\mu) e^{-(\frac{1}{2} - \lambda + \mu)(\alpha r_e + \ln 2\lambda)} \\
&\times \left\{ \frac{e^{-i\pi(\frac{1}{2} - \lambda + \mu)}}{\Gamma(\frac{1}{2} + \lambda + \mu)} + \frac{1}{\Gamma(\frac{1}{2} - \lambda + \mu)} e^{2\lambda(e^{2\alpha r_e} - 2\alpha r_e - \ln 2\lambda)} \right\} \\
&= 0. \tag{2.72}
\end{aligned}$$

Ce qui entraîne :

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} - \lambda + \mu\right) = -e^{i\pi(\frac{1}{2} - \lambda + \mu)} \Gamma\left(\frac{1}{2} + \lambda + \mu\right) e^{2\lambda(e^{2\alpha r_e} - 2\alpha r_e - \ln 2\lambda)}. \tag{2.73}$$

Comme $\frac{1}{2} + \lambda + \mu > \frac{1}{2} + \lambda > \frac{1}{2}$, nous pouvons donc appliquer la formule de Stirling [57],

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} (n/e)^n \tag{2.74}$$

à $\Gamma\left(\frac{1}{2} + \lambda\right)$ pour écrire

$$\begin{aligned}
\Gamma\left(\frac{1}{2} + \lambda\right) &\approx \sqrt{2\pi} \left(\frac{1}{2} + \lambda\right) \left(\frac{\frac{1}{2} + \lambda}{e}\right)^{\frac{1}{2} + \lambda} \\
&= \sqrt{2\pi} \exp\left[(1 + \lambda) \ln\left(\frac{1}{2} + \lambda\right) - \left(\frac{1}{2} + \lambda\right)\right], \tag{2.75}
\end{aligned}$$

et montrer que

$$\left| \Gamma\left(\frac{1}{2} - \lambda + \mu\right) \right| > \sqrt{2\pi} \exp\left[(1 + \lambda) \ln\left(\frac{1}{2} + \lambda\right) - \left(\frac{1}{2} + \lambda\right) + 2\lambda(e^{2\alpha r_e} - 2\alpha r_e - \ln 2\lambda)\right]. \tag{2.76}$$

Dans tous les cas des molécules diatomiques, $|\Gamma\left(\frac{1}{2} - \lambda + \mu\right)|$ est très grand et proche de l'une des singularités de la fonction gamma aux entiers négatifs,

$$\frac{1}{2} - \lambda + \mu = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \tag{2.77}$$

En insérant maintenant les valeurs de λ et μ dans (2.77), on trouve les niveaux d'énergie bien

connus associés au potentiel radial de Morse :

$$E_{n_r} = -\frac{2\hbar^2\alpha^2}{M} \left[\left(n_r + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \frac{\sqrt{2MD_e}}{\hbar\alpha} \right], \quad (2.78)$$

avec $n_r \text{ max} = \left\{ \frac{\sqrt{2MD_e}}{2\hbar\alpha} - \frac{1}{2} \right\}$.

De l'expression (2.60), en passant à la limite où $q \rightarrow 0$, nous aurons pour les fonctions d'onde correspondantes :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{q=0}(r) &= \mathcal{N} \exp \left[-\frac{\sqrt{2MD_e}}{2\hbar\alpha} e^{-2\alpha(r-r_e)} \right] \left(e^{-2\alpha(r-r_e)} \right)^{\frac{\sqrt{2MD_e}}{2\hbar\alpha} - n_r - \frac{1}{2}} \\ &\times {}_1F_1 \left(-n_r, -2n_r + \frac{\sqrt{2MD_e}}{\hbar\alpha}; \frac{\sqrt{2MD_e}}{\hbar\alpha} e^{-2\alpha(r-r_e)} \right), \end{aligned} \quad (2.79)$$

où \mathcal{N} est la constante de normalisation.

2.6 Conclusion

Ci-dessus, nous avons présenté une méthode pour résoudre complètement une forme améliorée du potentiel de Tietz en termes du formalisme des intégrales de chemin. Comme nous l'avons montré, l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée à ce potentiel ne se construit pas d'une manière unifiée quel que soit le paramètre de déformation q car il caractérise des formes variées du potentiel [58]. Ce potentiel a une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$ lorsque $q < 0$ et un cas limite $q = 0$. Contrairement à ce qui a été rapporté dans la littérature, le traitement quantique du problème avec ce potentiel par toute méthode demande de considérer trois cas séparément. Lorsque $|q| \geq 1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln |q| < r < +\infty$, en adoptant une approximation convenable pour le terme potentiel centrifuge et en formulant l'intégrale de chemin en fonction du potentiel de Manning-Rosen standard, la fonction de Green radiale pour l'onde l est établie sous une forme compacte, à partir de laquelle le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées sont extraits. Pour $0 < |q| < 1$, l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée aux ondes s ($l = 0$) est aussi formulée en termes du potentiel de Manning-Rosen défini dans le demi-espace $\xi > -\frac{1}{2\alpha} \ln |q|$ et lorsque $q > 0$, elle est exprimée en fonction du potentiel

de Rosen-Morse dans le demi-espace $u > -\frac{1}{2\alpha} \ln q$. Dans les deux cas, nous avons montré que les niveaux d'énergie des états s sont déterminés par une équation transcendante comprenant la fonction hypergéométrique. Naturellement, à la limite où $q \rightarrow 0$, nos résultats peuvent se réduire à ceux du potentiel de Morse.

Chapitre 3

Mouvement d'une particule dans le potentiel de Tietz-Wei

3.1 Introduction

La fonction potentielle à quatre paramètres dite de Tietz-Wei [24–26] introduite pour décrire les vibrations d'élongation des liaisons des molécules diatomiques est définie par :

$$V_{TW}(r) = D \left[\frac{1 - e^{-b_h(r-r_e)}}{1 - c_h e^{-b_h(r-r_e)}} \right]^2 ; \quad b_h = \beta(1 - c_h). \quad (3.1)$$

où r est la distance internucléaire, D et r_e représentent respectivement la profondeur du puits de potentiel et la longueur de la liaison moléculaire. β est la constante de Morse et pour des raisons physiques la constante sans dimension c_h est un paramètre d'optimisation choisi de telle sorte que $|c_h| < 1$. Ce potentiel est beaucoup plus réaliste que le potentiel de Morse dans la description de la dynamique moléculaire. Depuis donc 1990, il continue d'intéresser les physiciens et les chimistes si l'on juge par le nombre impressionnant de travaux réalisés sur ses applications en physique moléculaire et en chimie quantique. En utilisant la théorie de Hamilton-Jacobi et la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld, les niveaux d'énergie de rotation-vibration de molécules diatomiques [27] ainsi que des distributions de probabilité radiales de certaines molécules diatomiques dans des états de rotation-vibration excités [28] ont été obtenus. Dans un espace à trois dimensions, la solution analytique de l'équation de Schrödinger radiale avec ce potentiel

a été donnée récemment pour les ondes s ($l = 0$) dans une formulation basée sur la méthode de Nikiforov-Uvarov [29] et pour les ondes l en utilisant l'approximation de Pekeris pour remplacer le terme potentiel centrifuge [30]. Les solutions analytiques approximatives des équations de Schrödinger, Klein-Gordon et Dirac ont été aussi proposées en adoptant l'approximation de Pekeris et en appliquant trois types de techniques à savoir la méthode d'itération asymptotique, l'approche de l'analyse fonctionnelle et la supersymétrie en mécanique quantique [34]. Dans une autre étude, la construction des opérateurs de Ladder par l'approche algébrique et des états cohérents dans le cadre de la supersymétrie en mécanique quantique pour le potentiel anharmonique de Tietz-Wei a été abordée [59]. La méthode basée sur la règle de quantification appropriée a été appliquée récemment pour déterminer le spectre d'énergie d'un ensemble de molécules diatomiques en présence du potentiel de Tietz-Wei [35] et du potentiel de Tietz-Wei modifié [60]. L'équation de Schrödinger a été résolue en adoptant l'approximation de Pekeris pour le terme centrifuge. Enfin, on trouve dans un travail très récent réalisé dans un espace à D dimensions les solutions de l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Tietz-Wei obtenues en utilisant une approximation du type Pekeris et la supersymétrie en mécanique quantique [61].

Comme dans les articles cités ci-dessus, le paramètre c_h ne semble avoir aucune influence sur les solutions du problème, nous allons consacrer le reste de ce chapitre à une discussion rigoureuse par l'intégrale de chemin en considérant tous les cas qui peuvent se présenter et prouver l'importance de c_h pour résoudre correctement le problème.

Dans le second paragraphe, nous allons exprimer la fonction de Green radiale relative au potentiel $V_{TW}(r)$ sous la forme d'une intégrale de chemin en soulignant que le problème de sa construction se présente de façon différente suivant la valeur que prend le paramètre c_h . Nous établissons la correspondance entre le potentiel de Tietz-Wei et le potentiel de Manning-Rosen déformé lorsque $0 < c_h < 1$ dans le troisième paragraphe. Pour $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$, en remplaçant le terme potentiel centrifuge par une approximation appropriée, nous calculons, sous une forme compacte, la fonction de Green radiale associée aux ondes l . Nous en déduisons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées des états liés l en indiquant les valeurs minimales du paramètre c_h à partir desquelles les valeurs numériques du spectre d'énergie pour certaines molécules diatomiques peuvent être obtenues. Lorsque $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$, nous nous limitons à l'étude des ondes s ($l = 0$). Dans le quatrième paragraphe, nous considérons

le cas où $-1 < c_h < 0$. Le potentiel (3.1) se ramène au potentiel déformé de Rosen-Morse. Nous évaluons la fonction de Green associée aux ondes s ($l = 0$) pour déterminer l'équation d'énergie et les fonctions d'onde. À la limite où $c_h \rightarrow 0$, nous retrouvons la fonction de Green, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde pour le potentiel de Morse dans le cinquième paragraphe. Le sixième paragraphe sera une conclusion.

3.2 Fonction de Green

Comme le potentiel (3.1) possède la symétrie sphérique, la fonction de Green radiale est définie par :

$$G_l(r'', r'; E) = \int_0^\infty dT \langle r'' | \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [E - H_l] T \right\} | r' \rangle, \quad (3.2)$$

où H_l est l'Hamiltonien

$$H_l = \frac{P_r^2}{2\mu} + V_{eff}(r), \quad (3.3)$$

avec le potentiel effectif

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V_{TW}(r). \quad (3.4)$$

Dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin de Feynman [62], il est facile d'exprimer (3.2) sous la forme d'une intégrale de chemin,

$$G_l(r'', r'; E) = \int_0^\infty dT \exp \left(\frac{i}{\hbar} ET \right) K_l(r'', r'; T), \quad (3.5)$$

avec

$$\begin{aligned} K_l(r'', r'; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi\hbar} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[(P_r)_n \Delta r_n - \varepsilon \left(\frac{(P_r)_n^2}{2\mu} + V_{eff}(r_n) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Ensuite, en intégrant sur les variables $(P_r)_n$, nous obtenons l'intégrale de chemin dans l'espace des configurations,

$$G_l(r'', r'; E) = \int_0^\infty dT \exp \left(\frac{i}{\hbar} ET \right) \tilde{K}_l(r'', r'; T), \quad (3.7)$$

où le propagateur $\tilde{K}_l(r'', r'; T)$ est explicitement défini par :

$$\begin{aligned} \tilde{K}_l(r'', r'; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\mu}{2i\pi\varepsilon\hbar} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu}{2\varepsilon} (\Delta r)_n^2 - \varepsilon V_{eff}(r_n) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Pour construire la fonction de Green radiale (3.7), deux cas se présentent selon que c_h est compris dans l'intervalle $]0, 1[$ ou dans l'intervalle $] -1, 0[$.

3.3 Potentiel de Manning-Rosen déformé

Si $0 < c_h < 1$, le potentiel de Tietz-Wei se met sous la forme du potentiel de Manning-Rosen défini en termes des hyperboliques c_h -déformées par :

$$V_{TW}(r) = V_0 - V_1 \coth_{c_h} \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right] + \frac{V_2}{\sinh_{c_h}^2 \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right]}, \quad (3.9)$$

où les constantes V_0, V_1 et V_2 sont données par :

$$\begin{cases} V_0 = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{1}{c_h^2} \right), \\ V_1 = \frac{D}{2} \left(\frac{1}{c_h} + 1 \right) \left(\frac{1}{c_h} - 1 \right), \\ V_2 = \frac{D}{4} c_h \left(\frac{1}{c_h} - 1 \right)^2. \end{cases} \quad (3.10)$$

Comme dans le problème du potentiel de Tietz amélioré, nous allons construire la fonction de Green radiale en distinguant deux cas : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$ et $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$.

3.3.1 Premier cas : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$

Le potentiel $V_{TW}(r)$ possède une forte singularité au point $r = r_0 = r_e + \frac{1}{b_h} \ln c_h$. Dans ce cas, il existe deux régions distinctes, la première est déterminée par l'intervalle $]0, r_0[$ et la seconde par l'intervalle $]r_0, +\infty[$. Nous allons nous intéresser au calcul de l'intégrale de chemin pour ce potentiel uniquement dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$, puisque, dans l'autre intervalle, le problème ne peut pas être résolu analytiquement et de plus, sa solution ne présente pas un intérêt physique

digne d'être noté. pour calculer la fonction de Green associée aux ondes de moment cinétique l , nous adoptons l'expression

$$\frac{1}{r^2} \approx C_0 + \frac{B_0}{e^{b_h(r-r_e)} - c_h} + \frac{A_0}{(e^{b_h(r-r_e)} - c_h)^2} \quad (3.11)$$

comme une approximation du terme $\frac{1}{r^2}$ contenu dans le potentiel centrifuge lorsque $b_h(r-r_e) \ll 1$. Après un calcul simple, nous pouvons mettre l'expression du potentiel effectif (3.4) sous la forme :

$$V_{eff}(r) \approx V_0^l - V_1^l \coth_{c_h} \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right] + \frac{V_2^l}{\sinh_{c_h}^2 \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right]}, \quad (3.12)$$

où les paramètres V_0^l, V_1^l et V_2^l sont définis par :

$$\begin{cases} V_0^l = V_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu} \left[C_0 + \frac{1}{2c_h} \left(\frac{A_0}{c_h} - B_0 \right) \right], \\ V_1^l = V_1 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{4\mu} \left(\frac{A_0}{c_h} - B_0 \right), \\ V_2^l = V_2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)A_0}{8\mu c_h}. \end{cases} \quad (3.13)$$

En effectuant ensuite le changement de variable $\xi = \frac{1}{2} [b_h(r-r_e) - \ln c_h]$ et en posant $\varepsilon = \frac{b_h^2}{4} \varepsilon_s$, la fonction de Green (3.7) s'écrit

$$G_l(r'', r'; E) = \frac{2}{b_h} G_{MR}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_l), \quad (3.14)$$

où

$$G_{MR}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_l) = \int_0^\infty dS \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{\tilde{E}_l}{b_h^2} S \right) P_l(\xi'', \xi'; S), \quad (3.15)$$

expression dans laquelle le noyau $P_l(\xi'', \xi'; S)$ a pour forme explicite :

$$\begin{aligned} P_l(\xi'', \xi'; S) &= \frac{b_h}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\xi_n \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu}{2\varepsilon_s} (\Delta\xi)_n^2 + \frac{4\varepsilon_s}{b_h^2} \left(V_1^l \coth \xi_n - \frac{V_2^l}{c_h \sinh^2 \xi_n} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

et

$$\tilde{E}_l = 4 \left(E - V_0^l \right). \quad (3.17)$$

L'expression (3.16) est celle du propagateur associée au potentiel standard de Manning-Rosen dont nous avons fait référence dans le sous paragraphe (2.3.1). Alors, la fonction de Green (3.15) est de la forme :

$$\begin{aligned} G_{MR}(\xi'', \xi'; \tilde{E}_l) &= -\frac{i\mu}{\hbar} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\ &\times \left(\frac{2}{1 + \coth \xi'} \frac{2}{1 + \coth \xi''} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \left(\frac{\coth \xi' - 1}{\coth \xi' + 1} \frac{\coth \xi'' - 1}{\coth \xi'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth \xi_{>} - 1}{\coth \xi_{>} + 1} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{2}{\coth \xi_{<} + 1} \right), \end{aligned} \quad (3.18)$$

où les paramètres L_E , M_1 et M_2 ont dans le cas actuel les valeurs suivantes :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu (V_0^l + V_1^l - E)}, \\ M_1 = \delta_l + \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu (V_0^l - V_1^l - E)}, \\ M_2 = \delta_l - \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu (V_0^l - V_1^l - E)}, \end{cases} \quad (3.19)$$

avec

$$\delta_l = \sqrt{\frac{8\mu V_2}{\hbar^2 b_h^2 c_h} + \frac{l(l+1)}{b_h^2 c_h^2} A_0} + \frac{1}{4}. \quad (3.20)$$

Ainsi, en revenant à l'ancienne variable, la fonction de Green radiale (3.14) a pour expression :

$$\begin{aligned} G_l(r'', r'; E) &= -\frac{2i\mu}{\hbar b_h} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\ &\times \left[\left(1 - c_h e^{-b_h(r' - r_e)} \right) \left(1 - c_h e^{-b_h(r'' - r_e)} \right) \right]^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\ &\times \left(c_h^2 e^{-b_h(r' - r_e)} e^{-b_h(r'' - r_e)} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; c_h e^{-b_h(r > -r_e)} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - c_h e^{-b_h(r < -r_e)} \right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Le spectre d'énergie pour les états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green radiale (3.21). Ces pôles sont ceux de la fonction gamma $\Gamma(M_1 - L_E)$ que nous trouvons lorsque son argument est un entier négatif ou nul, c'est à dire lorsque

$$M_1 - L_E = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.22)$$

En tenant compte de (3.19), les valeurs propres de l'énergie sont alors données par :

$$E_{n_r, l} = V_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu} \left[C_0 + \frac{1}{2c_h} \left(\frac{A_0}{c_h} - B_0 \right) \right] - \frac{\hbar^2 b_h^2}{8\mu} \left(N_r^2 + \frac{\lambda_l^2}{N_r^2} \right), \quad (3.23)$$

où nous avons posé

$$N_r = n_r + \delta_l + \frac{1}{2}, \quad (3.24)$$

et

$$\lambda_l = \frac{4\mu V_1}{\hbar^2 b_h^2} + \frac{l(l+1)}{b_h^2 c_h} \left(\frac{A_0}{c_h} - B_0 \right). \quad (3.25)$$

En exprimant maintenant la fonction de Green radiale (3.21) sous la forme d'un développement spectral ainsi :

$$G_l(r'', r'; E) = i\hbar \sum_{n_r=0}^{n_r \max} \frac{\chi_{n_r, l}(r'') \chi_{n_r, l}(r')}{E - E_{n_r, l}}, \quad (3.26)$$

nous trouvons pour les fonctions d'onde $\chi_{n_r, l}(r)$, convenablement normalisées, les valeurs :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r, l}(r) &= \left[\frac{b_h}{2N_r} \left(\frac{\lambda_l}{N_r} + N_r \right) \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r \right) \frac{\Gamma\left(N_r - n_r + \frac{\lambda_l}{N_r}\right) \Gamma\left(1 - N_r + n_r + \frac{\lambda_l}{N_r}\right)}{n_r! \Gamma(2N_r - n_r)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \frac{1}{\Gamma\left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r + 1\right)} \left(1 - c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right)^{N_r - n_r} \left(c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right)^{\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_l}{N_r} - N_r\right)} \\ &\times {}_2F_1\left(-n_r, N_r + \frac{\lambda_l}{N_r} - n_r, \frac{\lambda_l}{N_r} - N_r + 1; c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Dans le calcul des valeurs de l'énergie à partir de l'équation (3.23) pour certaines molécules, Il faut noter que le paramètre c_h doit être supérieur ou égal aux valeurs contenues dans le tableau ci-dessous et inférieur à l'unité contrairement à ce qui est prétendu dans la littérature [34].

valeurs minimales de c_h pour obtenir les valeurs des niveaux d'énergie à partir de l'équation (3.23).			
molécule	$b_h \left(\text{\AA}^{-1} \right)$	$r_e \left(\text{\AA} \right)$	c_h
HF	1,94207	0,917	0,168490115
N ₂	2,78585	1,097	0,047071975
I ₂	2,12343	2,666	0,003478812
H ₂	1,61890	0,741	0,301313237
O ₂	2,59103	1,207	0,043832785
O ₂ ⁺	2,86987	1,116	0,040649248

3.3.2 Deuxième cas : $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$

Dans ce cas, le potentiel (3.1) est défini dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . La transformation $r = r_e + \frac{1}{b_h} (2\xi + \ln c_h)$ convertit $r \in]0, +\infty[$ en $\xi \in]-\frac{1}{2}(b_h r_e + \ln c_h), +\infty[$. Cela signifie que le noyau (3.16) pour $l = 0$, est le propagateur décrivant l'évolution d'une particule en présence d'un potentiel du type de Manning-Rosen sur la demi-droite $\xi > \xi_0 = -\frac{1}{2}(b_h r_e + \ln c_h)$ et en effectuant la transformation temporelle $\varepsilon = \frac{4\varepsilon_s}{b_h^2}$, où $dT = \frac{4dS}{b_h^2}$, nous pouvons récrire (3.7), pour $l = 0$, ainsi

$$G_0(r'', r'; E) = \frac{2}{b_h} \tilde{G}_{MR}(\xi', \xi''; \tilde{E}_0), \quad (3.28)$$

avec

$$\tilde{G}_{MR}(\xi', \xi''; \tilde{E}_0) = \int_0^\infty dS \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{\tilde{E}_0}{b_h^2} S\right) P_0(\xi'', \xi'; S), \quad (3.29)$$

où

$$\tilde{E}_0 = 4(E - V_0), \quad (3.30)$$

et

$$P_0(\xi'', \xi'; S) = \frac{b_h}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon_s} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\xi_n \right] \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\mu}{2\varepsilon_s} (\Delta\xi)_n^2 + \frac{4\varepsilon_s}{b_h^2} \left(V_1 \coth \xi_n - \frac{V_2}{c_h \sinh^2 \xi_n} \right) \right] ds \right\}, \quad (3.31)$$

est le propagateur qui décrit le mouvement d'une particule soumise au potentiel de Manning-Rosen défini dans le demi droite $\xi > \xi_0$. Comme une intégration directe des chemins n'est pas possible, nous pouvons construire la fonction de Green correspondante en termes de la fonction de Green dans l'intervalle \mathbb{R}^+ à l'aide de la méthode de développement en série de perturbation discutée en détail dans la littérature [51–53] et qu'il n'est pas nécessaire de rappeler ici. Tous calculs faits, nous trouvons

$$\tilde{G}_{MR}(\xi', \xi''; \tilde{E}_0) = G_{MR}^0(\xi', \xi''; \tilde{E}_0) - \frac{G_{MR}^0(\xi', \xi_0; \tilde{E}_0)G_{MR}^0(\xi_0, \xi''; \tilde{E}_0)}{G_{MR}^0(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}_0)}, \quad (3.32)$$

où $G_{MR}^0(\xi', \xi''; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green (3.18) associée au potentiel de Manning-Rosen déformé, pour les ondes $s(l=0)$ et $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$.

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (3.32), c'est à dire, par l'équation $G_{MR}^0(\xi_0, \xi_0; \tilde{E}_0) = 0$, ou bien par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; c_h e^{b_h r_e}\right) = 0. \quad (3.33)$$

Ici les quantités L_E, M_1 et M_2 sont définies par :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(V_0 + V_1 - E_{n_r})}, \\ M_1 = \delta_0 + \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(V_0 - V_1 - E_{n_r})}, \\ M_2 = \delta_0 - \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(V_0 - V_1 - E_{n_r})}. \end{cases} \quad (3.34)$$

avec

$$\delta_0 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8\mu V_2}{\hbar^2 b_h^2 c_h}}. \quad (3.35)$$

L'équation transcendante (3.34) peut être résolue numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie de la particule. Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{0 < c_h < e^{-b_h r_e}}(r) &= \mathcal{C} \left(1 - c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right)^{\delta_0 + \frac{1}{2}} \left(c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right)^{\frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(V_0 + V_1 - E_{n_r})}} \\ &\quad \times {}_2F_1\left(M_1 - L_{E_{n_r}}, L_{E_{n_r}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right), \end{aligned} \quad (3.36)$$

où \mathcal{C} est un facteur constant. Notons que ces fonctions d'onde satisfont bien les conditions aux limites.

$$\chi_{n_r}^{0 < c_h < e^{-b_h r_e}}(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 0, \quad (3.37)$$

et

$$\chi_{n_r}^{0 < c_h < e^{-b_h r_e}}(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0. \quad (3.38)$$

3.4 Potentiel de Rosen-Morse déformé

Lorsque $-1 < c_h < 0$, le potentiel de Tietz-Wei épouse la forme du potentiel de Rosen-Morse exprimé en termes des fonctions hyperboliques c_h -déformés par :

$$V_{TW}(r) = U_0 + U_1 \tanh_{|c_h|} \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right] - \frac{U_2}{\cosh_{|c_h|}^2 \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right]}, \quad (3.39)$$

où les constantes U_0, U_1 et U_2 sont définies par :

$$\begin{cases} U_0 = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{1}{|c_h|^2}\right), \\ U_1 = \frac{D}{2} \left(1 - \frac{1}{|c_h|}\right) \left(1 + \frac{1}{|c_h|}\right), \\ U_2 = \frac{D}{4} |c_h| \left(\frac{1}{|c_h|} + 1\right)^2. \end{cases} \quad (3.40)$$

Dans ce cas, la fonction de Green radiale associée aux ondes s ($l = 0$) s'écrit

$$G(r'', r'; \mathcal{E}_0) = \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_0 T\right) K_0(r'', r'; T) \quad (3.41)$$

avec

$$\mathcal{E}_0 = E - U_0, \quad (3.42)$$

et

$$K_0(r'', r'; T) = \int \mathcal{D}r(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - \left(U_1 \tanh_{|c_h|} \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right] - \frac{U_2}{\cosh_{|c_h|}^2 \left[\frac{b_h}{2} (r - r_e) \right]} \right) \right] dt \right\}. \quad (3.43)$$

Appliquons maintenant la transformation spatiale $r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow x \in]x_0, +\infty[$ définie par :

$$x = \frac{b_h}{2} (r - r_e) - \frac{1}{2} \ln |c_h|, \quad (3.44)$$

accompagnée par la transformation temporelle

$$\varepsilon = \frac{4}{b_h^2} \varepsilon_s \text{ ou } T = \frac{4}{b_h^2} S. \quad (3.45)$$

Nous pouvons ainsi récrire la fonction de Green (3.41) sous la forme suivante :

$$G(r'', r'; \mathcal{E}_0) = \frac{2}{b_h} G(x'', x'; \mathcal{E}_0), \quad (3.46)$$

avec

$$G(x'', x'; \mathcal{E}_0) = \int_0^\infty dS \exp \left(\frac{4i}{\hbar b_h^2} \mathcal{E}_0 S \right) K_0(x'', x'; \mathcal{E}_0), \quad (3.47)$$

où

$$K_0(x'', x'; \mathcal{E}_0) = \int \mathcal{D}x(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S \left[\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 - \frac{4}{b_h^2} \left(U_1 \tanh x - \frac{U_2}{|c_h| \cosh^2 x} \right) \right] ds \right\}; \quad x > x_0 \quad (3.48)$$

est le propagateur associée à une particule qui se déplace dans le demi-espace $x > x_0 = -\frac{1}{2} (b_h r_e + \ln |c_h|)$, sous l'action du potentiel standard de Rosen-Morse [3]. À cause du fait que la solution du propagateur est définie dans le demi-espace $x > x_0$, nous devons construire la fonction de Green correspondante (3.47) en termes de la fonction de Green pour ce potentiel défini dans tout l'espace \mathbb{R} en suivant la démarche décrite dans le paragraphe (1.5). Tous calculs

faits, nous obtenons

$$G(x'', x'; \mathcal{E}_0) = G_{RM}(x'', x'; \mathcal{E}_0) - \frac{G_{RM}(x'', x_0; \mathcal{E}_0) G_{RM}(x_0, x'; \mathcal{E}_0)}{G_{RM}(x_0, x_0; \mathcal{E}_0)}, \quad (3.49)$$

où $G_{RM}(x'', x'; \mathcal{E}_0)$ est la fonction de Green relative au potentiel standard de Rosen-Morse [51, 63] donnée par :

$$\begin{aligned} G_{RM}(x'', x'; \mathcal{E}_0) &= -\frac{i\mu}{\hbar} \frac{\Gamma(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}) \Gamma(L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\times \left(\frac{1 - \tanh x'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh x''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\ &\times \left(\frac{1 + \tanh x'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh x''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh x_{<}}{2} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh x_{>}}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Ici nous avons utilisé les abréviations

$$\begin{cases} L_{\mathcal{E}_0} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8\mu U_2}{\hbar^2 b_h^2 |c_h|}}, \\ M_1 = \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(D-E)} + \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu \left(\frac{D}{|c_h|^2} - E \right)}, \\ M_2 = \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(D-E)} - \frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu \left(\frac{D}{|c_h|^2} - E \right)}. \end{cases} \quad (3.51)$$

Les états liés avec l'énergie E_{n_r} sont déterminés à partir des pôles de la fonction de Green $G_{RM}(x_0, x_0; \mathcal{E}_0)$ par l'équation transcendante

$${}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{|c_h|}{e^{-b_h r_e} + |c_h|} \right) = 0, \quad (3.52)$$

et les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}(r) &= \mathcal{N} \left(\frac{|c_h|}{|c_h| + e^{b_h(r-r_e)}} \right)^{\frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu(D-E_{n_r})}} \left(\frac{1}{1 + |c_h| e^{-b_h(r-r_e)}} \right)^{\frac{1}{\hbar b_h} \sqrt{2\mu \left(\frac{D}{|c_h|^2} - E_{n_r} \right)}} \\ &\quad \times {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{|c_h|}{e^{b_h(r-r_e)} + |c_h|} \right) \end{aligned} \quad (3.53)$$

où \mathcal{N} est un facteur constant.

3.5 Potentiel de Morse

En faisant $|c_h| = 0$ dans l'expression (3.1), nous obtenons le potentiel radial de Morse

$$V_M(r) = D \left(1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right)^2. \quad (3.54)$$

Dans ce cas, nous pouvons montrer à partir des équations (3.51) que

$$\begin{cases} L_{\mathcal{E}_0} \underset{|c_h| \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} + \left(1 + \frac{1}{|c_h|} \right) \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta}, \\ M_1 \underset{|c_h| \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{2\mu(D-E)} + \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta|c_h|}, \\ M_2 \underset{|c_h| \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{2\mu(D-E)} - \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta|c_h|}. \end{cases} \quad (3.55)$$

D'autre part, en tenant compte de la propriété de la fonction hypergéométrique (2.65), il est facile de voir que

$$\begin{aligned} &\lim_{|c_h| \rightarrow 0} {}_2F_1 \left(M_1 - L_{\mathcal{E}_0}, L_{\mathcal{E}_0} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{|c_h|}{e^{-b_h r_e} + |c_h|} \right) \\ &= {}_1F_1 \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta} + \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{2\mu(D-E)}, \frac{2}{\hbar\beta} \sqrt{2\mu(D-E)} + 1; 2 \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta} e^{\beta r_e} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Suivant la méthode utilisée dans le paragraphe (2.5), nous arrivons à

$$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta} + \frac{1}{\hbar\beta} \sqrt{2\mu(D-E)} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (3.57)$$

D'où nous trouvons les niveaux d'énergie bien connus associés au potentiel radial de Morse :

$$E_{n_r} = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2\mu} \left[\left(n_r + \frac{1}{2} \right)^2 - 2 \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar \alpha} \right], \quad (3.58)$$

avec $n_r \text{ max} = \left\{ \frac{\sqrt{2\mu D}}{2\hbar\beta} - \frac{1}{2} \right\}$.

De l'expression (3.53), en passant à la limite où $|c_h| \rightarrow 0$, nous aurons pour les fonctions d'onde correspondantes :

$$\begin{aligned} \chi_{n_r}^{|c_h|=0}(r) &= \mathcal{C} \exp \left[-\frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta} e^{-\beta(r-r_e)} \right] \left(e^{-\beta(r-r_e)} \right)^{\frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta} - n_r - \frac{1}{2}} \\ &\times {}_1F_1 \left(-n_r, -2n_r + 2\frac{\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta}; \frac{2\sqrt{2\mu D}}{\hbar\beta} e^{-\beta(r-r_e)} \right), \end{aligned} \quad (3.59)$$

où \mathcal{C} est la constante de normalisation.

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu que le problème du potentiel de Tietz-Wei se résout sans difficultés dans le cadre des intégrales de chemin de Feynman contrairement aux tentatives d'étude faites naïvement au moyen de diverses techniques [29, 30, 34, 35, 59–61] menant à des résultats acceptables partiellement. Il faut noter qu'un traitement convenable demande de distinguer trois cas représentant le potentiel de Manning-Rosen standard pour $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$, le potentiel de Manning-Rosen défini dans un demi-espace lorsque $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ et le potentiel de Rosen-Morse pour $-1 < c_h < 0$. chaque cas nécessite un traitement particulier. Ce qui prouve que le paramètre d'optimisation c_h est un paramètre important dans l'analyse de ce problème. En particulier, le spectre analytique de l'énergie et les fonctions d'onde des états l de certaines molécules diatomiques s'obtiennent pour des valeurs de c_h supérieures ou égales à celles contenues dans le tableau ci-dessus. Il faut signaler aussi que l'approximation de Pekeris avec des constantes dépendantes de c_h s'applique de manière très restrictive aux molécules diatomiques.

Chapitre 4

Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Rosen-Morse déformé

4.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de traiter en détail dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin, le problème d'une particule relativiste sans spin de masse M et de charge $(-e)$ plongée dans un champ central constitué d'un potentiel vecteur $V_q(r)$ et un potentiel scalaire $S_q(r)$. Le potentiel scalaire est ajouté à la masse au repos de la particule et l'ensemble peut être interprété comme une masse effective dépendant de la position. Les potentiels $V_q(r)$ et $S_q(r)$ sont égaux et de la forme (voir par exemple Ref. [64] et les références contenues dans celle-ci)

$$V_q(r) = S_q(r) = -\frac{V_1}{\cosh_q^2(\alpha r)} - V_2 \tanh_q(\alpha r), \quad (4.1)$$

où V_1 , V_2 , α et q sont quatre paramètres réels ajustables. V_1 et V_2 décrivent la profondeur du puits de potentiel, α est le paramètre d'écran lié à la portée du potentiel caractérisée par la longueur α^{-1} . L'expression (4.1) est définie en termes des fonctions hyperboliques déformées

$$\sinh_q x = \frac{e^x - qe^{-x}}{2}, \quad \cosh_q x = \frac{e^x + qe^{-x}}{2}, \quad \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}, \quad (4.2)$$

introduites pour la première fois par Arai [9]. Le paramètre de déformation q étant un nombre réel non nul. Dans le cas où $q = 1$, le potentiel (4.1) se réduit au potentiel radial de Rosen-Morse qui a été étudié sous différents points de vue au cours de la dernière décennie [41, 65–72]. Aussi pour $-1 \leq q < 0$ et $q > 0$, différentes méthodes ont été utilisées pour résoudre les équations de Klein-Gordon et de Dirac [48, 73–76] avec ces mêmes potentiels.

Dans cette étude, nous allons présenter un traitement complet du problème des états liés pour les potentiels (4.1) par l’approche de l’intégrale de chemin pour toute valeur réelle du paramètre $q \neq 0$.

L’organisation de ce chapitre est la suivante : dans la section 2, nous formulons la fonction de Green radiale associée à l’onde l dans le cadre de l’intégrale de chemin de Feynman. Dans la section 3, nous construisons la fonction de Green radiale associée au potentiel de Manning-Rosen déformé ($q < 0$). Lorsque $q \leq -1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln |q| < r < +\infty$, nous utilisons une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge pour calculer l’expression de la fonction de Green radiale associée à l’état de nombre quantique orbital l , à partir de laquelle, nous déterminerons le spectre d’énergie et les fonctions d’onde normalisées. Pour $-1 < q < 0$, le potentiel q -déformé de Manning-Rosen est converti au potentiel de Manning-Rosen standard défini sur une demi-droite. Dans ce cas, la fonction de Green radiale, pour $l = 0$, est évaluée sous forme compacte en utilisant la méthode des perturbations qui consiste à ajouter un potentiel δ de Dirac comme perturbation au potentiel standard de Manning-Rosen et rendre la force de cette perturbation infiniment répulsive pour créer une barrière infranchissable. De cette manière, nous obtenons la fonction de Green radiale pour une particule se déplaçant sur une demi-droite. Des pôles de la fonction de Green, nous obtenons une équation transcendante pour les niveaux d’énergie. Dans la section 4, le potentiel de Rosen-Morse déformé ($q > 0$) est traité de la même manière. Nous transformons d’abord l’intégrale de chemin associée à ce potentiel en celle du potentiel standard de Rosen-Morse sur une demi-droite et par la même perturbation de la fonction δ , nous calculons la fonction de Green radiale et obtenons une équation transcendante pour les niveaux d’énergie des états s ($l = 0$). Le potentiel radial standard de Manning-Rosen ($|q| = 1$), le potentiel radial standard de Rosen-Morse ($V_2 \rightarrow -V_2, q = 1$) et le potentiel radial d’Eckart

$(V_1 \rightarrow -V_1, q = 1)$ sont considérés comme des cas particuliers. La section 5 sera une conclusion.

4.2 Fonction de Green

La fonction de Green associée à une particule se déplaçant dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire à symétrie sphérique se développe en ondes partielles [62] en coordonnées sphériques

$$G_l(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (4.3)$$

où la fonction de Green radiale est donnée par :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} d\Lambda \left\langle r'', t'' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] \Lambda \right\} \right| r', t' \right\rangle, \quad (4.4)$$

et $P_l(\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta$ avec $\cos \Theta = \frac{\vec{r}'' \vec{r}'}{r'' r'} = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\varphi'' - \varphi')$.

Dans la formulation de Feynman [16, 21], la fonction de Green radiale $G_l(r'', t'', r', t')$ est explicitement exprimée sous la forme d'une intégrale de chemin

$$G_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} d\Lambda P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda), \quad (4.5)$$

où

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n dt_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \times \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right], \quad (4.6)$$

avec l'action élémentaire

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon \Lambda}{2} [-(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 \\ &\quad - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2], \end{aligned} \quad (4.7)$$

dans laquelle $\Delta r_n = r_n - r_{n-1}$, $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$, $r_n = r(t_n)$, $\varepsilon \Lambda = \frac{\Lambda}{N+1}$.

Remarquons d'abord que le calcul des intégrales sur les variables t_n dans l'expression (4.6) donnent N distributions de Dirac $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$. En intégrant ensuite sur les variables $(P_0)_n$, on trouve que

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots = (P_0)_{N+1} = E. \quad (4.8)$$

Par conséquent, le propagateur $P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda)$ devient

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; \Lambda), \quad (4.9)$$

avec

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right], \quad (4.10)$$

où la nouvelle action élémentaire est

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_2^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon \Lambda}{2} [-(P_r)_n^2 + (E - V_q(r_n))^2 \\ &\quad - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

En effectuant ensuite l'intégration par rapport aux variables $(P_r)_n$, nous trouvons

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; \Lambda) &= \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon\Lambda}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon\Lambda}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon\Lambda} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\varepsilon\Lambda}{2} \left([M + S_q(r_n)]^2 - [E - V_q(r_n)]^2 + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

et en remplaçant l'expression (4.9) dans (4.5), nous remarquons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle Λ . Alors, nous pouvons récrire la fonction de Green partielle (4.5) sous la forme :

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

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{+\infty} d\Lambda P_l(r'', r'; \Lambda). \quad (4.14)$$

En admettant que $V_q(r) = S_q(r)$, la fonction de Green radiale (4.14) se réduit à

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{+\infty} d\Lambda \exp \left(i\tilde{E}_0^2 \Lambda \right) K_l(r'', r'; \Lambda), \quad (4.15)$$

où

$$K_l(r'', r'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\Lambda}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\Lambda}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\Lambda} - \frac{\varepsilon_\Lambda}{2} \left(2(E + M) V_q(r_n) + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right) \right] \right\}, \quad (4.16)$$

et

$$\tilde{E}_0^2 = \frac{E^2 - M^2}{2}. \quad (4.17)$$

Le propagateur radial (4.16) et la fonction de Green radiale (4.15) dépendent d'un paramètre de déformation réel arbitraire. Lorsque $-1 < q < 0$ ou $q > 0$, la fonction de Green (4.15) peut être évaluée exactement seulement pour les états s , mais, quand $q \leq -1$, le problème d'un état l peut être résolu en utilisant une approximation appropriée du terme centrifuge. Alors pour entreprendre cette étude, trois cas intéressants doivent être distingués selon les valeurs du paramètre de déformation q .

4.3 Potentiels radiaux de Manning-Rosen déformés

4.3.1 Premier cas : $q \leq -1$

Lorsque $q \leq -1$, le potentiel (4.1) s'écrit sous la forme :

$$V_q(r) = S_q(r) = -\frac{V_1}{\sinh_{|q|}^2(\alpha r)} - V_2 \coth_{|q|}(\alpha r). \quad (4.18)$$

Le mouvement se produit sur le demi-espace $r > r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln(-q)$. Pour construire l'intégrale de chemin pour un état de nombre quantique orbital l , nous utilisons d'abord l'expression

$$\frac{1}{r^2} \approx \alpha^2 \left(\frac{1}{3} + \frac{|q|}{\sinh_{|q|}^2(\alpha r)} \right) \quad (4.19)$$

comme une bonne approximation pour $\frac{1}{r^2}$ dans le terme centrifuge pour $|q| \geq 1$. Nous transformons ensuite la variable $r \in]r_0, +\infty[$ en une nouvelle variable $x \in]0, +\infty[$ par :

$$r = \frac{1}{\alpha} \left(x + \frac{1}{2} \ln |q| \right). \quad (4.20)$$

En plus du changement de variable, nous transformons l'intervalle de temps local ε_Λ en un nouvel intervalle de temps $\alpha^{-2}\varepsilon_s$. En mettant ces considérations ensemble, nous pouvons récrire la fonction de Green (4.15) ainsi :

$$G_l(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} G_{MR}^l(x'', x'; \tilde{E}_l^2), \quad (4.21)$$

avec

$$G_{MR}^l(x'', x'; \tilde{E}_l^2) = i \int_0^\infty dS \exp\left(i \frac{\tilde{E}_l^2}{\alpha^2} S\right) K_{MR}^l(x'', x'; S), \quad (4.22)$$

où

$$\tilde{E}_l^2 = \tilde{E}_0^2 - \frac{l(l+1)\alpha^2}{6}, \quad (4.23)$$

et

$$K_{MR}^l(x'', x'; S) = \int D_x(s) \exp\left\{i \int_0^S \left[\frac{\dot{x}^2}{2} - V_{MR}^l(x)\right] ds\right\} \quad (4.24)$$

est le propagateur associé au potentiel standard de Manning-Rosen [4]

$$V_{MR}^l(x) = -\tilde{V}_2 \coth x + \frac{\tilde{V}_1}{\sinh^2 x}; \quad x > 0, \quad (4.25)$$

dans lequel nous avons posé

$$\tilde{V}_1 = -(E + M) \frac{V_1}{|q| \alpha^2} + \frac{l(l+1)}{2}; \quad \tilde{V}_2 = (E + M) \frac{V_2}{\alpha^2}. \quad (4.26)$$

La fonction de Green peut être exprimée sous forme compacte comme cela est connu dans la littérature [51–53]

$$\begin{aligned} G_{MR}^l(x'', x'; \tilde{E}_l^2) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\times \left(\frac{2}{1 + \coth x'} \cdot \frac{2}{1 + \coth x''} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\ &\times \left(\frac{\coth x' - 1}{\coth x' + 1} \cdot \frac{\coth x'' - 1}{\coth x'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth x_{>} - 1}{\coth x_{>} + 1} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{\coth x_{<} + 1} \right). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Les quantités L_E , M_1 et M_2 sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E)(M - E + 2V_2) + \frac{\alpha^2}{3} l(l+1)}, \\ M_{1,2} = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - 2(M + E) \frac{V_1}{\alpha^2 |q|}} \pm \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E)(M - E - 2V_2) + \frac{\alpha^2}{3} l(l+1)}. \end{array} \right. \quad (4.28)$$

Le spectre d'énergie des états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (4.27) ou des pôles de la fonction d'Euler $\Gamma(M_1 - L_E)$. Ces pôles sont donnés par :

$$M_1 - L_E = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (4.29)$$

En insérant les valeurs de L_E et M_1 dans (4.29), nous obtenons

$$\begin{aligned}
M^2 - E_{n_r, l}^2 &= \frac{(M + E_{n_r, l})^2 V_2^2}{\alpha^2 \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - 2(M + E_{n_r, l}) \frac{V_1}{\alpha^2 |q|}} \right)^2} \\
&\quad + \alpha^2 \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - 2(M + E_{n_r, l}) \frac{V_1}{\alpha^2 |q|}} \right)^2 \\
&\quad - \frac{\alpha^2}{3} l(l+1). \tag{4.30}
\end{aligned}$$

Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned}
u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) \\
&= \mathcal{N}_{n_r, l} (1 - |q| e^{-2\alpha r})^{\delta_l} (|q| e^{-2\alpha r})^{\omega_l} P_{n_r}^{(2\omega_l, 2\delta_l - 1)}(1 - 2|q| e^{-2\alpha r}), \tag{4.31}
\end{aligned}$$

avec les paramètres ω_l et δ_l définis par :

$$\begin{cases} \omega_l = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r, l}^2 - 2(M + E_{n_r, l}) V_2 + \frac{\alpha^2}{3} l(l+1)}, \\ \delta_l = \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - 2(M + E_{n_r, l}) \frac{V_1}{\alpha^2 |q|}}, \end{cases} \tag{4.32}$$

et où la constante $\mathcal{N}_{n_r, l}$ s'obtient à partir de la condition de normalisation

$$\int_{\frac{1}{2\alpha} \ln |q|}^{+\infty} \left| u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) \right|^2 dr = 1. \tag{4.33}$$

Le calcul mène à

$$\mathcal{N}_{n_r, l} = \left[\frac{4\alpha\omega_l (n_r + \omega_l + \delta_l)}{n_r + \delta_l} \frac{n_r! \Gamma(n_r + 2\omega_l + 2\delta_l)}{\Gamma(n_r + 2\omega_l + 1) \Gamma(n_r + 2\delta_l)} \right]^{\frac{1}{2}}. \tag{4.34}$$

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

Dans ce cas, le potentiel (4.1) est défini dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . La transformation $r = \frac{1}{\alpha} (x + \frac{1}{2} \ln |q|)$ convertit $r \in]0, +\infty[$ en $x \in]-\frac{1}{2} \ln |q|, +\infty[$. Cela signifie que le noyau (4.24) pour $l = 0$, est le propagateur décrivant l'évolution d'une particule en présence d'un potentiel

du type de Manning-Rosen sur la demi-droite $x > x_0 = -\frac{1}{2} \ln |q|$. Comme nous ne pouvons pas effectuer directement l'intégration des chemins pour évaluer le propagateur (4.24), le problème peut être résolu à l'aide d'une astuce qui consiste à introduire un terme auxiliaire représenté par une fonction δ de Dirac dans l'équation (4.24) pour former un barrière impénétrable [77] au point $x = x_0$. Alors, la fonction de Green (4.22), pour $l = 0$, devient

$$G_{MR}^\delta(x'', x'; \tilde{E}_0^2) = i \int_0^\infty dS \exp\left(i \frac{\tilde{E}_0^2}{\alpha^2} S\right) K_{MR}^\delta(x'', x'; S), \quad (4.35)$$

où

$$K_{MR}^\delta(x'', x'; S) = \int Dx(s) \exp\left\{i \int_0^S \left[\frac{\dot{x}^2}{2} - V_{MR}^\delta(x)\right] ds\right\}. \quad (4.36)$$

Cette intégrale de chemin (4.36) est le propagateur d'une particule qui se déplace dans un potentiel de la forme :

$$V_{MR}^\delta(x) = V_{MR}^0(x) - \eta \delta(x - x_0), \quad (4.37)$$

où $V_{MR}^0(x)$ est l'expression du potentiel (4.25). Comme il est tout à fait clair, compte tenu de la forme compliquée du potentiel (4.37), le calcul de la fonction de Green (4.35) ne peut pas être effectuée directement. Nous nous proposons d'appliquer l'approche des perturbations qui consiste à exprimer $\exp\left[i\eta \int_{s'}^{s''} \delta(x - x_0) ds\right]$ en série de puissances. Ensuite, le propagateur (4.36) peut être écrit comme suit :

$$\begin{aligned}
K^\delta(x'', x'; S) &= K_{MR}^0(x'', x'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\eta)^n}{n!} \prod_{j=1}^n \left[\int_{s_i}^{s_{j+1}} ds_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \right] \\
&\quad \times K_{MR}^0(x_1, x'; s_1 - s_i) \delta(x_1 - x_0) K_{MR}^0(x_2, x_1; s_2 - s_1) \times \dots \\
&\quad \times \delta(x_{n-1} - x_0) K_{MR}^0(x_n, x_{n-1}; s_n - s_{n-1}) \delta(x_n - x_0) \\
&\quad \times K_{MR}^0(x'', x_n; S - s_n) \\
&= K_{MR}^0(x'', x'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\eta)^n \int_{s_i}^{s_f} ds_n \int_{s_i}^{s_n} ds_{n-1} \dots \int_{s_i}^{s_2} ds_1 \\
&\quad \times K_{MR}^0(x_0, x'; s_1 - s') K_{MR}^0(x_0, x_0; s_2 - s_1) \times \dots \\
&\quad \times K_{MR}^0(x_0, x_0; s_n - s_{n-1}) K_{MR}^0(x'', x_0; S - s_n), \tag{4.38}
\end{aligned}$$

où nous avons ordonné le temps comme suit $s' = s_0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n < s_{n+1} = s''$ avec $S = s'' - s'$. Pour effectuer les intégrations successives sur les variables s_j dans l'équation (4.38), nous insérons (4.38) dans (4.35), et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de Fourier, nous obtenons

$$G_{MR}^\delta(x'', x'; \tilde{E}_0^2) = G_{MR}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) - \frac{G_{MR}^0(x'', x_0; \tilde{E}_0^2) G_{MR}^0(x_0, x'; \tilde{E}_0^2)}{G_{MR}^0(x_0, x_0; \tilde{E}_0^2) - \frac{1}{\eta}}, \tag{4.39}$$

où $G_{MR}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2)$ est la fonction de Green (4.27) associée au potentiel de Manning-Rosen standard (4.25), pour les ondes $s(l=0)$.

Si maintenant nous prenons la limite $\eta \rightarrow -\infty$, le système physique sera forcé de se déplacer dans le potentiel $V_{MR}^0(x)$ borné par une barrière infiniment répulsive [51, 77] localisée au point $x = x_0$. Dans ce cas, la fonction de Green pour $l=0$, est alors donnée par :

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_{MR}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) &= \lim_{\eta \rightarrow -\infty} G_{MR}^\delta(x'', x'; \tilde{E}_0^2) \\
&= G_{MR}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) - \frac{G_{MR}^0(x'', x_0; \tilde{E}_0^2) G_{MR}^0(x_0, x'; \tilde{E}_0^2)}{G_{MR}^0(x_0, x_0; \tilde{E}_0^2)}. \tag{4.40}
\end{aligned}$$

Enfin, lorsque $-1 < q < 0$, la fonction de Green radiale de notre problème est exprimée par :

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} \tilde{G}_{MR}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2). \quad (4.41)$$

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (4.40), c'est à dire, par l'équation $G_{MR}^0(x_0, x_0; \tilde{E}_0^2) = 0$, ou bien par l'équation transcendante

$${}_2F_1(\delta + \omega - p, \delta + p + \omega, 2\omega + 1; |q|) = 0, \quad (4.42)$$

où les quantités δ, p et ω sont définies par :

$$\begin{cases} \delta = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{8(E_{n_r} + M)V_1}{\alpha^2 |q|}} \right), \\ p = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} + 2V_2)}, \\ \omega = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} - 2V_2)}. \end{cases} \quad (4.43)$$

L'équation (4.42) peut être résolue numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie de la particule. Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned} u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) &= r \Psi_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) = C (1 - |q| e^{-2\alpha r})^\delta (|q| e^{-2\alpha r})^\omega \\ &\quad \times {}_2F_1(\delta + \omega - p, \delta + p + \omega, 2\omega + 1; |q| e^{-2\alpha r}), \end{aligned} \quad (4.44)$$

où C est un facteur constant. Notons que ces fonctions d'onde satisfont bien les conditions aux limites

$$u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 0, \quad (4.45)$$

et

$$u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0. \quad (4.46)$$

4.4 Potentiels radiaux de Rosen-Morse

Pour $q > 0$, l'expression (4.1) est un potentiel du type de Rosen-Morse déformé qui est défini dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . Pour ramener l'intégrale (4.15), pour $l = 0$, à une forme résoluble,

nous procédons comme dans le cas précédent. Nous effectuons la transformation de coordonnées suivante :

$$r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow x \in \left] -\frac{1}{2} \ln q, +\infty \right[\quad (4.47)$$

définie par :

$$r = \frac{1}{\alpha} \left(x + \frac{1}{2} \ln q \right). \quad (4.48)$$

Après avoir changé ε_Λ en $\alpha^{-2}\varepsilon_s$ ou Λ en $\alpha^{-2}S$, nous pouvons écrire (4.15), pour les états s , sous la forme suivante :

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} \tilde{G}_{RM}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2), \quad (4.49)$$

où

$$\tilde{G}_{RM}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) = i \int_0^\infty dS \exp\left(i \frac{\tilde{E}_0^2}{\alpha^2} S\right) K_{RM}^0(x'', x'; S), \quad (4.50)$$

et

$$K_{RM}^0(x'', x'; S) = \int Dx(s) \exp\left\{i \int_0^S \left[\frac{\dot{x}^2}{2} - \tilde{V}_2 \tanh x + \frac{\tilde{V}_1}{q \cosh^2 x} \right] ds \right\}. \quad (4.51)$$

Les constantes \tilde{V}_1 et \tilde{V}_2 sont données par :

$$\tilde{V}_1 = (E + M) \frac{V_1}{\alpha^2}; \quad \tilde{V}_2 = -(E + M) \frac{V_2}{\alpha^2}. \quad (4.52)$$

Le propagateur (4.51) a la même forme que l'intégrale de chemin associée au potentiel introduit à l'origine par Rosen et Morse pour discuter les états de vibration des molécules poly-atomiques [3]. Le potentiel de Rosen-Morse est défini pour $x \in \mathbb{R}$, mais dans ce cas, nous avons transformé l'intégrale de chemin pour le potentiel (4.1) en une intégrale de chemin pour un potentiel du type de Rosen-Morse standard via la transformation $r \rightarrow r(x)$ qui convertit

$r \in \mathbb{R}^+$ en $x \in]-(1/2) \ln q, +\infty[$. Ceci signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite $x > x_0 = -(1/2) \ln q$. Ensuite, pour calculer la fonction de Green associée aux ondes s , nous procédons comme dans le cas précédent et nous obtenons

$$\tilde{G}_{RM}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) = G_{RM}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) - \frac{G_{RM}^0(x'', x_0; \tilde{E}_0^2) G_{RM}^0(x_0, x'; \tilde{E}_0^2)}{G_{RM}^0(x_0, x_0; \tilde{E}_0^2)}, \quad (4.53)$$

où $G_{RM}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2)$ est la fonction de Green associée au potentiel standard de Rosen-Morse [3]

$$V_{RM}(x) = \tilde{V}_2 \tanh x - \frac{\tilde{V}_1}{q \cosh^2 x}; \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.54)$$

Il est bien connu que la solution par l'intégrale de chemin pour ce potentiel conduit à l'expression suivante de la fonction de Green [51–53]

$$\begin{aligned} G_{RM}^0(x'', x'; \tilde{E}_0^2) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\times \left(\frac{1 - \tanh x'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh x''}{2} \right)^{(M_1 + M_2)/2} \\ &\times \left(\frac{1 + \tanh x'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh x''}{2} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh x_{>}}{2} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh x_{<}}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.55)$$

dans laquelle nous avons employé les notations suivantes :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 8 \frac{(E+M)V_1}{\alpha^2 q}}, \\ M_{1,2} = \frac{1}{2\alpha} \left(\sqrt{(M+E)(M-E-2V_2)} \pm \sqrt{(M+E)(M-E+2V_2)} \right). \end{cases} \quad (4.56)$$

Les niveaux d'énergie des états liés sont déterminés à partir des pôles de la fonction de Green (4.53), c'est à dire, par l'équation $G_{RM}^0(x_0, x_0; \tilde{E}_0^2) = 0$, ou encore par la condition de

quantification suivante qui est une équation transcendante comprenant la fonction hypergéométrique

$${}_2F_1\left(p + \omega - \delta + 1, p + \omega + \delta, 2p + 1; \frac{1}{1 + q}\right) = 0, \quad (4.57)$$

où les paramètres δ , p et ω sont définis par :

$$\begin{cases} \delta = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 8\frac{(E_{n_r} + M)V_1}{\alpha^2 q}}, \\ p = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} + 2V_2)}, \\ \omega = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} - 2V_2)}. \end{cases} \quad (4.58)$$

L'équation (4.57) peut être aussi résolue numériquement.

En utilisant la fonction de Green (4.55) pour le potentiel de Rosen-Morse et le lien entre (4.49) et (4.55), nous montrons que les fonctions d'onde correspondant aux états liés ont la forme :

$$\begin{aligned} u_{n_r}^{q>0}(r) &= r\Psi_{n_r}^{q>0}(r) = C\left(\frac{1}{1 + qe^{-2\alpha r}}\right)^p \left(\frac{q}{q + e^{2\alpha r}}\right)^\omega \\ &\times {}_2F_1\left(p + \omega - \delta + 1, p + \omega + \delta, 2p + 1; \frac{1}{1 + qe^{-2\alpha r}}\right), \end{aligned} \quad (4.59)$$

où C est un facteur constant. Ces fonctions d'onde sont acceptables physiquement car elles satisfont les conditions aux limites

$$u_{n_r}^{q>0}(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 0, \quad (4.60)$$

et

$$u_{n_r}^{q>0}(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0. \quad (4.61)$$

4.5 Cas particuliers

4.5.1 Premier cas : potentiels de Manning-Rosen standard

Si l'on prend $|q| = -1$, les potentiels (4.18) deviennent le potentiel radial de Manning-Rosen standard

$$V(r) = S(r) = -\frac{V_1}{\sinh^2(\alpha r)} - V_2 \coth(\alpha r). \quad (4.62)$$

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduites à partir des expressions (4.30) et (4.31),

$$\begin{aligned} M^2 - E_{n_r, l}^2 &= \frac{(M + E_{n_r, l})^2 V_2^2}{\alpha^2 \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - 2(M + E_{n_r, l}) \frac{V_1}{\alpha^2}} \right)^2} \\ &\quad + \alpha^2 \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - 2(M + E_{n_r, l}) \frac{V_1}{\alpha^2}} \right)^2 \\ &\quad - \frac{\alpha^2}{3} l(l+1), \end{aligned} \quad (4.63)$$

et

$$\begin{aligned} u_{n_r, l}^{|q|=1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{|q|=1}(r) \\ &= \tilde{N}_{n_r, l} (1 - e^{-2\alpha r})^{\tilde{\delta}_l} (e^{-2\alpha r})^{\omega_l} P_{n_r}^{(2\omega_l, 2\tilde{\delta}_l - 1)}(1 - 2e^{-2\alpha r}), \end{aligned} \quad (4.64)$$

où

$$\begin{cases} \omega_l = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r, l}^2 - 2(M + E_{n_r, l}) V_2 + \frac{\alpha^2}{3} l(l+1)}, \\ \tilde{\delta}_l = \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - 2(M + E_{n_r, l}) \frac{V_1}{\alpha^2}}. \end{cases} \quad (4.65)$$

et

$$\tilde{N}_{n_r, l} = \left[\frac{4\alpha\omega_l (n_r + \omega_l + \tilde{\delta}_l)}{n_r + \tilde{\delta}_l} \frac{n_r! \Gamma(n_r + 2\omega_l + 2\tilde{\delta}_l)}{\Gamma(n_r + 2\omega_l + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\delta}_l)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.66)$$

4.5.2 Deuxième cas : potentiels de Rosen-Morse standard

En prenant $q = 1$, et en changeant V_2 dans $(-V_2)$, l'expression (4.1) devient ce que l'on appelle le potentiel Rosen-Morse standard

$$V(r) = S(r) = -\frac{V_1}{\cosh^2(\alpha r)} + V_2 \tanh(\alpha r). \quad (4.67)$$

Les niveaux d'énergie E_{n_r} sont déduits à partir de (4.57) par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(p + \omega - \delta + 1, p + \omega + \delta, 2p + 1; \frac{1}{2}\right) = 0, \quad (4.68)$$

et les fonctions d'onde non normalisées (4.59) deviennent dans ce cas :

$$\begin{aligned} u_{n_r}^{q=1}(r) &= r\Psi_{n_r}^{q=1}(r) = C \left(\frac{1}{1 + e^{-2\alpha r}}\right)^p \left(\frac{1}{1 + e^{2\alpha r}}\right)^\omega \\ &\quad \times {}_2F_1\left(p + \omega - \delta + 1, p + \omega + \delta, 2p + 1; \frac{1}{1 + e^{-2\alpha r}}\right), \end{aligned} \quad (4.69)$$

où p est remplacé par ω et inversement.

4.5.3 Troisième cas : potentiel de Eckart

En posant $q = 1$, et en changeant V_1 en $(-V_1)$, le potentiel (4.1) se réduit au potentiel d'Eckart :

$$V(r) = S(r) = \frac{V_1}{\cosh^2(\alpha r)} - V_2 \tanh(\alpha r). \quad (4.70)$$

La condition de quantification des niveaux d'énergie et les fonctions d'onde non normalisées peuvent être tirées des équations (4.57) et (4.59). elles s'écrivent respectivement

$${}_2F_1\left(p + \omega - \bar{\delta} + 1, p + \omega + \bar{\delta}, 2p + 1; \frac{1}{2}\right) = 0, \quad (4.71)$$

et

$$\begin{aligned}
u_{n_r}^{q=1}(r) &= r\Psi_{n_r}^{q=1}(r) = C \left(\frac{1}{1+e^{-2\alpha r}} \right)^p \left(\frac{1}{1+e^{2\alpha r}} \right)^\omega \\
&\quad \times {}_2F_1 \left(p + \omega - \bar{\delta} + 1, p + \omega + \bar{\delta}, 2p + 1; \frac{1}{1+e^{-2\alpha r}} \right), \quad (4.72)
\end{aligned}$$

avec $\bar{\delta} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 8 \frac{(E_{n_r} + M)V_1}{\alpha^2}}$.

4.5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons résolu le problème d'une particule relativiste sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux et du type de Rosen-Morse déformé par l'intégrale de chemin. Ce problème n'a été discuté que partiellement par la résolution de l'équation de Klein-Gordon [73]. Cependant, une solution complète peut être donnée pour tout paramètre de déformation $q \neq 0$. Comme nous l'avons montré, l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée à cette mixture de potentiels vecteur et scalaire égaux ne peut être évaluée d'une manière unifiée quelle que soit la valeur du paramètre de déformation q [54]. Lorsque $q \leq -1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln |q| < r < \infty$, la fonction de Green radiale pour tout état l est calculée directement en utilisant une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge. Nous obtenons alors l'équation d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes. Pour $-1 < q < 0$ ou $q > 0$, nous nous sommes limités à l'évaluation des fonctions de Green pour les ondes $s(l = 0)$. Nous avons montré que la transformation de la fonction de Green associée au potentiel de départ défini sur l'intervalle \mathbb{R}^+ en une intégrale de chemin associée au potentiel du type de Manning-Rosen ou Rosen-Morse réduit le problème à celui d'une particule forcée à se déplacer dans un demi-espace $x > x_0$. Ce problème avec des conditions aux limites de Dirichlet est traité à l'aide de l'approche des perturbations. Dans les deux cas, les conditions de quantification sont des équations transcendentes impliquant la fonction hypergéométrique qui peuvent être résolues numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie des états liés. Les fonctions d'onde radiales, exprimées en termes des fonctions hypergéométriques, sont également obtenues.

Chapitre 5

Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Tietz amélioré

5.1 Introduction

Le but de ce chapitre est d'étudier dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin, le mouvement d'une particule relativiste sans spin et de charge $(-e)$ en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux et de la forme :

$$V_q(r) = S_q(r) = V_T(r), \quad (5.1)$$

où $V_T(r)$ est le potentiel du type de Tietz amélioré dépendant de quatre paramètres. Il est défini par l'expression (2.2). Ce potentiel appartient à une large classe de potentiels du type exponentiel qui apparaît dans une série de travaux portant sur la résolution de l'équation de Klein-Gordon avec une mixture d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux. Nous pouvons mentionner, par exemple, le potentiel de Rosen-Morse déformé [48] et le potentiel déformé à cinq paramètres [73] discutés sans succès par la méthode de la supersymétrie en

mécanique quantique et l'approche de l'invariance de forme. Ce dernier système a été aussi étudié dans une formulation basée sur l'équation de Klein-Gordon pour tenter d'obtenir le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états liés des ondes $s(l = 0)$ [78]. Dans le cadre de l'approche de l'invariance de forme supersymétrique, nous pouvons citer deux tentatives de l'étude de l'équation de Klein-Gordon relative aux états liés avec un potentiel vecteur et un potentiel scalaire ayant la forme du potentiel de Rosen-Morse amélioré [70] et celle du potentiel de Tietz amélioré [40].

Enfin, dans un espace à D dimensions, deux essais de résolution de l'équation de Klein-Gordon avec une mixture de potentiels vecteur et scalaire de Rosen-Morse et de Rosen-Morse amélioré sont présentés en utilisant la méthode de Nikiforov-Uvarov [68] et l'approche de l'approximation WKB en supersymétrie [72].

Comme les techniques employées dans les articles cités ci-dessus mènent à des résultats partiellement satisfaisants, il est utile de reprendre l'étude formelle de ce problème par l'approche des intégrales de chemin.

Dans un premier paragraphe, nous allons formuler l'intégrale de chemin pour la fonction de Green radiale associée aux potentiels (5.1) en introduisant des fonctions régulatrices afin d'obtenir une intégrale de chemin stable. Nous traitons les potentiels de Hulthén généralisés ($q < 0$) dans un second paragraphe en envisageant deux cas : $q \leq -1$ et $-1 < q < 0$. Lorsque $q \leq -1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln |q| < r < +\infty$, nous montrons qu'il est possible d'établir la fonction de Green radiale associée aux ondes l en adoptant une approximation appropriée pour remplacer le terme potentiel centrifuge. Nous en déduisons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées. Pour $-1 < q < 0$, comme l'approximation utilisée dans le cas précédent n'est plus valable, nous nous contentons de la construction de la fonction de Green relative aux ondes $s(l = 0)$ à l'aide de la méthode des perturbations pour incorporer les conditions aux limites de Dirichlet. Les pôles de la fonction de Green donne une équation transcendante qu'il faut résoudre numériquement pour connaître les niveaux d'énergie. Dans un troisième paragraphe, nous calculons comme précédemment la fonction de Green associée également aux ondes $s(l = 0)$ avec des potentiels de Woods-Saxon généralisés ($q > 0$) pour déterminer l'équation de quantification transcendante des niveaux d'énergie des états liés. Enfin, dans un dernier paragraphe, nous considérons des potentiels de Hulthén standard, des potentiels de Woods-Saxon et des

potentiels de Morse comme des cas particuliers.

5.2 Fonction de Green

Pour aborder le problème de la recherche des états stationnaires d'une particule sans spin en présence d'un champ composé d'un potentiel vecteur $V_q(r)$ et d'un potentiel scalaire $S_q(r)$ par l'approche des intégrales de chemin de Feynman, nous nous préoccupons du calcul de la fonction de Green satisfaisant à l'équation de Klein-Gordon suivante :

$$\left[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2 \right] G(x'', x') = \delta^4(x'', x'), \quad (5.2)$$

où $eA = \begin{pmatrix} V_q(r) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$ et M est la masse d'une particule de charge $(-e)$. Nous entamons ce problème en nous servant de la représentation intégrale de Schwinger [17] pour représenter la fonction de Green sous la forme [79–83] :

$$G(x'', x') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \left\langle x'' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2 \right] \Lambda \right\} \right| x' \right\rangle. \quad (5.3)$$

Ici Λ joue le rôle de nouveau paramètre pseudo-temporel. Comme les potentiels $V_q(r)$ et $S_q(r)$ possèdent la symétrie sphérique, nous faisons l'étude de ce système en coordonnées polaires. Par conséquent, la fonction de Green (5.3) peut se développer en ondes partielles ainsi :

$$G_l(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (5.4)$$

où $P_l(\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta$ avec $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\varphi'' - \varphi')$ et la fonction de Green radiale est définie par :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \left\langle r'', t'' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] \right\} \Lambda \right| r', t' \right\rangle. \quad (5.5)$$

Suivant Kleinert [16], nous pouvons représenter cette expression par une intégrale de chemin par rapport au pseudo-temps S' de la façon suivante :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'', t'', r', t'; S'), \quad (5.6)$$

dans laquelle le propagateur transformé est donné sous la forme canonique compacte par :

$$\begin{aligned} P_l(r'', t'', r', t') &= f_R(r'') f_L(r') \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} S' f_L(r) \left[-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] f_R(r) \right\} \\ &= f_R(r'') f_L(r') \int Dr(s') Dt(s') \int \frac{DP_r(s') DP_0(s')}{(2\pi)^2} \\ &\quad \times \exp \left\{ i \int_0^{s'} -P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r) \left[(-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] f_R(r) ds' \right\}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Sous forme discrète, il s'écrit explicitement

$$\begin{aligned} P_l(r'', t'', r', t'; S') &= f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n dt_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \\ &\quad \times \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_1^n \right], \end{aligned} \quad (5.8)$$

dans lequel nous avons introduit les fonctions régulatrices $f_L(r)$ et $f_R(r)$ définies par Kleinert [16] de la façon suivante :

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r), \quad (5.9)$$

où λ est le paramètre de dédoublement. L'intégrale de chemin (5.8) comporte l'action élémentaire

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) \left[-(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2 \right] f_R(r_{n-1}), \end{aligned} \quad (5.10)$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_{s'} = \frac{s'}{N+1} = ds' = \frac{ds}{f_L(r_n)f_R(r_{n-1})}, \quad ds = \varepsilon_s = \frac{\Lambda}{N+1}. \quad (5.11)$$

Nous voyons tout d'abord que le calcul des intégrales sur les variables t_n dans l'expression (5.8) donne N distributions de Dirac $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$. En effectuant ensuite les intégrations sur les variables $(P_0)_n$, nous devons avoir :

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots = (P_0)_{N+1} = E. \quad (5.12)$$

Il s'ensuit que le propagateur $P_l(r'', t'', r', t'; S')$ se simplifie et se réécrit sous la forme :

$$P_l(r'', t'', r', t'; S') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; S'), \quad (5.13)$$

dans laquelle le noyau $P_l(r'', r'; S')$ est défini par :

$$P_l(r'', r'; S') = f_R(r'') f_L(r') \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right], \quad (5.14)$$

avec l'action élémentaire

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_2^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} f_L(r_n) [-(P_r)_n^2 \\ &\quad - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + (E - V_q(r_n))^2 - (M + S_q(r_n))^2] f_R(r_{n-1}). \end{aligned} \quad (5.15)$$

En reportant l'expression (5.13) dans (5.6), nous observons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle S' . Par conséquent, nous pouvons récrire la fonction de Green partielle (5.6) sous la forme

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (5.16)$$

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'', r'; S'). \quad (5.17)$$

Pour faciliter l'évaluation du noyau $P_l(r'', r'; S')$, nous donnons au paramètre de dédoublement la valeur $\lambda = \frac{1}{2}$, c'est à dire, nous faisons le choix d'un développement de l'action et de la mesure autour du point moyen puisque le résultat final ne dépend d'aucun point [16]. Alors, en calculant toutes les intégrales sur les variables $(P_r)_n$, nous obtenons

$$P_l(r'', r'; S') = \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'} f(r_n)}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \mathcal{A}_2^n \right\}, \quad (5.18)$$

où l'action élémentaire \mathcal{A}_2^n dans l'espace des configurations est donnée par :

$$\mathcal{A}_2^n = \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_{s'} \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left[M^2 - E^2 + 2(M + E)V_q(r_n) + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right] \sqrt{f(r_n)f(r_{n-1})}. \quad (5.19)$$

Cette intégrale de chemin (5.18) dépend du paramètre réel arbitraire de déformation q par l'intermédiaire de $V_q(r_n)$. De plus, elle ne peut pas être évaluée exactement à cause de la présence du terme centrifuge dans l'expression de l'action lorsque nous nous intéressons à l'étude des ondes l . Néanmoins, il a été prouvé [52, 84] que l'expression $\frac{4\alpha^2|q|e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r} - |q|)^2} + \frac{\alpha^2}{3}$ peut être utilisée comme une très bonne approximation du terme centrifuge $\frac{1}{r^2}$ lorsque le paramètre $q \leq -1$ et $2\alpha r \ll 1$.

Nous allons consacrer le reste de ce chapitre au calcul de la fonction de Green (5.17) en considérant les trois cas suivants : $q \leq -1$, $-1 < q < 0$ et $q > 0$.

5.3 Potentiels de Hulthén généralisés

Lorsque le paramètre de déformation q est négatif, les potentiels (5.1) représentent des formes générales du potentiel de Hulthén [85]. Si $-1 < q < 0$, les potentiels (5.1) sont continus sur tout l'intervalle \mathbb{R}^+ , mais, pour $q \leq -1$, ils ont une forte singularité au point $r = r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$, créant une barrière infranchissable, et dans ce cas, nous avons deux régions distinctes,

l'une est définie par l'intervalle $]0, r_0[$ et l'autre par l'intervalle $]r_0, +\infty[$. Ceci nous amène à construire la fonction de Green radiale (5.17) par l'intégrale de chemin dans chaque cas.

5.3.1 Premier cas : $q \leq -1$

Dans ce cas, nous allons discuter l'intégrale de chemin pour les potentiels (5.1) seulement dans l'intervalle $]\frac{1}{2\alpha} \ln |q|, +\infty[$ puisque dans l'autre intervalle, la solution ne présente aucun intérêt physique notable et de plus, elle ne peut pas être obtenue analytiquement. Afin de construire l'intégrale de chemin pour un état de moment cinétique orbital l , nous remplaçons d'abord $\frac{1}{r^2}$ approximativement par $\frac{4\alpha^2|q|e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r}-|q|)^2} + \frac{\alpha^2}{3}$ et nous effectuons ensuite la transformation spatiale

$$r \in]r_0, +\infty[\rightarrow \xi \in]-\infty, +\infty[\quad (5.20)$$

définie par :

$$r = g(\xi) = \frac{1}{2\alpha} \ln [\exp(4\alpha\xi) + |q|], \quad (5.21)$$

accompagnée de la fonction régulatrice appropriée

$$f(r(\xi)) = g'^2(\xi) = \frac{\exp(4\alpha\xi)}{\cosh_{|q|}^2(2\alpha\xi)}. \quad (5.22)$$

Sous ces transformations, le noyau (5.18) devient

$$\begin{aligned}
P_l(r'', r'; S') &= [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\xi_n \right] \\
&\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta\xi_n)^2}{2\varepsilon_{s'}} + \frac{1}{8\varepsilon_{s'}} \left(\frac{g''^2}{g'^2} - \frac{2g'''}{g'} \right) (\Delta\xi_n)^4 \right. \right. \\
&\quad - 4\alpha^2 \left(\frac{\nu^2}{|q|^2} + \epsilon^2 + \frac{13}{12}l(l+1) \right) \varepsilon_{s'} \\
&\quad + 2\alpha^2 \left(\frac{\nu^2}{|q|} + |q| \epsilon^2 + \beta^2 + \frac{|q|}{12}l(l+1) \right) \varepsilon_{s'} \frac{1}{\cosh_{|q|}^2(2\alpha\xi_n)} \\
&\quad \left. \left. - 4\alpha^2 \left(\epsilon^2 - \frac{\nu^2}{|q|^2} - \frac{11}{12}l(l+1) \right) \varepsilon_{s'} \tanh_{|q|}(2\alpha\xi_n) \right] \right\}, \quad (5.23)
\end{aligned}$$

où les paramètres ϵ, β et ν sont définis par :

$$\begin{cases} \epsilon = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E^2 + 2D_e(M + E)}, \\ \beta = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{4aD_e(M + E)}, \\ \nu = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{2a^2D_e(M + E)}, \end{cases} \quad (5.24)$$

avec $a = e^{2\alpha r_e} + q$.

Dans les équations (5.22) et (5.23), nous avons utilisé les fonctions hyperboliques déformées introduites pour la première fois par Arai [9]. Par définition

$$\cosh_{|q|} x = \frac{1}{2} (e^x + |q| e^{-x}) ; \quad \sinh_{|q|} x = \frac{1}{2} (e^x - |q| e^{-x}) ; \quad \tanh_{|q|} x = \frac{\sinh_{|q|} x}{\cosh_{|q|} x}, \quad (5.25)$$

où q est un paramètre réel.

Notons que le terme en $(\Delta\xi_n)^4$ qui apparait dans l'expression de l'action contenue dans le noyau (5.23) a une contribution significative dans l'intégrale de chemin. Elle peut être évaluée au moyen de la théorie des perturbations en remplaçant $\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle$ par :

$$\langle (\Delta\xi_n)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left(\frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{2\varepsilon_{s'}} (\Delta\xi_n)^2 \right] = -3\varepsilon_{s'}^2. \quad (5.26)$$

Le changement de variables $u_n = 2\alpha\xi_n$ et $\varepsilon_\sigma = 4\alpha^2\varepsilon_{s'}$ nous permet de mettre la fonction de Green (5.17), pour les états l , sous la forme :

$$G_l(r'', r') = -\frac{1}{4\alpha} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_l), \quad (5.27)$$

où

$$G_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_l) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_l\sigma) P_{RM}^l(u'', u'; \sigma), \quad (5.28)$$

avec

$$\tilde{E}_l = -\left(\frac{\nu^2}{|q|^2} + \epsilon^2 + \frac{13}{12}l(l+1) + \frac{1}{4}\right), \quad (5.29)$$

et

$$P_{RM}^l(u'', u'; \sigma) = \int Du(\tau) \exp\left\{i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - V_{RM}^l(u)\right] d\tau\right\} \quad (5.30)$$

est le propagateur relatif au potentiel de Rosen-Morse [3] (ou potentiel de Pöschl-Teller modifié général) défini en termes des fonctions hyperboliques déformées ainsi :

$$V_{RM}^l(u) = A_l \tanh_{|q|}(u) - \frac{B_l}{\cosh_{|q|}^2(u)}; \quad u \in \mathbb{R}, \quad (5.31)$$

avec les paramètres A_l et B_l définis par :

$$\begin{cases} A_l = \epsilon^2 - \frac{\nu^2}{|q|^2} - \frac{11}{12}l(l+1) - \frac{1}{4}, \\ B_l = \frac{1}{2} \left(|q| \epsilon^2 + \frac{\nu^2}{|q|} + \beta^2 + \frac{|q|}{12}l(l+1) - \frac{|q|}{4} \right). \end{cases} \quad (5.32)$$

Comme la solution exacte de la fonction de Green (5.28) est bien connue dans la littérature [23, 52, 53], nous pouvons donc écrire directement le résultat :

$$\begin{aligned}
G_{RM}^l(u'', u'; \tilde{E}_l) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{1 - \tanh_{|q|} u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh_{|q|} u''}{2} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left(\frac{1 + \tanh_{|q|} u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh_{|q|} u''}{2} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1}{2} (1 + \tanh_{|q|} u_{>}) \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1}{2} (1 - \tanh_{|q|} u_{<}) \right), \tag{5.33}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé les notations suivantes :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \left(\frac{1}{16} + 2E_{PT'} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ E_{PT'} = \frac{1}{2} \left(\frac{\nu^2}{|q|^2} + \frac{\beta^2}{|q|} + \epsilon^2 + \frac{1}{12} l(l+1) \right) - \frac{1}{32}, \\ M_1 = \tilde{\epsilon} + \delta_{l\pm} + \frac{1}{2}; M_2 = \tilde{\epsilon} - \delta_{l\pm} - \frac{1}{2}, \end{cases} \tag{5.34}$$

avec

$$\delta_{l\pm} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{\nu^2}{|q|^2} + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2}, \quad \tilde{\epsilon} = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{1}{12} l(l+1)}. \tag{5.35}$$

Dans la suite, nous devons prendre $\delta_l = \delta_{l+}$, pour éviter la chute de la particule sur le centre [55]. Compte tenu des relations entre les variables r, ξ et u , nous obtenons pour la fonction de Green radiale $G_l(r'', r')$ relative au potentiel (5.1), dans le cas où $q \leq -1$ et dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ l'expression :

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r') &= -\frac{1}{2\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \left(|q|^2 e^{-2\alpha(r''+r')} \right)^{\frac{M_1 + M_2}{2}} \\
&\times \left[\left(1 - |q| e^{-2\alpha r''} \right) \left(1 - |q| e^{-2\alpha r'} \right) \right]^{\frac{M_1 - M_2 + 1}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; 1 - |q| e^{-2\alpha r'} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; |q| e^{-2\alpha r''} \right). \tag{5.36}
\end{aligned}$$

Le spectre d'énergie est déterminé par l'équation

$$M^2 - E_{n_r, l}^2 = 4\alpha^2 \left[\frac{(n_r + \frac{1}{2})^2 + (l + \frac{1}{2})^2 + (2n_r + 1) \sqrt{\frac{(M+E_{n_r, l})^2 a^2 D_e}{2\alpha^2 |q|^2} + (l + \frac{1}{2})^2} - \frac{(M+E_{n_r, l}) a D_e}{\alpha^2 |q|}}{2 \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{(M+E_{n_r, l})^2 a^2 D_e}{2\alpha^2 |q|^2} + (l + \frac{1}{2})^2} \right)} \right]^2 - 2(M + E_{n_r, l}) D_e - \frac{\alpha^2 l(l+1)}{3}, \quad (5.37)$$

et les fonctions d'onde sont données par :

$$u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) = r \Psi_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) = \mathcal{A}_{n_r, l} (1 - |q| e^{-2\alpha r})^{\delta_l + 1} (|q| e^{-2\alpha r})^{\tilde{\epsilon}_{n_r, l}} \times {}_2F_1(-n_r, n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 2\delta_l + 2, 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 1; |q| e^{-2\alpha r}). \quad (5.38)$$

En utilisant la relation entre les fonctions hypergéométriques et les polynômes de Jacobi (voir Ref. [15], p. 952, Eq. (8.406.1))

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1\left(-n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-t}{2}\right), \quad (5.39)$$

les fonctions d'onde (5.38) s'écrivent sous la forme :

$$u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) = \mathcal{N}_{n_r, l} (1 - |q| e^{-2\alpha r})^{\delta_l + 1} (|q| e^{-2\alpha r})^{\tilde{\epsilon}_{n_r, l}} P_{n_r}^{(2\tilde{\epsilon}_{n_r, l}, 2\delta_l + 1)}(1 - 2|q| e^{-2\alpha r}), \quad (5.40)$$

où $\mathcal{N}_{n_r, l}$ est le facteur normalisant qui se calcule à l'aide de la condition de normalisation

$$\int_{\frac{1}{2\alpha} \ln |q|}^{\infty} \left| u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) \right|^2 dr = 1. \quad (5.41)$$

Tous calculs faits, on trouve

$$\mathcal{N}_{n_r, l} = \left[\frac{4\alpha\tilde{\epsilon}_{n_r, l} (n_r + \tilde{\epsilon}_{n_r, l} + \delta_l + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 2\delta_l + 2)}{n_r + \delta_l + 1} \frac{1}{n_r! \Gamma(n_r + 2\delta_l + 2)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{\Gamma(2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 1)}. \quad (5.42)$$

Ensuite, nous devons vérifier que les fonctions d'onde radiales (5.40) satisfont les conditions aux limites

$$\lim_{r \rightarrow r_0} u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) = 0, \quad (5.43)$$

et

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u_{n_r, l}^{q \leq -1}(r) = 0. \quad (5.44)$$

5.3.2 Deuxième cas : $-1 < q < 0$ et $r \in \mathbb{R}^+$.

Lorsque $-1 < q < 0$, les potentiels (5.1) sont définis sur l'intervalle \mathbb{R}^+ . Dans ce cas, le changement de variable (5.21) transforme $r \in \mathbb{R}^+$ en $u = 2\alpha\xi \in]\frac{1}{2} \ln(1 - |q|), +\infty[$. Ceci signifie que le noyau (5.30), pour $l = 0$, est le propagateur qui décrit le mouvement d'une particule placée dans un potentiel du type de Rosen-Morse q -déformé défini sur la demi-droite $u > u_0 = \frac{1}{2} \ln(1 - |q|)$. Comme un calcul direct par l'intégrale de chemin n'est pas possible, le problème peut être résolu à l'aide d'une astuce qui consiste à introduire un terme auxiliaire représenté par une fonction δ de Dirac dans l'expression de l'action contenue dans l'équation (5.30) pour former un mur impénétrable [23, 77] au point $u = u_0 = \frac{1}{2} \ln(1 - |q|)$. Alors, la fonction de Green (5.28), pour $l = 0$, devient

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P^\delta(u'', u'; \sigma), \quad (5.45)$$

où

$$P^\delta(u'', u'; \sigma) = \int Du(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - V^\delta(u) \right] d\tau \right\}. \quad (5.46)$$

Cette intégrale de chemin (5.46) peut être interprétée comme étant le propagateur d'une particule soumise à un potentiel de la forme :

$$V^\delta(u) = V_{RM}^0(u) - \eta\delta(u - u_0). \quad (5.47)$$

où $V_{RM}^0(u)$ est l'expression du potentiel (5.31) correspondant à $l = 0$. Comme il est tout à fait apparent, vu la forme non triviale du potentiel (5.47), que le calcul par l'intégrale de chemin de l'équation (5.45) ne peut pas être effectué directement. Dans ce cas, il est commode d'appliquer l'approche des perturbations qui consiste à exprimer $\exp\left[i\eta \int_{\tau'}^{\tau''} \delta(u - u_0) d\tau\right]$ en série de puissances. Alors, l'équation (5.46) peut s'écrire de cette façon :

$$\begin{aligned} P^\delta(u'', u'; \sigma) &= P_{RM}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\eta)^n}{n!} \prod_{j=1}^n \left[\int_{\tau'}^{\tau_{j+1}} d\tau_j \int_{-\infty}^{+\infty} du_j \right] \\ &\quad \times P_{RM}^0(u_1, u'; \tau_1 - \tau') \delta(u_1 - u_0) P_{RM}^0(u_2, u_1; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\quad \times \delta(u_{n-1} - u_0) P_{RM}^0(u_n, u_{n-1}; \tau_n - \tau_{n-1}) \delta(u_n - u_0) \\ &\quad \times P_{RM}^0(u'', u_n; \tau'' - \tau_n) \\ &= P_{RM}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\eta)^n \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau_n \int_{\tau'}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_1 \\ &\quad \times P_{RM}^0(u_0, u'; \tau_1 - \tau') P_{RM}^0(u_0, u_0; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\quad \times P_{RM}^0(u_0, u_0; \tau_n - \tau_{n-1}) P_{RM}^0(u'', u_0; \tau'' - \tau_n), \end{aligned} \quad (5.48)$$

où nous avons ordonné le temps ainsi $\tau' = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n < \tau_{n+1} = \tau''$ et $\sigma = \tau'' - \tau'$. Pour effectuer les intégrations successives sur les variable τ_j dans l'équation (5.48), nous insérons (5.48) dans (5.45), et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de Fourier, il est possible d'écrire

$$G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0) G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) - \frac{1}{\eta}}, \quad (5.49)$$

où $G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green associée au potentiel de Rosen-Morse déformé (5.31) pour les onde $s(l = 0)$. Ici les quantités \tilde{E}_0 et δ_0 sont données par :

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{|q|^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4}\right), \\ \delta_0 = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{\nu^2}{|q|^2} + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (5.50)$$

Si maintenant nous prenons la limite $\eta \rightarrow -\infty$, le système physique est forcé de se déplacer dans le potentiel $V_{RM}^0(u)$ borné par une barrière infiniment répulsive [77, 86] au point $u = u_0$. Dans ce cas, la fonction de Green, pour $l = 0$, s'écrit comme suit

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{4\alpha} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0), \quad (5.51)$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0) &= \lim_{\eta \rightarrow -\infty} G_{RM}^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) \\ &= G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0) G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (5.52), c'est à dire, par l'équation $G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) = 0$, ou encore par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(\delta + \epsilon_{n_r} - \tilde{Q}_{n_r}, \delta + \epsilon_{n_r} + \tilde{Q}_{n_r}, 2\delta; 1 - |q|\right) = 0, \quad (5.53)$$

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

En utilisant la relation entre (5.51) et (5.52) pour $l = 0$, la formule de transformation de Gauss (2.31) et en revenant à la variable radiale à l'aide de (5.21), nous obtenons, pour les fonctions d'onde correspondantes aux états liés, l'expression suivante :

$$\begin{aligned} u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) &= r \Psi_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) = \mathcal{N} (1 - |q| e^{-2\alpha r})^\delta (|q| e^{-2\alpha r})^{\epsilon_{n_r}} \\ &\times {}_2F_1\left(\delta + \epsilon_{n_r} - \tilde{Q}_{n_r}, \delta + \epsilon_{n_r} + \tilde{Q}_{n_r}, 2\delta; 1 - |q| e^{-2\alpha r}\right), \end{aligned} \quad (5.54)$$

où \mathcal{N} est un facteur constant.

5.4 Potentiels de Woods- Saxon généralisés

Considérons le cas où le paramètre de déformation q est positif. Les potentiels (5.1) représentent une généralisation du potentiel de Woods-Saxon [56] définie dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . Pour réduire l'intégrale de chemin (5.18), pour $l = 0$, à une forme résoluble, nous appliquons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow \xi \in \left] \frac{1}{4\alpha} \ln(1+q), +\infty \right[\quad (5.55)$$

définie dans ce cas par :

$$r = g(r) = \frac{1}{2\alpha} \ln [\exp(4\alpha\xi) - q], \quad (5.56)$$

et nous introduisons la fonction régularisatrice

$$f(r(\xi)) = g'^2(\xi) = \frac{\exp(4\alpha\xi)}{\sinh_q^2(2\alpha\xi)}. \quad (5.57)$$

Après quelques calculs simples et semblables à ceux effectués dans le paragraphe précédent, la fonction de Green radiale (5.17) peut s'exprimer en termes de la nouvelle variable ξ et du nouveau temps S' . Ensuite, en effectuant les changements $y = 2\alpha\xi - \ln \sqrt{q}$ et $\varepsilon_{s'} = (2\alpha)^{-2} \varepsilon_\sigma$, nous pouvons écrire (5.17), pour les états $l = 0$, sous la forme suivante :

$$G_0(r'', r') = -\frac{1}{4\alpha} [f(r'') f(r')]^{\frac{1}{4}} \tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0), \quad (5.58)$$

où

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = i \int_0^\infty d\sigma \exp(i\tilde{E}_0\sigma) P_{MR}(y'', y'; \sigma), \quad (5.59)$$

avec

$$\tilde{E}_0 = -\left(\frac{\nu^2}{q^2} + \epsilon^2 + \frac{1}{4} \right), \quad (5.60)$$

et

$$P_{MR}(y'', y'; \sigma) = \int Dy(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[\frac{y'^2}{2} + A_0 \coth y - \frac{B_0}{q \sinh^2 y} \right] d\tau \right\}. \quad (5.61)$$

Les constantes A_0 et B_0 sont données par :

$$\begin{cases} A_0 = \frac{\nu^2}{q^2} - \epsilon^2 + \frac{1}{4}, \\ B_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\nu^2}{q} + q\epsilon^2 - \beta^2 - \frac{q}{4} \right). \end{cases} \quad (5.62)$$

Le propagateur (5.61) a une forme semblable à l'intégrale de chemin relative au potentiel de Manning et Rosen [4] dénoté $V_{MR}(y)$ et qui est défini pour $y \in \mathbb{R}^+$, mais, dans le cas présent, nous avons converti l'intégrale de chemin pour les potentiels (5.1) en une intégrale de chemin pour le potentiel de Manning et Rosen par la transformation $r \rightarrow r(y)$ qui fait correspondre $\mathbb{R}^+ \rightarrow \left] \frac{1}{2} \ln(1 + \frac{1}{q}), \infty \right[$. Ceci signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite $y > y_0 = \frac{1}{2} \ln(1 + \frac{1}{q})$. Pour calculer la fonction de Green (5.59), pour $l = 0$, nous procédons comme dans le paragraphe précédent. Tous calculs faits, nous obtenons

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y'; \tilde{E}_0) = G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{MR}^0(y'', y_0; \tilde{E}_0) G_{MR}^0(y_0, y'; \tilde{E}_0)}{G_{MR}^0(y_0, y_0; \tilde{E}_0)}, \quad (5.63)$$

où $G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green associée au potentiel standard de Manning et Rosen [4]

$$V_{MR}(y) = -A_0 \coth y + \frac{B_0}{q \sinh^2 y}; \quad y > 0. \quad (5.64)$$

Comme sa solution exacte est connue [51], nous pouvons alors écrire directement le résultat :

$$\begin{aligned}
G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{2}{1 + \coth y''} \cdot \frac{2}{1 + \coth y'} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\
&\times \left(\frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \cdot \frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}} \right),
\end{aligned} \tag{5.65}$$

dans lequel nous avons employé les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{2(A_0 - \tilde{E}_0)} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}}, \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} \left(2\sqrt{\frac{2B_0}{q} + \frac{1}{4}} \pm \sqrt{-2(A_0 + \tilde{E}_0)} \right) = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}} \pm \epsilon. \end{array} \right. \tag{5.66}$$

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.

Le spectre d'énergie pour les états liés est déterminé à partir des pôles de la fonction de Green (5.63), c'est à dire, par l'équation $G_{MR}^0(y_0, y_0; \tilde{E}_0) = 0$, ou encore par la condition de quantification suivante :

$${}_2F_1(1 + \epsilon_{n_r} + Q_{n_r} - \delta, \epsilon_{n_r} + \delta + Q_{n_r}, 2\epsilon_{n_r} + 1; \frac{q}{q+1}) = 0. \tag{5.67}$$

C'est une équation transcendante impliquant la fonction hypergéométrique. Dans le cas actuel, nous avons pour les paramètres les valeurs :

$$\delta = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{\nu^2}{q^2}}, \quad Q_{n_r} = \sqrt{\epsilon_{n_r}^2 + \frac{\nu^2}{q^2} - \frac{\beta^2}{q}}. \tag{5.68}$$

Par conséquent, pour déterminer les niveaux d'énergie discrets, on doit résoudre numériquement l'équation transcendante (5.67). Les fonctions d'onde des états liés correspondantes

au spectre d'énergie donné par l'équation (5.67) s'écrivent :

$$u_{n_r}^{q>0}(r) = r\Psi_{n_r}^{q>0}(r) = \mathcal{N} \left(\frac{q}{e^{2\alpha r} + q} \right)^{\epsilon_{n_r}} \left(\frac{1}{1 + qe^{-2\alpha r}} \right)^{Q_{n_r} - \frac{1}{2}} \times {}_2F_1 \left(1 + \epsilon_{n_r} + Q_{n_r} - \delta, \epsilon_{n_r} + \delta + Q_{n_r}, 2\epsilon_{n_r} + 1; \frac{q}{e^{2\alpha r} + q} \right), \quad (5.69)$$

où \mathcal{N} est un facteur constant.

5.5 Cas particuliers

5.5.1 Premier cas : potentiels de Hulthén standard

En posant $q = -1$ dans la définition (5.1), nous obtenons les potentiels de Hulthén standard

$$V_{-1}(r) = S_{-1}(r) = D_e \left(1 - \frac{e^{2\alpha r_e} - 1}{e^{2\alpha r} - 1} \right)^2. \quad (5.70)$$

Le paramètre δ_l défini par l'expression (5.35) peut s'écrire

$$\delta_l = -\frac{1}{2} + \sqrt{\nu^2 + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2}. \quad (5.71)$$

Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés peuvent être déduits respectivement à partir des équations (5.37) et (5.38). Ils valent

$$M^2 - E_{n_r, l}^2 = 4\alpha^2 \left[\frac{\frac{aD_e(M+E_{n_r, l})}{\alpha^2} - \left(\left(n_r + \frac{1}{2} \right)^2 + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + (2n_r + 1) \sqrt{\frac{a^2 D_e(M+E_{n_r, l})}{2\alpha^2} + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2} \right)}{2 \left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{a^2 D_e(M+E_{n_r, l})}{2\alpha^2} + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2} \right)} \right]^2 - 2(M + E_{n_r, l}) D_e - \frac{\alpha^2 l(l+1)}{3}, \quad (5.72)$$

et

$$\begin{aligned}
u_{n_r,l}^{q=-1}(r) &= r \Psi_{n_r,l}^{q=-1}(r) \\
&= \left[\frac{4\alpha \tilde{\epsilon}_{n_r,l} (n_r + \tilde{\epsilon}_{n_r,l} + \delta_l + 1)}{n_r + \delta_l + 1} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 1) \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 2\delta_l + 2)}{n_r! \Gamma(n_r + 2\delta_l + 2)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \frac{1}{\Gamma(2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 1)} (1 - e^{-2\alpha r})^{\delta_l + 1} (e^{-2\alpha r})^{\tilde{\epsilon}_{n_r,l}} \\
&\quad \times {}_2F_1(-n_r, n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 2\delta_l + 2, 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 1; e^{-2\alpha r}). \tag{5.73}
\end{aligned}$$

Dans le cas des ondes s ($l = 0$), ces résultats coïncident avec ceux obtenus également par l'approche des intégrales de chemin dans la Ref. [83].

5.5.2 Deuxième cas : potentiels de Woods-Saxon

En prenant $q = e^{2\alpha R}$ et en supposant $2\alpha R \gg 1$, les expressions (5.1) prennent la forme du potentiel de Woods-Saxon

$$V_{WS}(r) = D_e \left(1 - \frac{e^{2\alpha(r_e - R)} + 1}{e^{2\alpha(r - R)} + 1} \right)^2. \tag{5.74}$$

Le paramètre R est la largeur du potentiel et α^{-1} étant l'épaisseur de surface.

Dans ce cas, la condition de quantification pour les états $l = 0$ peut être déterminée à l'aide de la formule de transformation de Gauss (2.31) et en notant que $\frac{q}{q+1} \simeq 1$ pour $2\alpha R \gg 1$. Nous montrons, après quelques calculs simples, que l'équation (5.67) se met sous la forme :

$$\frac{\Gamma(2Q) \Gamma(1 + \epsilon - \delta - Q) \Gamma(\epsilon + \delta - Q)}{\Gamma(-2Q) \Gamma(1 + \epsilon - \delta + Q) \Gamma(\epsilon + \delta + Q)} (e^{-2\alpha R})^{-2Q} = -1. \tag{5.75}$$

Afin de simplifier la discussion de cette équation (5.75), nous considérons uniquement le cas où $Q^2 < 0$, ce qui signifie que le nombre Q est imaginaire pur. En posant

$$Q = i\mu, \tag{5.76}$$

et en définissant ϕ_1, ϕ_2 et ψ ainsi :

$$\begin{cases} \phi_1 = \arg \Gamma(\epsilon + \delta + i\mu), \\ \phi_2 = \arg \Gamma(\epsilon - \delta + i\mu), \\ \psi = \arg \Gamma(2i\mu), \end{cases} \quad (5.77)$$

nous pouvons réécrire (5.75) sous la forme :

$$\exp \left[2i\psi - 2i\phi_1 - 2i\phi_2 - 2i \arctan \left(\frac{\mu}{\epsilon - \delta} \right) \right] (e^{-2\alpha R})^{-2i\mu} = -1. \quad (5.78)$$

Cette équation conduit à la condition de quantification suivante :

$$2\mu\alpha R + \psi - \phi_1 - \phi_2 - \arctan \left(\frac{\mu}{\epsilon - \delta} \right) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (5.79)$$

avec $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

5.5.3 Troisième cas : potentiels de Morse

En posant $q = 0$ dans l'expression (5.1), nous obtenons le potentiel radial de Morse

$$V_M(r) = D_e \left(1 - e^{-2\alpha(r-r_e)} \right)^2. \quad (5.80)$$

Le paramètre D_e représente la profondeur du puits de potentiel et r_e est la distance d'équilibre entre les deux noyaux.

Dans ce cas, nous pouvons voir à partir des équations (5.68) que

$$\begin{cases} \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \frac{\nu}{q}, & Q \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{\nu}{q}, \\ 1 + \epsilon + Q - \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu}, \\ \epsilon + Q + \delta \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \epsilon - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} + \frac{2\nu}{q} \underset{q \rightarrow 0}{\rightarrow} \infty. \end{cases} \quad (5.81)$$

D'autre part, en utilisant la formule (2.65), il est facile de montrer qu'à la limite où $q \rightarrow 0$, les fonctions d'onde (5.69) se réduisent à

$$\begin{aligned}
u_{n_r}^{q=0}(r) &= r \Psi_{n_r}^{q=0}(r) \\
&= \mathcal{N} (e^{-2\alpha r})^{\epsilon_{n_r}} \exp(-\nu e^{-2\alpha r}) {}_1F_1 \left(\frac{1}{2} + \epsilon_{n_r} - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu}, 2\epsilon_{n_r} + 1; 2\nu e^{-2\alpha r} \right). \quad (5.82)
\end{aligned}$$

Le spectre d'énergie peut être tiré de la condition à la limite au point $r = 0$. En admettant que $2\nu e^{-2\alpha r_e} \gg 1$ et en utilisant le comportement asymptotique, nous pouvons voir facilement à partir de l'expression (5.81) que la condition de quantification de l'énergie est donnée par :

$$\frac{1}{2} + \epsilon_{n_r} - \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\nu} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (5.83)$$

ou encore

$$M^2 - E_{n_r}^2 = 4\alpha^2 \left[\left(n_r + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \frac{\sqrt{2D_e (E_{n_r} + M)}}{\alpha} \right]. \quad (5.84)$$

5.6 Conclusion

Comme dans le contexte non relativiste, nous constatons ici aussi que le potentiel vecteur et le potentiel scalaire du type de Tietz amélioré comprennent trois formes particulières de potentiel selon la valeur que prend le paramètre réel q qu'il faut envisager lors de la construction de la fonction de Green radiale. En toute rigueur, nous avons d'abord introduit une fonction régulatrice lors de la formulation de l'intégrale de chemin pour contourner le problème de la singularité des potentiels à l'origine de la variable radiale et avoir une expression discrète stable du propagateur. Notons bien que ce problème négligé dans les autres applications et pris en considération ici est sans conséquence sur les résultats obtenus.

Lorsque le paramètre de déformation q est négatif, nous avons vu que deux cas sont présents : $q \leq -1$ et $-1 < q < 0$. Dans le premier cas, nous avons remplacé le terme potentiel centrifuge par une expression approximative analogue à celle du potentiel de Hulthén q -déformé. L'ensemble composé des potentiels de Hulthén généralisés et de cette approximation a été converti à l'aide d'une transformation spatiale accompagnée d'une fonction régulatrice appropriée en un potentiel du type de Rosen-Morse q -déformé. La fonction de Green associée à l'onde l a été

obtenue sous une forme compacte à partir de laquelle le spectre d'énergie et les fonctions d'onde proprement normalisées ont été déduits. Pour $-1 < q < 0$, nous avons appliqué la méthode du développement en série de perturbation pour introduire les conditions aux limites de Dirichlet dans l'expression de l'intégrale de chemin. La fonction de Green relative aux ondes $s(l = 0)$ a été calculée sous forme compacte. L'équation de quantification de l'énergie a été obtenue ainsi que les fonctions d'onde. Dans le cas où q est positif, les potentiels de départ sont équivalents à des potentiels de Woods-Saxon généralisés. Un traitement comme celui qui est utilisé dans le cas précédent nous a fourni la fonction de Green, l'équation de quantification de l'énergie et les fonctions d'onde pour les états $s(l = 0)$. Signalons enfin que les potentiels de Hulthén standard ($q = -1$), les potentiels de Woods-Saxon ($q = e^{2\alpha R}$) et les potentiels de Morse ($q = 0$) ont été discutés comme des cas particuliers.

Chapitre 6

Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Tietz-Wei

6.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de traiter, en détail dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin, le problème d'une particule relativiste sans spin de masse M et de charge $(-e)$ plongée dans un champ central constitué d'un potentiel vecteur $V(r)$ et d'un potentiel scalaire $S(r)$. Le potentiel scalaire est ajouté à la masse au repos de la particule et l'ensemble peut être interprété comme une masse effective dépendant de la position. Les potentiels $V(r)$ et $S(r)$ sont égaux et de la forme :

$$V(r) = S(r) = V_{TW}(r), \quad (6.1)$$

où $V_{TW}(r)$ est le potentiel de Tietz-Wei défini par l'expression (3.1).

Parmi les travaux récents sur ce problème, citons par exemple celui sur la résolution de l'équation de Klein-Gordon pour les ondes $s(l = 0)$ [87] et celui réalisé dans le cadre de l'ap-

proche de l'analyse fonctionnelle pour traiter les ondes $l \neq 0$ à l'aide de l'approximation de Pekeris [34]. Mentionnons aussi celui sur l'application de la méthode de Nikiforov-Uvarov pour résoudre l'équation de Klein-Gordon avec un potentiel scalaire et un potentiel vecteur du type de Tietz-Wei généralisé pour une onde l arbitraire dans un espace à D dimensions [32]. Cependant, il faut noter que les résultats de ces études ne sont pas satisfaisants, quelle que soit la valeur du paramètre de déformation. Par conséquent, un traitement rigoureux et complet de ce problème qui tient compte de l'influence de ce paramètre mérite d'être effectué.

Dans un premier paragraphe, nous formulons l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée aux potentiels $V(r)$ et $S(r)$ égaux à $V_{TW}(r)$. Nous traitons les potentiels $V(r)$ et $S(r)$ comme étant des potentiels de Manning-Rosen déformés ($0 < c_h < 1$) dans le second paragraphe en distinguant deux cas : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$ et $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$. Lorsque $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$ et $r_e + \frac{1}{b_h} \ln c_h < r < \infty$, nous montrons sans difficultés que la fonction de Green radiale associée à l'onde l est calculable sous une forme compacte en choisissant une approximation appropriée pour le terme potentiel centrifuge. Nous en déduisons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées. Pour $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$, comme l'approximation utilisée dans le cas précédent ne convient pas, nous nous limitons à l'évaluation de la fonction de Green relative aux ondes $s(l = 0)$. Dans ce cas, nous employons la méthode des perturbations pour incorporer les conditions aux limites de Dirichlet dans l'intégrale de chemin. L'équation pour déterminer les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde non normalisées peuvent être extraites respectivement à partir des pôles et des résidus de la fonction de Green. Dans le troisième paragraphe, nous abordons le cas où $-1 < c_h < 0$. Ici, les potentiels $V(r)$ et $S(r)$ sont similaires au potentiel de Rosen-Morse déformé. Nous établissons la fonction de Green correspondante également aux ondes $s(l = 0)$ pour tirer l'équation d'énergie et les fonctions d'onde comme dans le cas précédent. Dans le quatrième paragraphe, nous considérons le problème du potentiel de Morse radial ($c_h = 0$). Le dernier paragraphe sera une conclusion.

6.2 Fonction de Green

La fonction de Green associée à un système physique se déplaçant dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire à symétrie sphérique se développe en ondes partielles [62] en coordonnées

sphériques

$$G(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos \Theta), \quad (6.2)$$

où la fonction de Green radiale est donnée par :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} d\Lambda \left\langle r'', t'' \left| \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[-P_r^2 + (P_0 - V)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M+S)^2 \right] \Lambda \right\} \right| r', t' \right\rangle, \quad (6.3)$$

et $P_l(\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta$ avec $\cos \Theta = \frac{\vec{r}'' \cdot \vec{r}'}{r'' r'} = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta'' \sin \theta' \cos(\varphi'' - \varphi')$.

Dans la formulation de Feynman [16, 21], la fonction de Green radiale $G_l(r'', t'', r', t')$ est explicitement exprimée sous la forme d'une intégrale de chemin

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} d\Lambda P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda), \quad (6.4)$$

où le noyau $P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda)$ s'écrit explicitement ainsi :

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n dt_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \\ \times \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} \left(-(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon \Lambda}{2} \left[-(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + ((P_0)_n - V(r_n))^2 - (M+S(r_n))^2 \right] \right) \right], \quad (6.5)$$

dans lequel nous avons utilisé les notations habituelles suivantes : $\Delta r_n = r_n - r_{n-1}$, $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$, $r_n = r(t_n)$, $\varepsilon \Lambda = \frac{\Lambda}{N+1}$.

Pour procéder à l'évaluation de la fonction de Green (6.4), remarquons d'abord que le calcul des intégrales sur les variables t_n dans l'expression (6.5) donnent N distributions de Dirac $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$. En intégrant ensuite sur les variables $(P_0)_n$, on montre que

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots = (P_0)_{N+1} = E. \quad (6.6)$$

Par conséquent, le propagateur $P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda)$ se réécrit de cette façon :

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; \Lambda), \quad (6.7)$$

avec le noyau $P_l(r'', r'; \Lambda)$ donné par :

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; \Lambda) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[-(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon \Lambda}{2} [-(P_r)_n^2 + (E - V(r_n))^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S(r_n))^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

En effectuant ensuite l'intégration par rapport aux variables $(P_r)_n$, nous obtenons

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; \Lambda) &= \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon\Lambda}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon\Lambda}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon\Lambda} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\varepsilon\Lambda}{2} \left([M + S(r_n)]^2 - [E - V(r_n)]^2 + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

et en remplaçant l'expression (6.7) dans (6.4), nous remarquons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle Λ . Alors, nous pouvons récrire la fonction de Green partielle (6.4) sous la forme :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp [iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (6.10)$$

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{+\infty} d\Lambda P_l(r'', r'; \Lambda). \quad (6.11)$$

Comme le potentiel vecteur et le potentiel scalaire sont égaux au potentiel de Tietz-Wei, la fonction de Green radiale (6.11) se réduit à

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{+\infty} d\Lambda \exp \left[\frac{i}{2} (E^2 - M^2) \Lambda \right] K_l(r'', r'; \Lambda), \quad (6.12)$$

avec

$$K_l(r'', r'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon\Lambda}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon\Lambda}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon\Lambda} - \frac{\varepsilon\Lambda}{2} \left(2(E+M)V_{TW}(r_n) + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right) \right] \right\}. \quad (6.13)$$

Le propagateur radial (6.13) et la fonction de Green radiale (6.12) dépendent d'un paramètre de déformation réel arbitraire c_h . Lorsque $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ ou $-1 < c_h < 0$, la fonction de Green (6.12) peut être évaluée exactement seulement pour les états s , mais, quand $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$, le problème d'un état l peut être résolu en utilisant une approximation appropriée du terme centrifuge. Alors pour entreprendre cette étude, trois cas intéressants doivent être distingués selon les valeurs de c_h .

6.3 Potentiels radiaux de Manning-Rosen déformés

Lorsque le paramètre de déformation c_h est positif, c'est à dire $0 < c_h < 1$, le potentiel de Tietz-Wei prend la forme du potentiel de Manning-Rosen c_h -déformé défini par l'expression (3.9). Comme nous l'avons fait dans le paragraphe (3.3), nous allons former la fonction de Green radiale (6.12) en observant deux cas distincts : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$ et $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$.

6.3.1 Premier cas : $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$

Dans ce cas, nous allons discuter l'intégrale de chemin seulement dans l'intervalle $]r_0, +\infty[$ avec $r_0 = r_e + \frac{1}{b_h} \ln c_h$, puisque dans l'intervalle $]0, r_0[$, la solution ne peut être obtenue analytiquement et de plus, elle ne présente aucun intérêt physique notable. Afin de construire l'intégrale de chemin pour un état de moment cinétique orbital l , comme dans le sous paragraphe (3.3.1) nous adoptons l'approximation (3.11) pour remplacer $\frac{1}{r^2}$ contenu dans le terme potentiel centrifuge et nous transformons ensuite la variable $r \in]r_0, +\infty[$ en une nouvelle variable $y \in]0, +\infty[$ par :

$$r = r_e + \frac{1}{b_h} (2y + \ln c_h). \quad (6.14)$$

En plus de ce changement de variable, nous transformons l'intervalle de temps local ε_Λ en un nouvel intervalle de temps $\frac{4}{b_h^2}\varepsilon_s$ et $\Lambda = \frac{4}{b_h^2}S$. En mettant ces considérations ensemble, nous pouvons récrire la fonction de Green (6.12), pour $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$, sous la forme :

$$\tilde{G}_l(r'', r') = -\frac{1}{b_h} G_{MR}(y'', y'; E_l^2), \quad (6.15)$$

avec

$$G_{MR}(y'', y'; E_l^2) = i \int_0^\infty dS \exp\left(i \frac{4}{b_h^2} E_l^2 S\right) K_{MR}^l(y'', y'; S), \quad (6.16)$$

où

$$E_l^2 = \frac{E^2 - M^2}{2} - (M + E) V_0 - \frac{l(l+1)}{2} \left(C_0 - \frac{B_0}{2c_h} + \frac{A_0}{2c_h^2} \right), \quad (6.17)$$

et

$$K_{MR}^l(y'', y'; S) = \int D_y(s) \exp\left\{i \int_0^S \left[\frac{\dot{y}^2}{2} - V_{MR}^l(y) \right] ds\right\}, \quad (6.18)$$

est le propagateur associé au potentiel standard de Manning-Rosen [4]

$$V_{MR}^l(y) = -\tilde{A}_l \coth y + \frac{\tilde{B}_l}{\sinh^2 y}; \quad y \in \mathbb{R}^+, \quad (6.19)$$

où les paramètres \tilde{A}_l et \tilde{B}_l sont donnés par :

$$\begin{cases} \tilde{A}_l = \frac{1}{b_h^2} \left[4(E+M)V_1 - l(l+1) \left(\frac{B_0}{c_h} - \frac{A_0}{c_h^2} \right) \right], \\ \tilde{B}_l = \frac{1}{b_h^2} \left[\frac{4(E+M)}{c_h} V_2 + \frac{l(l+1)}{2c_h^2} A_0 \right]. \end{cases} \quad (6.20)$$

La fonction de Green peut être exprimée sous forme compacte comme cela est connu dans la littérature [51–53]

$$\begin{aligned}
G_{MR}(y'', y'; E_l^2) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{2}{1 + \coth y'} \cdot \frac{2}{1 + \coth y''} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\
&\times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \cdot \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{\coth y_{<} + 1} \right).
\end{aligned} \tag{6.21}$$

Les quantités L_E , M_1 et M_2 sont données par :

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E) [M - E + 2(V_1 + V_0)] + l(l + 1) \left(C_0 - \frac{B_0}{c_h} + \frac{A_0}{c_h^2} \right)}, \\ M_{1,2} = \delta_l \pm \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E) [M - E - 2(V_1 - V_0)] + l(l + 1) C_0}. \end{cases} \tag{6.22}$$

avec

$$\delta_l = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8(M + E)}{b_h^2 c_h} V_2 + \frac{l(l + 1)}{b_h^2 c_h^2} A_0}. \tag{6.23}$$

Le spectre d'énergie des états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (6.21) ou des pôles de la fonction d'Euler $\Gamma(M_1 - L_E)$. Ces pôles sont donnés par :

$$M_1 - L_E = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \tag{6.24}$$

En insérant les valeurs de L_E et M_1 dans (6.24), nous obtenons

$$M^2 - E_{n_r, l}^2 = -2(M + E_{n_r, l}) V_0 - l(l + 1) \left(C_0 + \frac{A_0}{2c_h^2} - \frac{B_0}{2c_h} \right) + \frac{b_h^2}{4} \left[N_r^2 + \frac{\lambda_l^2}{N_r^2} \right], \tag{6.25}$$

avec

$$N_r = n_r + \delta_l + \frac{1}{2}, \quad (6.26)$$

et

$$\lambda_l = \frac{4(M + E_{n_r, l})}{b_h^2} V_1 - \frac{l(l+1)}{b_h^2} \left(\frac{A_0}{c_h^2} - \frac{B_0}{c_h} \right). \quad (6.27)$$

Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{n_r, l}(r) &= \mathcal{N}_{n_r, l} \left(1 - c_h e^{-b_h(r-r_e)} \right)^{\frac{1}{2} + \delta_l} \left(c_h e^{-b_h(r-r_e)} \right)^{\gamma_l} \\ &\quad \times P_{n_r}^{(2\gamma_l, 2\delta_l)}(1 - 2c_h e^{-b_h(r-r_e)}), \end{aligned} \quad (6.28)$$

avec le paramètre γ_l défini par :

$$\gamma_l = \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E_{n_r, l}) [M - E_{n_r, l} - 2(V_1 - V_0)] + l(l+1)C_0}, \quad (6.29)$$

et la constante $\mathcal{N}_{n_r, l}$ s'obtient à partir de la condition de normalisation

$$\int_{r_e + \frac{1}{b_h} \ln c_h}^{+\infty} |\mathcal{U}_{n_r, l}(r)|^2 dr = 1. \quad (6.30)$$

Le calcul mène à

$$\mathcal{N}_{n_r, l} = \left[\frac{2b_h \gamma_l (n_r + \gamma_l + \delta_l + \frac{1}{2})}{n_r + \delta_l + \frac{1}{2}} \frac{n_r! \Gamma(n_r + 2\gamma_l + 2\delta_l + 1)}{\Gamma(n_r + 2\gamma_l + 1) \Gamma(n_r + 2\delta_l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.31)$$

6.3.2 Deuxième cas : $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ et $r \in \mathbb{R}^+$.

Dans ce cas, le potentiel (3.9) est défini dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . La transformation $r = r_e + \frac{1}{b_h} (2y + \ln c_h)$ convertit $r \in]0, +\infty[$ en $y \in]-\frac{1}{2}(b_h r_e + \ln c_h), +\infty[$. Cela signifie que le noyau (6.13), pour $l = 0$, est le propagateur décrivant l'évolution d'une particule en présence d'un potentiel de type Manning-Rosen sur la demi-droite $y > y_0 = -\frac{1}{2}(b_h r_e + \ln c_h)$. En effectuant la transformation temporelle $\Lambda = \frac{4S}{b_h^2}$, nous pouvons récrire (6.12), pour $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ et $l = 0$, ainsi

$$\check{G}_0(r'', r') = -\frac{1}{b_h} \tilde{G}_{MR}^0(y'', y''; E_0^2), \quad (6.32)$$

avec

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y''; E_0^2) = i \int_0^\infty dS \exp\left(i \frac{4}{b_h^2} E_0^2 S\right) K_{MR}^0(y'', y'; S), \quad (6.33)$$

où

$$E_0^2 = \frac{E^2 - M^2}{2} - (M + E) V_0, \quad (6.34)$$

et

$$K_{MR}^0(y'', y'; S) = \int Dy(s) \exp\left\{i \int_0^S \left[\frac{\dot{y}^2}{2} + \tilde{A}_0 \coth y - \frac{\tilde{B}_0}{\sinh^2 y}\right] ds\right\}; \quad y > y_0, \quad (6.35)$$

avec les constantes \tilde{A}_0 et \tilde{B}_0 données comme suit :

$$\begin{cases} \tilde{A}_0 = \frac{4(E+M)}{b_h^2} V_1, \\ \tilde{B}_0 = \frac{4(E+M)}{b_h^2 c_h} V_2. \end{cases} \quad (6.36)$$

Le propagateur $K_{MR}^0(y'', y'; S)$ décrit le mouvement d'une particule soumise au potentiel de Manning-Rosen défini sur la demi droite $y > y_0$. Comme une intégration directe des chemins n'est pas possible, nous pouvons construire la fonction de Green correspondante en termes de la fonction de Green dans l'intervalle \mathbb{R}^+ à l'aide de la méthode de développement en série de perturbation discutée en détail dans la littérature [51–53] et qu'il n'est pas nécessaire de rappeler ici. Tous calculs faits, nous trouvons

$$\tilde{G}_{MR}^0(y'', y''; E_0^2) = G_{MR}^0(y'', y'; E_0^2) - \frac{G_{MR}^0(y'', y_0; E_0^2) G_{MR}^0(y_0, y'; E_0^2)}{G_{MR}^0(y_0, y_0; E_0^2)}, \quad (6.37)$$

où $G_{MR}^0(y'', y'; E_0^2)$ est la fonction de Green (6.21) associée au potentiel de Manning-Rosen (6.19), pour les ondes $s(l=0)$ et $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$.

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (6.37), c'est à dire, par

l'équation $G_{MR}^0(y_0, y_0; E_0^2) = 0$, ou bien par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(\frac{1}{2} + \delta_0 - \gamma_0 + \omega_0, \frac{1}{2} + \delta_0 + \gamma_0 + \omega_0, 2\gamma_0 + 1; c_h e^{b_h r_e}\right) = 0, \quad (6.38)$$

où les quantités δ_0, γ_0 et ω_0 sont définies par :

$$\begin{cases} \delta_0 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8(M+E_{n_r})}{b_h^2 c_h} V_2}, \\ \gamma_0 = \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E_{n_r}) [M - E_{n_r} - 2(V_1 - V_0)]}, \\ \omega_0 = \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E_{n_r}) [M - E_{n_r} + 2(V_1 + V_0)]}. \end{cases} \quad (6.39)$$

L'équation transcendante (6.38) peut être résolue numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie de la molécule diatomique. Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{n_r}(r) &= \mathcal{C} \left(1 - c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right)^{\delta_0 + \frac{1}{2}} \left(c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right)^{\gamma_0} \\ &\times {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + \delta_0 + \omega_0 - \gamma_0, \frac{1}{2} + \delta_0 + \gamma_0 + \omega_0, 2\gamma_0 + 1; c_h e^{-b_h(r-r_e)}\right), \end{aligned} \quad (6.40)$$

où \mathcal{C} est un facteur constant. Notons que ces fonctions d'onde satisfont bien les conditions aux limites

$$\mathcal{U}_{n_r}(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 0, \quad (6.41)$$

et

$$\mathcal{U}_{n_r}(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0. \quad (6.42)$$

6.4 Potentiels radiaux de Rosen-Morse

Pour $-1 < c_h < 0$, le potentiel de Tietz-Wei est analogue au potentiel de Rosen-Morse c_h -déformé défini par l'expression (3.39) et comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le sous paragraphe (3.3.1) ne s'applique pas au cas du potentiel de Rosen-Morse

(voir, par exemple, la discussion sur la validité d'une approximation de ce type dans notre précédent travail [54]), nous nous contenterons de l'étude des ondes $s(l = 0)$ en évaluant la fonction de Green afin de trouver les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes des états liés. Dans ce cas, la fonction de Green radiale (6.12) s'écrit

$$\widehat{G}_0(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^{+\infty} d\Lambda \exp \left[i\widetilde{E}_0^2 \Lambda \right] \widehat{K}_0(r'', r'; \Lambda), \quad (6.43)$$

où le propagateur $\widehat{K}_0(r'', r'; \Lambda)$ est donné par :

$$\begin{aligned} \widehat{K}_0(r'', r'; \Lambda) = & \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\Lambda}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dr_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\Lambda}} \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\Lambda} \right. \right. \\ & \left. \left. - \varepsilon_\Lambda (E + M) V_{TW}(r_n) \right] \right\}, \quad \text{pour } -1 < c_h < 0. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Pour évaluer la fonction de Green (6.43), nous effectuons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in]0, +\infty[\rightarrow u \in]u_0, +\infty[; \quad u_0 = -\frac{1}{2} (b_h r_e + \ln |c_h|), \quad (6.45)$$

définie par :

$$r = r_e + \frac{1}{b_h} (2u + \ln |c_h|). \quad (6.46)$$

Après avoir changé ε_Λ en $\alpha^{-2}\varepsilon_s$ ou Λ en $\alpha^{-2}S$, nous pouvons écrire la fonction de Green (6.43), sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \widehat{G}_0(r'', r') &= -\frac{1}{b_h} \widetilde{G}_{RM}^0(u'', u'; \widetilde{E}_0^2) \\ &= -\frac{i}{b_h} \int_0^\infty \exp \left(i \frac{4\widetilde{E}_0^2}{b_h^2} S \right) K_{RM}^0(u'', u'; S), \end{aligned} \quad (6.47)$$

où

$$\tilde{E}_0^2 = \frac{E^2 - M^2}{2} - (M + E)U_0, \quad (6.48)$$

et

$$K_{RM}^0(u'', u'; S) = \int Du(s) \exp \left\{ i \int_0^S \left[\frac{\dot{u}^2}{2} - \tilde{A} \tanh u + \frac{\tilde{B}}{|c_h| \cosh^2 u} \right] ds \right\}; \quad u > u_0. \quad (6.49)$$

Les constantes \tilde{A} et \tilde{B} sont données par :

$$\begin{cases} \tilde{A} = \frac{4}{b_h^2} (E + M) U_1, \\ \tilde{B} = \frac{4}{b_h^2} (E + M) U_2. \end{cases} \quad (6.50)$$

Le propagateur (6.49) a la même forme que l'intégrale de chemin associée au potentiel introduit à l'origine par Rosen et Morse pour discuter les états de vibration des molécules polyatomiques [3]. Le potentiel de Rosen-Morse est défini pour $u \in \mathbb{R}$, mais dans ce cas, nous avons transformé l'intégrale de chemin pour le potentiel (3.1) en une intégrale de chemin pour un potentiel du type de Rosen-Morse standard via la transformation $r \rightarrow r(u)$ qui convertit $r \in \mathbb{R}^+ \rightarrow u \in]-\frac{1}{2}(b_h r_e + \ln |c_h|), +\infty[$. Ceci signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite $u > u_0 = -\frac{1}{2}(b_h r_e + \ln |c_h|)$.

$$\tilde{G}_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0^2) = G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0^2) - \frac{G_{RM}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0^2) G_{RM}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0^2)}{G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0^2)}, \quad (6.51)$$

où $G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0^2)$ est la fonction de Green associée au potentiel standard de Rosen-Morse [3]

$$V_{RM}(u) = \tilde{A} \tanh u - \frac{\tilde{B}}{|c_h| \cosh^2 u}; \quad u \in \mathbb{R}, \quad (6.52)$$

avec la fonction Green $G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0^2)$ donnée par :

$$\begin{aligned}
G_{RM}^0(u'', u'; \tilde{E}_0^2) &= \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left(\frac{1 - \tanh u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh u''}{2} \right)^{(M_1 + M_2)/2} \\
&\times \left(\frac{1 + \tanh u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh u''}{2} \right)^{(M_1 - M_2)/2} \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1 + \tanh u_{>}}{2} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{1 - \tanh u_{<}}{2} \right),
\end{aligned} \tag{6.53}$$

dans laquelle nous avons employé les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8(E+M)}{b_h^2 |c_h|} U_2}, \\ M_{1,2} = \frac{1}{b_h} \left(\sqrt{(M+E)[M-E+2(U_0+U_1)]} \pm \sqrt{(M+E)[M-E+2(U_0-U_1)]} \right). \end{array} \right. \tag{6.54}$$

Les niveaux d'énergie des états liés sont déterminés à partir des pôles de la fonction de Green (6.53), c'est à dire, par l'équation $G_{RM}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0^2) = 0$, ou encore par la condition de quantification suivante qui est une équation transcendante comprenant la fonction hypergéométrique

$${}_2F_1 \left(\tilde{\gamma} + \tilde{\omega} - \tilde{Q} + 1, \tilde{\gamma} + \tilde{\omega} + \tilde{Q}, 2\tilde{\gamma} + 1; \frac{|c_h|}{|c_h| + e^{-b_h r_e}} \right) = 0, \tag{6.55}$$

où les paramètres \tilde{Q} , $\tilde{\gamma}$ et $\tilde{\omega}$ sont définis par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{Q} = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8(E_{n_r} + M)}{b_h^2 |c_h|} U_2}, \\ \tilde{\gamma} = \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E_{n_r}) [M - E_{n_r} + 2(U_0 + U_1)]}, \\ \tilde{\omega} = \frac{1}{b_h} \sqrt{(M + E_{n_r}) [M - E_{n_r} + 2(U_0 - U_1)]}. \end{array} \right. \tag{6.56}$$

L'équation (6.55) peut être aussi résolue numériquement.

En utilisant la fonction de Green (6.53) pour le potentiel de Rosen-Morse et le lien entre

(6.47) et (6.53), nous montrons que les fonctions d'onde correspondant aux états liés ont la forme :

$$\begin{aligned} \widehat{U}_{n_r}(r) = \mathcal{C} & \left(\frac{|c_h|}{|c_h| + e^{b_h(r-r_e)}} \right)^{\tilde{\gamma}} \left(\frac{1}{1 + |c_h| e^{-b_h(r-r_e)}} \right)^{\tilde{\omega}} \\ & \times {}_2F_1 \left(\tilde{\gamma} + \tilde{\omega} - \tilde{Q} + 1, \tilde{\gamma} + \tilde{\omega} + \tilde{Q}, 2\tilde{\gamma} + 1; \frac{|c_h|}{|c_h| + e^{b_h(r-r_e)}} \right), \end{aligned} \quad (6.57)$$

où \mathcal{C} est un facteur constant. Ces fonctions d'onde sont acceptables physiquement car elles satisfont les conditions aux limites

$$\widehat{U}_{n_r}(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 0, \quad (6.58)$$

et

$$\widehat{U}_{n_r}(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0. \quad (6.59)$$

6.5 Potentiels de Morse

En faisant tendre c_h vers 0, dans l'expression (3.1), le potentiel de Tietz-Wei se réduit au potentiel radial de Morse

$$V_M(r) = D \left(1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right)^2. \quad (6.60)$$

Dans ce cas, on peut voir à partir des équations (6.56) que

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{Q} \underset{|c_h| \rightarrow 0}{\simeq} \frac{1}{2} + \tilde{\lambda} \left(1 + \frac{1}{|c_h|} \right), \\ \tilde{\gamma} \underset{|c_h| \rightarrow 0}{\simeq} \tilde{\mu}, \\ \tilde{\omega} \underset{|c_h| \rightarrow 0}{\simeq} \frac{\tilde{\lambda}}{|c_h|}, \end{array} \right. \quad (6.61)$$

expressions dans lesquelles nous avons posé

$$\tilde{\mu} = \frac{1}{\beta} \sqrt{M^2 - E^2 + 2D(E + M)}, \quad (6.62)$$

et

$$\tilde{\lambda} = \frac{1}{\beta} \sqrt{2D(E + M)}. \quad (6.63)$$

En utilisant la propriété de la fonction hypergéométrique (2.65), les relations entre la fonction hypergéométrique confluyente et les fonctions de Whittaker (2.66) et (2.67) et la formule (2.68), nous montrons, après quelques calculs simples, que la fonction de Green (6.51) se réduit à la fonction de Green bien connue associée au potentiel radial de Morse,

$$G_M(r'', r'; E_0) = -\frac{iM}{\hbar} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \tilde{\lambda} + \tilde{\mu}\right)}{\Gamma(2\tilde{\mu} + 1) \sqrt{z'' z'}} e^{\frac{z'' + z'}{2}} M_{\tilde{\lambda}, \tilde{\mu}}(z') W_{\tilde{\lambda}, \tilde{\mu}}(z''); \quad z'' > z', \quad (6.64)$$

où $z = 2\tilde{\lambda}e^{-\beta(r-r_e)}$.

Pour déduire le spectre d'énergie, nous nous reportons à l'équation (6.55) et nous notons que

$$\begin{aligned} & \lim_{|c_h| \rightarrow 0} {}_2F_1\left(\tilde{\gamma} + \tilde{\omega} - \tilde{Q} + 1, \tilde{\gamma} + \tilde{\omega} + \tilde{Q}, 2\tilde{\gamma} + 1; \frac{|c_h|}{|c_h| + e^{-b_h r_e}}\right) \\ &= {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \tilde{\lambda} + \tilde{\mu}, 2\tilde{\mu} + 1; 2\tilde{\lambda}e^{\beta r_e}\right) = 0. \end{aligned} \quad (6.65)$$

C'est une équation transcendante compliquée à résoudre analytiquement pour déterminer les niveaux d'énergie, mais comme, en général les valeurs de $\tilde{\lambda}$ et $e^{\beta r_e}$ sont telles que $\tilde{\lambda}e^{\beta r_e} \gg 1$ pour les molécules diatomiques standard [56], nous pouvons donc utiliser le comportement asymptotique de la fonction hypergéométrique confluyente, nous pouvons voir à partir de (6.65) que la condition de quantification de l'énergie est donnée par :

$$\frac{1}{2} - \tilde{\lambda} + \tilde{\mu} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (6.66)$$

En insérant maintenant les valeurs de $\tilde{\lambda}$ et $\tilde{\mu}$ dans (6.66), on trouve les niveaux d'énergie bien connus associés au potentiel radial de Morse :

$$M^2 - E_{n_r}^2 = \beta^2 \left[\left(n_r + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \frac{2\sqrt{2D(E_{n_r} + M)}}{\beta} \right], \quad (6.67)$$

$$\text{avec } n_r \text{ max} = \left\{ \frac{\sqrt{2D(E_{n_r} + M)}}{\beta} - \frac{1}{2} \right\}.$$

De l'expression (6.64), en passant à la limite $|c_h| \rightarrow 0$, nous aurons pour les fonctions d'onde correspondantes :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{n_r}^{|c_h|=0}(r) &= \mathcal{N} \exp \left[-\frac{\sqrt{2D(E_{n_r} + M)}}{\beta} e^{-\beta(r-r_e)} \right] \left(e^{-\beta(r-r_e)} \right)^{\frac{\sqrt{2MD}}{\beta} - n_r - \frac{1}{2}} \\ &\times {}_1F_1 \left(-n_r, -2n_r + \frac{2}{\beta} \sqrt{2D(E_{n_r} + M)}; \frac{2}{\beta} \sqrt{2D(E_{n_r} + M)} e^{-\beta(r-r_e)} \right), \end{aligned} \quad (6.68)$$

où \mathcal{N} est la constante de normalisation.

6.6 conclusion

Dans ce chapitre, nous avons résolu le problème d'une particule relativiste sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux du type de Tietz-Wei déformé par l'intégrale de chemin. Ce problème n'a été discuté que partiellement par la résolution de l'équation de Klein-Gordon [73]. Cependant, une solution complète peut être donnée pour tout paramètre de déformation $|c_h| < 1$. Comme nous l'avons montré, l'intégrale de chemin pour la fonction de Green associée à cette mixture de potentiels vecteur et scalaire égaux ne peut être évaluée d'une manière unifiée quelle que soit la valeur du paramètre de déformation c_h . Lorsque $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$ et $r_e + \frac{1}{b_h} \ln c_h < r < \infty$, la fonction de Green radiale pour tout état l est calculée directement en utilisant une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge. Nous obtenons alors l'équation d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes. Pour $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ ou $-1 < c_h < 0$, nous nous sommes limités à l'évaluation des fonctions de Green pour les ondes $s(l=0)$. Nous avons montré que la transformation de la fonction de Green associée au potentiel de départ défini sur l'intervalle \mathbb{R}^+ dans une intégrale de chemin associée au potentiel du type de Manning-Rosen ou de Rosen-Morse réduit le problème à celui d'une particule forcée

à se déplacer dans un demi-espace $y > y_0$. Ce problème avec des conditions aux limites de Dirichlet est traité à l'aide de l'approche des perturbations. Dans les deux cas, les conditions de quantification sont des équations transcendantes impliquant la fonction hypergéométrique qui peuvent être résolues numériquement pour déterminer les niveaux d'énergie des états liés. Les fonctions d'onde radiales, exprimées en termes des fonctions hypergéométriques, sont également obtenues.

Conclusion

Dans ce mémoire, après avoir présenté succinctement le formalisme des intégrales de chemin de Feynman couvrant en particulier la formulation de l'intégrale de chemin en coordonnées polaires pour traiter le problème d'un potentiel à symétrie sphérique et donné quelques aperçus sur les techniques couramment employées dans le cadre de la méthode des intégrales de chemin à savoir les transformations d'espace et de temps, l'introduction de fonctions régulatrices et le développement en série entière de perturbation, nous avons repris de façon originale l'étude complète d'un ensemble de systèmes quantiques composés de molécules diatomiques en mouvement dans des modèles de potentiels centraux largement utilisés en physique théorique et en chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique non relativiste, nous nous sommes penchés d'abord sur le problème d'une particule en mouvement dans le potentiel de Tietz amélioré ayant fait l'objet de plusieurs travaux par divers techniques d'analyse dont les résultats sont partiellement corrects. Il s'agit là d'une présentation qui tient compte des valeurs possibles du paramètre de déformation q selon lesquelles ce potentiel est analogue au potentiel de Manning-Rosen radial ou au potentiel de Rosen-Morse radial pour lesquels une solution unifiée est inconcevable contrairement à ce qui a été rapporté dans la littérature [6, 10, 11] pour $q = 1$ ou celle relative au potentiel de Rosen-Morse radial déduite à partir de celle du potentiel de Rosen-Morse symétrique [13]. Dans chaque cas caractérisé par le paramètre q , l'équation d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes sont extraites de l'expression compacte de la fonction de Green.

Nous avons appliqué le traitement précédent du potentiel de Tietz amélioré au potentiel de Tietz-Wei dépendant du paramètre d'optimisation c_h défini dans l'intervalle $-1 < c_h < 1$. Comme le paramètre q contenu dans le potentiel de Tietz amélioré, le paramètre c_h revêt une

grande importance dans la façon de déterminer les solutions du problème. À la différence des discussions qu'on trouve dans un nombre impressionnant de travaux sur la spectroscopie de molécules diatomiques en présence de ce potentiel [25, 27–35, 59–61], nous avons présenté une analyse de ce problème en subdivisant judicieusement l'intervalle de variation du paramètre c_h en trois, à savoir : $-1 < c_h < 0$, $0 < c_h < e^{-b_h r_e}$ et $e^{-b_h r_e} \leq c_h < 1$. Chaque cas a nécessité un procédé de calcul distinctif pour parvenir à une solution appropriée du problème.

Par ailleurs, nous avons observé que l'expression du potentiel diatomique (potentiel de Tietz amélioré ou potentiel de Tietz-Wei) dépend d'un paramètre de déformation qui délimite la définition de la fonction potentielle et modifie par conséquent les conditions aux limites qui doivent être imposées aux solutions du problème pour qu'elles soient acceptables physiquement. Pour l'étude des états l , l'approximation utilisée à la place du terme $\frac{1}{r^2}$ contenu dans le terme potentiel centrifuge dépend des constantes A_0, B_0 et C_0 ajustables suivant le type de molécule étudiée. Elle diffère de celle de Pekeris dont les constantes sont définies en fonction du paramètre de déformation à partir du développement en série de Taylor. Ce qui réduit son application à un ensemble limité de molécules diatomiques.

Dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, nous avons réexaminé le problème d'une particule sans spin, de masse M et de charge $(-e)$ en présence d'un potentiel vecteur $V_q(r)$ et d'un potentiel scalaire $S_q(r)$ égaux et du type de Rosen-Morse déformé en distinguant ici aussi trois cas selon les valeurs que peut prendre le paramètre réel q . Nos résultats sont originaux et plus complets que ceux obtenus à travers la résolution de l'équation de Klein-Gordon [73]. Nous avons également abordé un problème semblable avec un potentiel vecteur et un potentiel scalaire égaux et du genre de Tietz amélioré dans un autre esprit en convertissant ces potentiels en ceux de Hulthén ou ceux de Woods-Saxon selon les valeurs du paramètre q . Enfin, nous avons étendu l'approche employée dans le traitement du système soumis à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type de Rosen-Morse c_h -déformé à l'étude d'un système diatomique relativiste sans spin plongé dans un champ constitué d'un potentiel vecteur et un potentiel scalaire identiques ayant la forme du potentiel de Tietz-Wei. La comparaison de nos résultats pour ces deux derniers systèmes quantiques avec ceux obtenus récemment (Jia et coll. [88], Falaye et coll. [34]) montre que les résultats de ces derniers sont incontestablement incorrects.

Pour terminer, il faut souligner que l'approche des intégrales de chemin a, entre autres bénéfices, un avantage indéniable par rapport aux variantes de la méthode d'analyse spectrale directe (algèbre de Lie et groupes, SUSYQM, Nikiforov-Uvarov, itération asymptotique,...) qui permet d'incorporer dans l'intégrale de chemin de Feynman les conditions aux limites de Dirichlet rencontrées dans le cas des potentiels déformés par un paramètre réel. Les résultats (spectre d'énergie et fonctions d'onde) obtenus sont plutôt satisfaisants.

Il faut mentionner que nos résultats sont assurément corrects puisque le spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondant à plusieurs cas particuliers bien connus dans la littérature et qui peuvent servir comme des tests ont été retrouvés.

Bibliographie

- [1] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. 79 (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [2] W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. **33** (1925) 879; M. Born et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. **34** (1925) 858; M. Born, W. Heisenberg et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. **35** (1926) 557; P. M. A. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A 109** (1925) 642; P. M. A. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford Clarindon press, London, 1958).
- [3] N. Rosen et P. M. Morse, Phys. Rev. **42** (1932) 210.
- [4] M. F. Manning et N. Rosen, Phys. Rev. **44** (1933) 953.
- [5] H. Yukawa, Proc. Phys. Math. Soc. Jpn **17** (1935) 21.
- [6] G. A. Natanzon, Theor. Math. Phys. **38** (1979) 146.
- [7] G. Pöschl et E. Teller, Z. Phys. **83** (1932) 143.
- [8] C. Eckart, Phys. Rev. **35** (1930) 1303.
- [9] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. **158** (1991) 63; J. Phys. A : Math. Gen. **34** (2001) 4281.
- [10] J. Wu, Y. Alhassid et F. Gürsey, Ann. Phys. (M.Y.) 196 (1989) 163.
- [11] A. O. Barut, A. Inomata et R. Wilson, J. Phys. A : Math. Gen. **20** (1987) 4083.
- [12] W. Jr Miller, *Lie Theorie and Special Functions* (Academic Press, New York, 1968).
- [13] M. M. Nieto, Phys. Rev. A **17** (1978) 1273.
- [14] D. W. Mc Laughlin et L. S. Schulman, J. Math. Phys. **12** (1971) 2520.
- [15] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [16] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics et Financial Markets* (5eme ed., World Scientific, Singapore, 2009).

- [17] J. Schwinger, Phys. Rev. **82** (1951) 664.
- [18] I. H. Duru et H. Kleinert, Phys. Lett. **B 84** (1979) 185.
- [19] I. H. Duru et H. Kleinert, Fortschr. Phys. **30** (1982) 401.
- [20] D. Bauch, Nuovo Cimento **B 85** (1985) 118.
- [21] R. P. Feynman et A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [22] S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Phys. Lett. **A 131** (1988) 8.
- [23] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1.
- [24] T. Tietz, J. Chem. Phys. **38** (1963) 3036.
- [25] H. Wei, Phys. Rev. **A 42** (1990) 2524.
- [26] G. A. Natanson, Phys. Rev. **A 44** (1991) 3377.
- [27] J. A. Kunc et F. J. Gordillo-Vasquez, J. Phys. Chem. **A 101** (1997) 1595.
- [28] F. J. Gordillo-Vasquez et J. A. Kunc, J. Mol. Str. (Theochem.) **425** (1998) 263.
- [29] M. Hamzavi, A. A. Rajabi et K. E. Thylwe, Int. J. Quantum Chem. **112** (2012) 2701.
- [30] M. Hamzavi, A. A. Rajabi et H. Hassanabadi, Mol. Phys. **110** (2012) 389.
- [31] S. M. Ikhdair et M. Hamzavi, Few-Body Syst. **53** (2012) 473.
- [32] A. N. Ikot, B. H. Yazarloo, A. D. Antia et H. Hassanabadi, Indian J. Phys. **87** (2013) 913.
- [33] A. K. Roy, J. Math. Chem. **52** (2014) 1405.
- [34] B. J. Falaye, K. J. Oyewumi, S. M. Ikhdair et M. Hamzavi, Phys. Scr. **89** (2014) 115204.
- [35] B. J. Falaye, S. M. Ikhdair et M. Hamzavi, J. Math. Chem. **53** (2015) 1325.
- [36] A. Khodja, F. Benamira et L. Guechi, Int. J. Quantum chem. **117** (2017) 5.
- [37] 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.
- [38] C.S. Jia, T. Chen, L. Z. Yi et S. R. Lin, J. Math. Chem. **51** (2013) 2165.
- [39] Y. Sun, S. He et C. S. Jia, Phys. Scr. **87** (2013) 025301.
- [40] J. Y. Liu, J. F. Du et C. S. Jia, Eur. Phys. J. Plus **128** (2013) 139.

- [41] J. Y. Liu, X. T. Hu et C. S. Jia, *Can. J. Chem.* **92** (2014) 40.
- [42] H. M. Tang, G. C. Liang, L. H. Zhang, F. Zhao et C. S. Jia, *Can. J. Chem.* **92** (2014) 201.
- [43] X. T. Hu, L. H. Zhang et C. S. Jia, *Can. J. Chem.* **92** (2014) 386.
- [44] C. S. Jia, J.W. Dai, L. H. Zhang, J. Y. Liu et G. D. Zhang, *Chem. Phys. Lett.* **619** (2015) 54.
- [45] O. Mustafa, *Phys. Scr.* **90** (2015) 065002.
- [46] A. Amrouche, A. Diaf et M. Hachama, *Can. J. Phys.* **95** (2017) 25.
- [47] P. M. Morse, *Phys. Rev.* **34** (1929) 57.
- [48] X. Q. Zhao, C. S. Jia et Q. B. Yang, *Phys. Lett. A* **337** (2005) 189.
- [49] C. S. Jia, J. Y. Liu et P. Q. Wang, *Phys. Lett. A* **372** (2008) 4779.
- [50] R. L. Greene et C. Aldrich, *Phys. Rev. A* **14** (1976) 2363.
- [51] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38** (2005) 2947.
- [52] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **48** (2007) 032102.
- [53] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 032301.
- [54] A. Khodja, A. Kadja, F. Benamira et L. Guechi, *Indian J. Phys.* **91** (2017) 1561.
- [55] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [56] S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics* (Springer Verlag, Berlin, 1974).
- [57] A. Nikiforov et V. Ouvarov, *Fonctions Spéciales de la Physique Mathématique* (Mir, Moscou, 1983).
- [58] A. Khodja, F. Benamira et L. Guechi, *J. Math. Phys.* **59** (2018) 042108.
- [59] D. Mikulski, M. Molski, J. Konarski et K. Eder, *J. Math. Chem.* **52** (2014) 162.
- [60] B. J. Falaye, S. M. Ikhdaïr et M. Hamzavi, *J. Theor. Appl. Phys.* **9** (2015) 151.
- [61] H. Hassanabadi, B. H. Yazarloo, S. Zarrinkamar et M. Solaimani, *Int. J. Quantum Chem.* **112** (2012) 3706.
- [62] D. Peak et A. Inomata, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1422.
- [63] H. Kleinert et I. Mustapic, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 643.

- [64] A. Kadja, F. Benamira et L. Guechi, *Indian J. Phys.* **91** (2016) 243.
- [65] K. J. Oyewumi et C. O. Akoshile, *Eur. Phys. J. Plus* **A 45** (2010) 311.
- [66] S. M. Ikhdair, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 023525.
- [67] M. R. Setare et S. Haidari, *Phys. Scr.* **81** (2010) 015201.
- [68] T. T. Ibrahim, K. J. Oyewumi et S. M. Wyngaardt, *Eur. Phys. J. Plus* **127** (2012) 100.
- [69] E. V. Aguda, *Can. J. Phys.* **91**(2013) 689.
- [70] T. Chen, S. R. Lin et C. S. Jia, *Eur. Phys. J. Plus* **128** (2013) 69.
- [71] S. M. Ikhdair et M. Hamzavi, *Chin. Phys. B* **22** (2013) 040302.
- [72] M. S. Tan, S. He et C. S. Jia, *Eur. Phys. J. Plus* **129** (2014) 264.
- [73] Y. F. Diao, Y. Z. Yi, et C. S. Jia, *Phys. Lett. A* **332** (2004) 157.
- [74] X. C. Zhang, Q. W. Liu, C. S. Jia et L. Z. Wang, *Phys. Lett. A* **340** (2005) 59.
- [75] S. M. Ikhdair, *J. Quantum Inf. Sc.* **1** (2011) 73.
- [76] A. Ghoumaid, F. Benamira et L. Guechi, *J. Math. Phys.* **57** (2016) 024102.
- [77] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, *Phys. Rev. D* **22** (1980) 3012.
- [78] L. Z. Yi, Y. F. Diao, J. Y. Liu et C. S. Jia, *Phys. Lett. A* **333** (2004) 212.
- [79] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **80** (1950) 440.
- [80] *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- [81] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Phys. scr.* **46** (1992) 289.
- [82] B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Il Nuovo Cimento B* **111** (1996) 99.
- [83] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, *Physica A* **234** (1996) 529.
- [84] A. Zouache, Thèse de Doctorat en Sciences Physiques, Université Frères Mentouri Constantine 1, Algérie (2009).
- [85] L. Hulthén, *Ark. Mat. Astron. Fys.* **A 28** (1942) 5.
- [86] M. Carreau, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 4139; M. Carreau, E. Farhi et S. Gutmann, *Phys. Rev. D* **42** (1990) 1194.

[87] G. H. Sun et S. H. Dong, Commun. Theor. Phys. **58** (2012) 195.

[88] T. Chen, S. R. Lin et C. S. Jia, Eur. Phys. J. Plus 128 (2013) 69.

دراسة كاملة لبعض الكمونات المشوهة ثنائية الذرة بواسطة تكامل المسار لفايينمان

ملخص:

يتعلق هذا العمل باستعمال شكلية تكامل المسار لفايينمان (Feynman) من اجل دراسة كاملة لمجموعة من أنظمة كمية خاضعة لبعض الكمونات ثنائية الذرة ذات التناظر الكروي التي تهتم الفيزياء النظرية وكيمياء الكم .

في إطار ميكانيكا الكم اللانسبي قمنا أولاً بعرض مسألة كمون تياز (Tietz) القطري و المحسن الذي يتعلق بوسيط تشوه q ، ذي قيمة حقيقية. ثم قمنا بعد ذلك بإعادة مناقشة الكمون القطري لتياز- واي (Tietz-Wei) الذي يتميز بوسيط تشوه c_h حيث $-1 < c_h < 1$. في كل الحالات هناك تأثير لوسيط التشوه، تم تقييم دالة غرين (Green) القطرية في شكل صم، طيف الطاقة ودوال الموجة للحالات المرتبطة.

في نطاق ميكانيكا الكم النسبي قمنا بدراسة جسيمة بدون اللف المغزلي (Spin) في وجود كمون شعاعي وكمون سلمي متساويان، لهما نفس شكل الكمون القطري لروزن- مورس (Rosen-Morse) المشوه بـ q وكمون تياز- واي (Tietz-Wei) المشوه والقطري وكمون تياز (Tietz) المحسن والمشوه. تم تحديد، في مختلف الحالات، دالة غرين (Green) القطرية على شكل صم. أطيف الطاقة ودوال الموجة قد تم تحديدها.

الكلمات المفاتيح: تكامل المسار، الناشر، دالة غرين، كمون روزن- مورس، كمون تياز، كمون تياز- واي، حالات مرتبطة.

Complete study of some deformed diatomic potentials by the Feynman path integral

Abstract:

This work is concerned with the use of the Feynman path integral formalism for the study of a set of quantum systems subjected to some spherically symmetric deformed diatomic potentials of interest in theoretical physics and in quantum chemistry.

In the framework of the nonrelativistic quantum mechanics, we first reviewed the problem of the improved radial Tietz potential that depends on the real parameter q of deformation. Next, we discussed again that of the radial Tietz-Wei potential characterized by the real parameter of deformation $-1 < c_h < 1$. In all cases concerning the deformation parameter, the radial Green's function in closed form, the energy spectrum and the wave functions of bound states are evaluated.

In the context of the relativistic quantum mechanics, the problems of a spinless relativistic particle in the presence of equal vector and scalar potentials, following the exact shape of the q -deformed radial Rosen-Morse potential, the deformed radial Tietz-Wei potential and the deformed improved radial Tietz potential are reexamined. In the different cases, the radial Green function is constructed in closed form. The energy spectra and the wave functions are determined.

Key words: Path integral, propagator, Green's function, Rosen-Morse potential, Tietz potential, Tietz-Wei potential, bound states.

Résumé :

Ce travail concerne l'utilisation du formalisme des intégrales de chemin de Feynman pour l'étude complète d'un ensemble de systèmes quantiques soumis à certains potentiels diatomiques à symétrie sphérique intéressant la physique théorique et la chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons d'abord revu le problème du potentiel radial de Tietz amélioré qui dépend du paramètre réel q de déformation. Nous avons ensuite rediscuté celui du potentiel radial de Tietz-Wei caractérisé par le paramètre réel de déformation $-1 < c_h < 1$. Dans tous les cas touchant le paramètre de déformation, la fonction de Green radiale sous forme compacte, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états liés sont évalués.

Dans le contexte de la mécanique quantique relativiste, les problèmes d'une particule relativiste sans spin en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux, épousant la forme du potentiel radial de Rosen-Morse q -déformé, du potentiel radial de Tietz-Wei déformé et du potentiel radial de Tietz amélioré déformé, sont réexaminés. Dans les différents cas, la fonction de Green radiale est construite sous forme compacte. Les spectres d'énergie et les fonctions d'onde sont déterminés.

Mots clés : Intégrale de chemin, propagateur, fonction de Green, potentiel de Rosen-Morse, potentiel de Tietz, potentiel de Tietz-Wei, états liés.