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

 N° d'ordre :

Série :

MEMOIRE PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER EN PHYSIQUE SPECIALITE : PHYSIQUE QUANTIQUE THEME

Intégrales de chemin pour un ensemble de potentiels déformés Par

Louiza AGGOUN

Soutenu le / / 2010

devant le Jury :

Président :	F. Benamira	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
Rapporteur :	L. Guechi	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
Examinateurs :	F. Benrachi	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
	S. R. Zouzou	Prof.	Univ. Mentouri- Constantine
	A. Bachkhaznadji	M. C. A	Univ. Mentouri- Constantine

Table des matières

1	Mo	Mouvement à une dimension d'une particule de Klein-Gordon dans un			
	\mathbf{pot}	entiel [.]	vecteur et un potentiel scalaire du type Rosen-Morse	7	
	1.1	Introd	uction	7	
	1.2	P. Fonction de Green			
		1.2.1	Premier cas : potentiels de Rosen-Morse déformés	12	
		1.2.2	Deuxième cas :potentiels de Manning-Rosen déformés	15	
2	2 Mouvement d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur				
et un potentiel scalaire à symétrie sphérique du type Rosen-Morse					
	2.1	Introd	uction	19	
	2.2	Foncti	on de Green	20	
	2.3	Potentiels de Manning-Rosen sphériques déformés			
		2.3.1	Premier cas : $q \leq -1$	23	
		2.3.2	Deuxième cas : $-1 < q < 0$	26	
	2.4	2.4 Potentiels de Rosen-Morse sphériques déformés			
	2.5 Cas particuliers				
		2.5.1	Premier cas : potentiels de Rosen-Morse standard	32	
		2.5.2	Deuxième cas : potentiels de Eckart	33	
3	Particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel				
	scalaire du type exponentiel à cinq paramètres 35				

3.1	Introduction		
3.2	Fonction de Green		
3.3	Potentiels de Hulthén généralisés		
	3.3.1	Premier cas : $q \leq -1$	41
	3.3.2	Deuxième cas : $-1 < q < 0$	46
3.4	Potentiels de Woods-Saxon généralisés		47
3.5 Cas particuliers			
	3.5.1	Premier cas : potentiels de Hulthén	51
	3.5.2	Deuxième cas : Potentiels de Pöschl-Teller radiaux	52
	3.5.3	Troisième cas : puits de potentiels de Rosen-Morse radiaux	53
	3.5.4	Quatrième cas : potentiels de Eckart radiaux	54
	3.5.5	Cinquième cas : potentiels de Morse radiaux	55

Introduction

La construction du formalisme des intégrales de chemin en mécanique quantique non relativiste par Feynman [1] en 1948 est basée sur les résultats de la publication d'un travail de Dirac [2] dans lequel il avait suggéré que la fonction de transformation, communément connue comme le propagateur, est analogue à $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ où S est la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi. En développant l'idée de Dirac, Feynman avait réussi à établir une nouvelle formulation de la mécanique quantique non relativiste comme une alternative aux deux formulations équivalentes proposées presque simultanément : la mécanique des matrices d'Heisenberg et de Dirac [3] et la mécanique ondulatoire de Schrödinger qui s'appuie sur des équations différentielles [4]. Sa formulation spatio-temporelles de Feynman repose sur le fait que le propagateur, solution de l'équation de Schrödinger et qui définit l'amplitude de la probabilité d'évolution d'une particule du point \vec{r}_1 à l'instant t_1 au point \vec{r}_2 à l'instant t_2 , peut être exprimé comme une somme d'une infinité d'amplitudes partielles associées à chacun des chemins d'espace-temps noté Γ qui relie les points de coordonnées (\vec{r}_1, t_1) et (\vec{r}_2, t_2) . Chaque chemin contribue au propagateur par la quantité exp $\left(\frac{i}{\hbar}S_{\Gamma}\right)$ où S_{Γ} est l'action classique évaluée le long du chemin Γ , c'est à dire $S_{\Gamma} = \int_{\Gamma} L(\vec{r}, \vec{r}, t) dt$, où $L(\vec{r}, \vec{r}, t)$ est le Lagrangien de la particule. Feynman inclut dans cette action le principe de moindre action [2] pour ignorer les chemins autres que ceux qui sont très proches du chemin classique Γ_0 où l'action est minimale. Ainsi, tandis que Dirac considérait seulement le chemin classique, Feynman a prouvé que tous les chemins contribuent, dans un sens où la particule quantique peut suivre tous les chemins et les amplitudes associées à ces chemins s'ajoutent selon le principe de superposition

habituel de la mécanique quantique. Cette formulation est particulièrement intéressante puisqu'elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique. On doit noter qu'à la limite $\hbar \to 0$, la contribution essentielle au propagateur provient des chemins qui obeïssent au principe variationnel classique $\delta S = 0$. La formulation Lagrangienne de la mécanique quantique présente de nombreux avantages. A titre d'exemple, elle se prête aisément à une généralisation relativiste puisque le raisonnement est directement inscrit dans l'espace-temps.

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

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

L'objet de ce travail concerne l'étude par l'approche des intégrales de chemin de trois systèmes dynamiques intéressant la physique théorique et la chimie quantique. Ces trois systèmes sont caractérisés par des potentiels contraignant le mouvement à se produire sur un demi axe dans certains cas. Les solutions de ces problèmes par la technique supersymétrique obtenues récemment [11, 12, 13, 14, 15] sont inexactes.

Ce mémoire comporte trois chapitres. Le premier chapitre est consacré à l'étude du

mouvement à une dimension d'une particule de Klein-Gordon chargée en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire. Ces deux potentiels sont égaux et dépendent d'un paramètre de déformation réel q. Ils sont du type Rosen-Morse modifié lorsque -1 < q < 0 ou q > 0 et du genre Manning-Rosen modifié pour $q \leq -1$. Nous construisons la fonction de Green sous forme compacte dans chaque cas. Nous obtenons les spectres d'énergie et les fonctions d'onde correspondants aux états liés à partir des pôles de la fonction de Green et de leurs résidus. Dans le deuxième chapitre, nous proposons un traitement pour le problème des mêmes types de potentiels vecteur et scalaire, mais qui possèdent la symétrie sphérique. Lorsque $q \leq -1$, nous nous trouvons dans une situation analogue à celle du deuxième cas dans le problème précédent. Dans ce cas, nous devons retrouver les mêmes résultats concernant la fonction de Green, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde. Pour -1 < q < 0 et q > 0, le problème de la construction de la fonction de Green se présente de façon différente. Dans ces cas, le potentiel de Manning-Rosen (-1 < q < 0) et celui de Rosen-Morse (q > 0) sont définis sur la demi-droite $y > y_0.$ Pour former l'intégrale de chemin, nous serons amenés à incorporer la condition à la limite de Dirichlet au point $y = y_0$ à l'aide d'une perturbation représentée par une fonction δ de Dirac à une dimension dans l'expression de l'action du système. Ce problème peut être résolu de manière directe au moyen d'un développement en série de perturbations qui peut être explicitement sommé. En supposant la force de cette perturbation infiniment répulsive, on produit l'effet qu'un mur impénétrable apparaît au point $y = y_0$ et la fonction de Green sur la demi-droite $y > y_0$ est donnée sous forme compacte. Les pôles de la fonction de Green fournissent une équation transcendante pour les niveaux d'énergie. Enfin, le troisième et dernier chapitre concerne le traitement du problème des états liés d'une particule chargée, soumise à la fois à un potentiel vecteur et un potentiel scalaire identiques, à symétrie sphérique et du type exponentiel. Ils dépendent de cinq paramètres réels parmi lesquels le paramètre q décrit la forme du potentiel. Pour -1 < q < 0 et q > 0, le problème se ramène par la technique des transformations spatio-temporelles à une intégrale de chemin qui peut être traitée de la même manière que celle utilisée dans les

cas des potentiels de Manning-Rosen et de Rosen-Morse. Lorsque $q \leq -1$ et $r > \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$, nous calculons la fonction de Green radiale relative à l'onde partielle d'ordre l au moyen d'une approximation particulière du potentiel centrifuge et d'une transformation spatiotemporelle appropriée. Nous donnons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde. Les potentiels standard de Hulthén, Pöschl-Teller, Rosen-Morse, Eckart et Morse qui sont des cas particuliers du potentiel du type exponentiel à cinq paramètres sont traités ici de manière unifiée. Nous terminons ce mémoire par une conclusion.

Chapitre 1

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

1.1 Introduction

Le potentiel de la forme

$$V(x) = A \tanh(\alpha x) - \frac{B}{\cosh^2(\alpha x)},$$
(1.1)

était introduit en 1932 par Rosen et Morse [16] pour discuter les états de vibration de certaines molécules polyatomiques. Les spectres d'énergie et les fonctions d'onde non normalisées étaient obtenues. Dans (1.1), $x \in \mathbb{R}$, A, B et α sont des constantes positives. Avec ce potentiel, Eckart [17] avait pu aussi étudier la pénétration des électrons à travers une barrière de potentiel. Le potentiel de Rosen-Morse a reçu ces dernières années un regain d'intérêt. Nieto [18] a déterminé la constante de normalisation des fonctions d'onde sous forme compacte. Il est utilisé comme modèle alternatif au potentiel de l'oscillateur harmonique dans le calcul des taux de réaction en mécanique quantique [19]. Ce potentiel a un spectre discret et continu et donc une symétrie SU(1,1) cachée. Sa solution par l'intégrale de chemin est dûe à Junker et Inomata [20], mais leur traitement est basé sur l'intégrale de chemin eu utilisant la varièté du groupe SU(2) au lieu du groupe SU(1,1). Ce potentiel a également été étudié par conversion de l'intégrale de chemin à celle associée au potentiel de Pöschl-Teller au moyen d'une transformation spatio-temporelle appropriée par Grosche[6]. Dans un travail récent [10], Grosche a discuté une généralisation particulière du potentiel (1.1) dans le cadre des intégrales de chemin. Cette généralization est basée sur l'introduction d'un paramètre réel q dans la définition des fonctions hyperboliques habituelles en posant

$$\cosh_q x = \frac{1}{2} \left(e^x + q e^{-x} \right), \\ \sinh_q x = \frac{1}{2} \left(e^x - q e^{-x} \right), \\ \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x}.$$
(1.2)

Ces nouvelles définitions des fonctions hyperboliques modifiées ont été introduites pour la première fois par Arai [21]. Ce potentiel de Rosen-Morse modifié

$$V_q(x) = A \tanh_q(\alpha x) - \frac{B}{\cosh_q^2(\alpha x)},$$
(1.3)

généralise des potentiels typiques, tels que le potentiel de Hulthén standard, le puits de potentiel de Rosen-Morse et le potentiel d'Eckart. Le paramètre q peut servir comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions interatomiques dans le cas non relativiste.

Dans le cas relativiste, Jia et ses collaborateurs [12] ont étudié l'équation de Klein-Gordon décrivant une particule de masse M et de charge (-e) en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux du type Rosen-Morse déformé

$$V_q(x) = S_q(x) = -\frac{V_1}{\cosh_q^2(\alpha x)} - V_2 \tanh_q(\alpha x).$$
(1.4)

Les solutions proposées sont incomplètes et ne sont pas rigoureusement exactes. Nous

nous proposons dans ce chapitre d'analyser ce problème dans le cadre des intégrales de chemin en envisageant tous les cas possibles suivant les valeurs réelles du paramètre de déformation q. Dans le paragraphe qui suit, nous allons établir la fonction de Green associée à une particule chargée sans spin qui se déplace sur l'axe x en présence d'un potentiel vecteur et un potentiel scalaire égaux. Dans le troisième paragraphe, nous évaluons la fonction de Green relative aux potentiels vecteur et scalaire du type Rosen-Morse déformé (-1 < q < 0 ou q > 0). Nous en déduisons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde normalisées. Dans le quatrième paragraphe, nous construisons la fonction de Green associée aux potentiels vecteur et scalaire du genre Manning-Rosen déformé ($q \leq -1$). Nous déterminons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées.

1.2 Fonction de Green

Pour établir l'intégrale de chemin relative au problème d'une particule sans spin, de masse M et de charge (-e) placée dans le champ des potentiels (1.4), considérons la fonction de Green G(x'', x') qui obeït à l'équation de Klein-Gordon :

$$\left[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2 \right] G(x'', x') = \delta^2 (x'' - x'), \tag{1.5}$$

où $eA = \begin{pmatrix} V_q(x) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$ dans l'espace-temps plat de Minkowski muni de la métrique $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1)$. En utilisant la représentation intégrale de Schwinger [22], la solution de l'équation différentielle (1.5) peut s'écrire :

$$G(x'',x') = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda \left\langle x'' \left| \exp\left[\frac{i}{2} \left[(P-eA)^{2} - (M+S_{q})^{2} \right] \Lambda \right] \right| x' \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda \left\langle x'',t'' \left| \exp\left[\frac{i}{2} \left[-P_{x}^{2} + (P_{0}-V_{q}(x))^{2} - (M+S_{q}(x))^{2} \right] \Lambda \right] \right| x',t' \right\rangle.$$

(1.6)

Notre but est de trouver les énergies E_n et les fonctions d'onde $\Psi_n^q(x)$ à partir de l'évaluation de l'expression intégrale (1.6) à l'aide de l'approche des intégrales de chemin. Suivant la référence [23], nous pouvons exprimer (1.6) comme une intégrale de chemin sous la forme discrète par rapport au pseudo-temps Λ ,

$$G(x'',x') = G(x'',t'',x',t') = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda P(x'',t'',x',t';\Lambda), \qquad (1.7)$$

où le propagateur $P(x'',t'',x',t';\Lambda)~$ est donné sous forme canonique compacte par

$$P(x'', t'', x', t'; \Lambda) = \int \int Dx(\tau) Dt(\tau) \int \int \frac{DP_x(\tau) DP_0(\tau)}{(2\pi)^2} \exp\left\{i \int_0^{\Lambda} -P_x \dot{x} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} \left[-P_x^2 + (P_0 - V_q(x))^2 - (M + S_q(x))^2\right] d\tau\right\}.$$
(1.8)

Sous forme discrète, il s'écrit :

$$P(x'', t'', x', t'; \Lambda) = \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \int dx_n dt_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \int \frac{d(P_x)_n \ d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \\ \times \exp\left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right],$$
(1.9)

où A_1^n est l'action élémentaire donné par

$$A_1^n = -(P_x)_n \Delta x_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[-(P_x)_n^2 + (P_0)_n - V_q(x_n) \right]^2 - (M + S_q(x_n))^2 \right],$$
(1.10)

avec les notations habituelles : $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$, $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$ et $\varepsilon_{\tau} = d\tau = \Lambda/(N+1)$. En intégrant tout d'abord par rapport aux variables temporelles t_n , nous obtenons N distributions de Dirac de la forme $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1}))$. En effectuant ensuite les intégrations sur les variables $(P_0)_n$, nous montrons que

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots (P_0)_{N+1} = E.$$
(1.11)

Par conséquent, on trouve pour $P_l(x'',t'',x',t';\Lambda)$ l'expression suivante :

$$P_l(x'', t'', x', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[iE(t'' - t')\right] P(x'', x'; \Lambda),$$
(1.12)

où le noyau $P(x'',x';\Lambda)$ est donné par

$$P(x'', x'; \Lambda) = \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_x)_n}{2\pi} \right] \exp\left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right], \quad (1.13)$$

avec l'action élémentaire

$$A_2^n = -(P_x)_n \Delta x_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[-(P_x)_n^2 + (E - V_q(x_n))^2 - (M + S_q(x_n))^2 \right].$$
(1.14)

En intégrant maintenant (1.13) par rapport aux variables $(P_x)_n$, nous obtenons

$$P(x'', x'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \right] \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} A_3^n \right\},$$
(1.15)

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

$$A_3^n = \frac{\Delta x_n^2}{2\varepsilon_{\tau}} - \frac{\varepsilon_{\tau}}{2} \left[(M + S_q(x_n))^2 - (E - V_q(x_n))^2 \right].$$
(1.16)

Par substitution de l'expression (1.12) dans (1.7), nous remarquons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temps Λ . Donc, nous pouvons réécrire la fonction de Green (1.7) sous la forme

$$G(x'', t'', x', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[iE(t'' - t')\right] G(x'', x'), \qquad (1.17)$$

où

$$G(x'',x') = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda \exp\left[\frac{i}{2} \left(E^2 - M^2\right)\Lambda\right] K(x'',x';\Lambda), \qquad (1.18)$$

avec

$$K(x'', x'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \right] \\ \times \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta x_n)^2}{2\varepsilon_{\tau}} - \varepsilon_{\tau} \left(M + E \right) V_q(x_n) \right] \right\}.$$
(1.19)

Pour calculer ce propagateur, nous devons distinguer deux cas.

1.2.1 Premier cas : potentiels de Rosen-Morse déformés.

Pour -1 < q < 0 ou q > 0, les potentiels (1.4) sont définis dans l'intervalle \mathbb{R} . L'intégrale de chemin (1.19) représente le propagateur associé au potentiel de Rosen-Morse défini en termes des fonctions hyperboliques déformées par le paramètre q ainsi :

$$K(x'', x'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \right] \\ \times \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta x_n)^2}{2\varepsilon_{\tau}} + \varepsilon_{\tau} \left(M + E \right) \left(V_2 \tanh_q(\alpha x_n) + \frac{V_1}{\cosh_q^2(\alpha x_n)} \right) \right] \right\}.$$
(1.20)

En changeant $(\alpha x_n, \varepsilon_{\tau})$ en $(u_n, \alpha^{-2}\varepsilon_s)$ et en posant $y_n = u_n - \frac{1}{2}\ln q$, la fonction de Green (1.18) se réécrit

$$G(x'',x') = \frac{1}{2i\alpha} \int_{0}^{\infty} dS \exp\left(i\widetilde{E}^{2}S\right) \int Dy(s) \exp\left\{i \int_{0}^{S} \left[\frac{\dot{y}^{2}}{2} - \widetilde{V}_{2} \tanh y + \frac{\widetilde{V}_{1}}{q \cosh^{2} y}\right] ds\right\},$$
(1.21)

où

$$\begin{cases} \widetilde{V}_{1} = (E+M) \frac{V_{1}}{\alpha^{2}}; & \widetilde{V}_{2} = -(E+M) \frac{V_{2}}{\alpha^{2}}; \\ \widetilde{E}^{2} = \frac{1}{2\alpha^{2}} (E^{2} - M^{2}); & S = \alpha^{2} \Lambda. \end{cases}$$
(1.22)

En adoptant la solution donnée par Grosche [10], nous aurons, par ajustement des paramètres, le résultat suivant :

$$G(x'', x') = -\frac{1}{2\alpha} G_{RM} \left(y'', y'; \tilde{E}^2 \right), \qquad (1.23)$$

avec

$$G_{RM}\left(y'',y';\tilde{E}^{2}\right) = \frac{\Gamma\left(M_{1}-L_{E}\right)\Gamma\left(L_{E}+M_{1}+1\right)}{\Gamma\left(M_{1}-M_{2}+1\right)\Gamma\left(M_{1}+M_{2}+1\right)} \\ \times \left(\frac{1-\tanh y'}{2}\frac{1-\tanh y''}{2}\right)^{(M_{1}+M_{2})/2} \\ \times \left(\frac{1+\tanh y'}{2}\frac{1+\tanh y''}{2}\right)^{(M_{1}-M_{2})/2} \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1}-L_{E},\ L_{E}+M_{1}+1,\ M_{1}-M_{2}+1;\ \frac{1+\tanh y_{>}}{2}\right) \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1}-L_{E},\ L_{E}+M_{1}+1,\ M_{1}+M_{2}+1;\ \frac{1-\tanh y_{<}}{2}\right),$$

$$(1.24)$$

où

$$L_{E} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{16} + 2E_{PT'}}; \qquad E_{PT'} = \frac{\tilde{V}_{1}}{q} + \frac{3}{32}; \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{2\left(\tilde{V}_{2} - \tilde{E}^{2}\right)} \pm \sqrt{-2\left(\tilde{V}_{2} + \tilde{E}^{2}\right)} \right).$$
(1.25)

Les symboles $y_>$ et $y_<$ dénotent le $\max(y''\ ,\ y')$ et le $\min(y''\ ,y')$ respectivement, et $_2F_1$

 $(\alpha, \beta, \gamma; z)$ représente la fonction hypergéométrique.

Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Le spectre d'énergie est obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (1.25) qui sont aussi ceux de la fonction d'Euler $\Gamma(M_1 - L_E)$ quand $M_1 - L_E = -n$ pour $n = 0, 1, 2, \dots$ Ils sont donnés par l'équation

$$\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{2\left(\widetilde{V}_2-\widetilde{E}^2\right)}+\sqrt{-2\left(\widetilde{V}_2+\widetilde{E}^2\right)}\right)-\sqrt{\frac{1}{4}+2\frac{\widetilde{V}_1}{q}}=-n,\qquad(1.26)$$

de sorte qu'on trouve les niveaux d'énergie

$$M^{2} - E_{n}^{2} = \frac{\left(M + E_{n}\right)^{2} V_{2}^{2}}{\alpha^{2} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + 8 \frac{(M + E_{n})V_{1}}{\alpha^{2}q}}\right)^{2}} + \alpha^{2} \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + 8 \frac{(M + E_{n})V_{1}}{\alpha^{2}q}}\right)^{2}.$$
(1.27)

C'est une équation du cinquième degré en E_n qui n'est pas simple à résoudre analytiquement. De (1.23) et (1.24), on trouve les fonctions d'onde non normalisées correspondantes aux énergies E_n données par (1.24),

$$\Psi_{n}(x) = C \left(\frac{q}{e^{2\alpha x} + q}\right)^{p} \left(\frac{1}{1 + qe^{-2\alpha x}}\right)^{w} \times {}_{2}F_{1} \left(-n, n + 2p + 2w + 1, 2p + 1; \frac{q}{e^{2\alpha x} + q}\right), \quad (1.28)$$

оù

$$p = \frac{1}{2}(M_1 + M_2),$$
 $w = \frac{1}{2}(M_1 - M_2).$ (1.29)

En utilisant la relation entre les fonctions hypergéométriques et les polynômes de Jacobi (voir Gradshtein et Ryzhik [24], p.952, Eq.(8.406.1)),

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(t) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\Gamma(\alpha+1)} {}_2F_1\left(-n, n+\alpha+\beta+1, \alpha+1; \frac{1-t}{2}\right),$$
(1.30)

nous pouvons aussi exprimer (1.28) sous la forme

$$\Psi_n(x) = N_n \left(\cosh_q(\alpha x)\right)^{-(p+w)} \exp\left[\alpha(p-w)x\right] P_n^{(2w,2p)} \left(\tanh_q(\alpha x)\right),$$
(1.31)

où la constante N_n s'obtient à partir de la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(x)|^2 \, dx = 1.$$
 (1.32)

Le calcul de l'intégrale (1.32) peut être effectué en utilisant l'identité,

$$\frac{1+t}{2} + \frac{1-t}{2} = 1, (1.33)$$

la proprièté des polynômes de Jacobi (voir Gradshtein et Ryzhik [24], p.1035, Eq.(8.961.1)),

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(t) = (-1)^n P_n^{(\beta,\alpha)}(-t), \tag{1.34}$$

et en employant l'intégrale suivante (voir Gradshtein et Ryzhik [24], p.842, Eq. (7.391.5)),

$$\int_{-1}^{1} (1-t)^{\nu-1} (1+t)^{\mu} \left[P_n^{(\nu,\mu)}(t) \right]^2 dt = \frac{2^{\nu+\mu} \Gamma(n+\nu+1) \Gamma(n+\mu+1)}{n! \nu \Gamma(n+\nu+\mu+1)}, \quad (1.35)$$

où $Re(\nu) > 0$ et $Re(\mu) > -1$, on montre aisément que

$$N_n = \left[\frac{\alpha q^{2p}}{2^{2p+2w-2}} \frac{pwn!\Gamma(n+2p+2w+1)}{(p+w)\Gamma(n+2p+1)\Gamma(n+2w+1)}\right]^{\frac{1}{2}}.$$
 (1.36)

1.2.2 Deuxième cas :potentiels de Manning-Rosen déformés

Lorsque $q \leq 1$, les potentiels (1.4) présentent une forte singularité au point $x_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln(-q)$. Dans ce cas, on a deux régions distinctes : $x < x_0$ et $x > x_0$. Dans la suite, nous allons nous intéresser au problème du mouvement dans la région $x > x_0$. Dans ce cas, les potentiels (1.4) peuvent s'écrire sous la forme du potentiel de Manning-Rosen

déformé défini par

$$V_q(x) = S_q(x) = -\frac{V_1}{\sinh^2_{|q|}(\alpha x)} - V_2 \cosh_{|q|}(\alpha x).$$
(1.37)

L'intégrale de chemin associée à une particule dans ces potentiels s'écrit alors

$$K(x'', x'; \Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\tau}}} \right] \\ \times \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta x_n)^2}{2\varepsilon_{\tau}} + \varepsilon_{\tau} \left(M + E \right) \left(V_2 \cosh_{|q|}(\alpha x_n) + \frac{V_1}{\sinh_{|q|}^2(\alpha x_n)} \right) \right] \right\}.$$
(1.38)

En opérant les mêmes transformations spatio-temporelles que celles effectuées dans le cas précédent, la fonction de Green prend la forme

$$G(x'', x') = -\frac{1}{2\alpha} G_{MR}\left(y'', y'; \tilde{E}^2\right), \qquad (1.39)$$

avec

$$G_{MR}\left(y'',y';\widetilde{E}^{2}\right) = i\int_{0}^{\infty} dS \exp\left(i\widetilde{E}^{2}S\right)$$
$$\times \int Dy(s) \exp\left\{i\int_{0}^{S}\left[\frac{\dot{y}^{2}}{2} - \widetilde{V}_{2}\cosh y + \frac{\widetilde{V}_{1}}{|q|\sinh^{2}y}\right]ds\right\} (1.40)$$

où

$$\begin{cases} \widetilde{V}_{1} = -(E+M)\frac{V_{1}}{\alpha^{2}}; & \widetilde{V}_{2} = (E+M)\frac{V_{2}}{\alpha^{2}}; \\ \widetilde{E}^{2} = \frac{1}{2\alpha^{2}}(E^{2}-M^{2}); & S = \alpha^{2}\Lambda. \end{cases}$$
(1.41)

La fonction de Green $G_{MR}\left(y'', y'; \widetilde{E}^2\right)$ associée au potentiel de Manning-Rosen est connue,

nous pouvons donc écrire directement le résultat [10] :

$$G_{MR}\left(y'',y';\tilde{E}^{2}\right) = \frac{\Gamma\left(M_{1}-L_{E}\right)\Gamma\left(L_{E}+M_{1}+1\right)}{\Gamma\left(M_{1}-M_{2}+1\right)\Gamma\left(M_{1}+M_{2}+1\right)} \\ \times \left(\frac{2}{1+\cosh y''}\frac{2}{1+\cosh y'}\right)^{\frac{M_{1}+M_{2}+1}{2}} \\ \times \left(\frac{\cosh y''-1}{\cosh y''+1}\frac{\cosh y'-1}{\cosh y'+1}\right)^{\frac{M_{1}-M_{2}}{2}} \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1}-L_{E},\ L_{E}+M_{1}+1,\ M_{1}-M_{2}+1;\ \frac{\cosh y_{>}-1}{\cosh y_{>}+1}\right) \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1}-L_{E},\ L_{E}+M_{1}+1,\ M_{1}+M_{2}+1;\ \frac{2}{\cosh y_{<}+1}\right),$$

$$(1.42)$$

où

$$L_{E} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{2\left(\widetilde{V}_{2} - \widetilde{E}^{2}\right)},$$

$$M_{1,2} = \sqrt{2\frac{\widetilde{V}_{1}}{|q|} + \frac{1}{4}} \pm \frac{1}{2}\sqrt{-2\left(\widetilde{V}_{2} + \widetilde{E}^{2}\right)}.$$
(1.43)

Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Les pôles de la fonction de Green (1.42) correspondent aux valeurs permises pour les états liés du systèmes. Ce sont justement les pôles de la fonction $\Gamma(M_1 - L_E)$ qui se présentent lorsque $M_1 - L_E = -n$ pour $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ Ils sont donnés par l'équation

$$\frac{1}{2}\left(1-\sqrt{2\left(\widetilde{V}_2-\widetilde{E}^2\right)}+\sqrt{-2\left(\widetilde{V}_2+\widetilde{E}^2\right)}+2\sqrt{\frac{1}{4}+2\frac{\widetilde{V}_1}{q}}\right)=-n,\qquad(1.44)$$

d'où on trouve les niveaux d'énergie

$$M^{2} - E_{n}^{2} = \frac{(M + E_{n})^{2} V_{2}^{2}}{\alpha^{2} \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 8 \frac{(M + E_{n})V_{1}}{\alpha^{2}|q|}}\right)^{2}} + \alpha^{2} \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 8 \frac{(M + E_{n})V_{1}}{\alpha^{2}|q|}}\right)^{2}.$$
(1.45)

C'est une équation du cinquième degré en E_n . Les fonctions d'onde correspondantes s'écrivent

$$\Psi_{n}(x) = C \left(1 - |q| e^{-2\alpha x}\right)^{\delta} \left(|q| e^{-2\alpha x}\right)^{w} {}_{2}F_{1} \left(-n, n + 2w + 2\delta, 2w + 1; |q| e^{-2\alpha x}\right)$$
$$= N_{n} \left(1 - |q| e^{-2\alpha x}\right)^{\delta} \left(|q| e^{-2\alpha x}\right)^{w} P_{n}^{(2w, 2\delta - 1)} \left(1 - 2|q| e^{-2\alpha x}\right), \qquad (1.46)$$

où

$$\begin{cases} w = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E_n) (M - E_n - 2V_2)}, \\ \delta = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 8 \frac{(M + E_n)V_1}{\alpha^2 |q|}} \right). \end{cases}$$
(1.47)

Le calcul de la constante de normalisation mène à

$$N_n = \left[4\alpha \frac{w(n+w+\delta)}{n+\delta} \frac{n!\Gamma(n+2w+2\delta)}{\Gamma(n+2w+1)\Gamma(n+2\delta)}\right]^{\frac{1}{2}}.$$
(1.48)

Notons que les fonctions d'onde (1.46) satisfont les conditions aux limites

$$\lim_{x \to \frac{1}{2\alpha} \ln|q|} \Psi_n(x) = 0, \tag{1.49}$$

 et

$$\lim_{x \to \infty} \Psi_n(x) = 0. \tag{1.50}$$

Chapitre 2

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

2.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié le problème d'une particule relativiste sans spin de masse M et de charge (-e) qui se déplace dans un champ constitué d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire identiques à une dimension du type Rosen-Morse déformé. Dans ce chapitre, nous allons nous pencher sur le même problème dans un champ central de la forme

$$V_q(r) = -\frac{V_1}{\cosh_q^2(\alpha r)} - V_2 \tanh_q(\alpha r), \qquad (2.1)$$

pour analyser le comportement des solutions qui ne présentent aucune analogie avec celles du problème à une dimension. Il faut noter que ce problème a été l'objet de nombreux travaux duant ces dernières années. Mentionnons seulement celui de Jia et ses co-auteurs [12] relatif à la solution de l'équation de Klein-Gordon avec des potentiels vecteur et scalaire égaux du type Rosen-Morse déformé et celui de Olgar et ses collaborateurs [14] concernant l'application de la technique supersymétrique à l'équation de Klein-Gordon avec des potentiels vecteur et scalaire égaux du type Eckart standard. Comme les solutions présentées par ces auteurs ne sont pas satisfaisantes, le problème demande une mise au point que nous allons présenter dans le cadre de l'intégrale de chemin de Feynman. Dans le premier paragraphe, nous construisons la fonction de Green dans le cas général de deux potentiels vecteur et scalaire égaux. Dans le second et le troisième paragraphes, nous étudierons séparément le cas du potentiel de Manning-Rosen déformé et celui du potentiel de Rosen-Morse déformé. Enfin, dans un quatrième paragraphe, nous considérons le potentiel de Rosen-Morse standard et le potentiel de Eckart comme des cas particuliers.

2.2 Fonction de Green

La fonction de Green relative à une particule en mouvement dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire à symétrie sphérique peut se développer en ondes partielles sphériques

$$G\left(\vec{r'',t''},\vec{r',t'}\right) = \frac{1}{r'' r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} G_l(r'',t'',r',t') P_l(\cos\theta), \qquad (2.2)$$

où la fonction de Green radiale est donnée par

$$G_{l}(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda \ \langle r'', t'' | \exp\left[\frac{i}{2} \left[-P_{r}^{2} + (P_{0} - V_{q})^{2} - \frac{l(l+1)}{r^{2}} - (M+S_{q})^{2}\right] \Lambda\right] |r', t'\rangle, \qquad (2.3)$$

et $P_l(\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta$ avec $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta' \sin \theta' \cos(\phi'' - \phi')$.

Dans la formulation des intégrales de chemin de Feynman, il est facile d'exprimer (2.3) sous la forme d'une intégrale de chemin

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda),$$
(2.4)

où

$$P_{l}(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int dr_{n} dt_{n} \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_{r})_{n} d(P_{0})_{n}}{(2\pi)^{2}} \right] \\ \times \exp \left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_{1}^{n} \right], \qquad (2.5)$$

avec l'action élémentaire

$$A_{1}^{n} = -(P_{r})_{n}\Delta r_{n} + (P_{0})_{n}\Delta t_{n} + \frac{\varepsilon_{s}}{2} \left[-(P_{r})_{n}^{2} + (P_{0})_{n} - V_{q}(r_{n}))^{2} - \frac{l(l+1)}{r_{n}^{2}} - (M + S_{q}(r_{n}))^{2} \right], \qquad (2.6)$$

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 les intégrations sur les variables t_n dans l'expression (2.5) donnent N distributions de Dirac $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1}))$ et observons de plus que les intégrations sur les variables $(P_0)_n$ génèrent la proprièté suivante :

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots (P_0)_{N+1} = E.$$
(2.7)

Par conséquent, le propagateur (2.5) devient

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[iE(t'' - t')\right] P_l(r'', r'; \Lambda),$$
(2.8)

avec

$$P_{l}(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int dr_{n} \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{d(P_{r})_{n}}{2\pi} \right] \exp\left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_{2}^{n} \right],$$
(2.9)

où l'action élémentaire est

$$A_{2}^{n} = -(P_{r})_{n}\Delta r_{n} + \frac{\varepsilon_{\Lambda}}{2} \left[-(P_{r})_{n}^{2} + (E - V_{q}(r_{n}))^{2} - \frac{l(l+1)}{r_{n}^{2}} - (M + S_{q}(r_{n}))^{2} \right].$$
(2.10)

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

$$P_{l}(r'',r';\Lambda) = \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dr_{n}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\Lambda}}} \right] \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\Delta r_{n}^{2}}{2\varepsilon_{\Lambda}} - \frac{\varepsilon_{\Lambda}}{2} \left([M - S_{q}(r_{n})]^{2} - [E - V_{q}(r_{n})]^{2} + \frac{l(l+1)}{r_{n}^{2}} \right) \right] \right\}.$$

$$(2.11)$$

Par substitution de (2.8) dans (2.4), nous remarquons que le terme dépendant du temps t ne contient pas la variable pseudo-temporelle Λ . Donc nous pouvons réécrire la fonction de Green (2.4) sous la forme

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \exp\left[iE(t'' - t')\right] G_l(r'', r'), \qquad (2.12)$$

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', r'; \Lambda).$$
 (2.13)

En admettant que $V_q(r) = S_q(r)$, la fonction de Green radiale (2.13) se réduit à

$$G_l(r'',r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \exp\left(i\widetilde{E}^2\Lambda\right) K_l(r'',r';\Lambda),$$
(2.14)

où

$$K_{l}(r'',r';\Lambda) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\Lambda}}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dr_{n}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{\Lambda}}} \right] \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{\Delta r_{n}^{2}}{2\varepsilon_{\Lambda}} - \frac{\varepsilon_{\Lambda}}{2} \left(2 \left(E + M \right) V_{q}(r_{n}) \right) + \frac{l(l+1)}{r_{n}^{2}} \right] \right\},$$

$$(2.15)$$

 et

$$\tilde{E}^2 = \frac{E^2 - M^2}{2}.$$
(2.16)

Le propagateur radial (2.15) et la fonction de Green radiale (2.14) ne peuvent être évalués exactement à cause de la présence d'un terme centrifuge dans l'expression de l'action. Nous nous intéressons alors uniquement au problème des ondes s (l = 0). Trois cas intéressants se présentent suivant les valeurs du paramètre de déformation q.

2.3 Potentiels de Manning-Rosen sphériques déformés

2.3.1 Premier cas : $q \leq -1$.

Lorsque $q \leq -1$, le potentiel (2.1) s'écrit sous la forme

$$V_{q}(r) = -\frac{V_{1}}{\sinh^{2}_{|q|}(\alpha r)} - V_{2} \coth_{|q|}(\alpha r).$$
(2.17)

Le mouvement de la particule a lieu sur le demi-axe $r > r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln(-q)$. En changeant r en $\frac{1}{\alpha}(y + \frac{1}{2}\ln|q|)$ et ε_{Λ} en $\alpha^{-2}\varepsilon_s$, la fonction de Green (2.14), pour l = 0, s'écrit

$$G_0(r'',r') = -\frac{1}{2\alpha} G^0_{MR}\left(y'',y';\tilde{E}^2\right),$$
(2.18)

avec

$$G_{MR}\left(y'',y';\widetilde{E}^2\right) = i \int_0^\infty dS \exp\left(i\frac{\widetilde{E}^2}{\alpha^2}S\right) K_{MR}^0\left(y'',y';S\right), \qquad (2.19)$$

où

$$K_{MR}^{0}(y'',y';S) = \int Dy(s) \exp\left\{i \int_{0}^{S} \left[\frac{\dot{y}^{2}}{2} + \widetilde{V}_{2} \coth_{|q|} y - \frac{\widetilde{V}_{1}}{\sinh_{|q|}^{2} y}\right] ds\right\}$$
(2.20)

est le propagateur associé au potentiel de Manning-Rosen standard [25],

$$V_{MR}^{0}(y) = -\widetilde{V}_{2} \operatorname{coth}_{|q|} y + \frac{\widetilde{V}_{1}}{\sinh_{|q|}^{2} y}; \quad y > 0,$$
(2.21)

dans lequel nous avons posé

$$\widetilde{V}_1 = -(E+M)\frac{V_1}{\alpha^2}; \qquad \widetilde{V}_2 = (E+M)\frac{V_2}{\alpha^2}.$$
 (2.22)

D'après Grosche [10], la solution de l'équation (2.19) est

$$\begin{aligned}
G_{MR}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) &= \frac{\Gamma(M_{1} - L_{E})\Gamma(L_{E} + M_{1} + 1)}{\Gamma(M_{1} + M_{2} + 1)\Gamma(M_{1} - M_{2} + 1)} \\
&\times \left(\frac{2}{1 + \coth y'} \cdot \frac{2}{1 + \coth y''}\right)^{\frac{M_{1} + M_{2} + 1}{2}} \\
&\times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \cdot \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1}\right)^{\frac{M_{1} - M_{2}}{2}} \\
&\times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} - M_{2} + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1}\right) \\
&\times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} + M_{2} + 1; \frac{2}{\coth y_{<} + 1}\right).
\end{aligned}$$
(2.23)

Les quantités L_E , M_1 et M_2 sont données par

$$\begin{cases} L_E = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\alpha} \sqrt{(M+E)(M-E+2V_2)} - 1 \right); \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1-8(M+E)\frac{V_1}{\alpha^2 |q|}} \pm \frac{1}{\alpha} \sqrt{(M+E)(M-E-2V_2)} \right). \end{cases}$$
(2.24)

Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Le spectre de l'énergie pour les états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (2.23) ou des pôles de la fonction d'Euler $\Gamma(M_1 - L_E)$. Ces pôles sont donnés par

$$M_1 - L_E = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$
 (2.25)

En insérant les valeurs de L_E et M_1 , nous obtenons

$$M^{2} - E_{n_{r}}^{2} = \frac{(M + E_{n_{r}})^{2} V_{2}^{2}}{\alpha^{2} \left(n_{r} + \frac{1}{2} + \sqrt{1 - 8(M + E)\frac{V_{1}}{\alpha^{2}|q|}}\right)^{2}} + \alpha^{2} \left(n_{r} + \frac{1}{2} + \sqrt{1 - 8(M + E)\frac{V_{1}}{\alpha^{2}|q|}}\right)^{2}.$$
(2.26)

Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$u_{n_r}^{q \leq -1}(r) = r \Psi_{n_r}^{q \leq -1}(r) = N_{n_r} \left(1 - |q| e^{-2\alpha r} \right)^{\delta} \left(|q| e^{-2\alpha r} \right)^{w} P_{n_r}^{(2w, 2\delta - 1)} \left(1 - 2 |q| e^{-2\alpha r} \right),$$
(2.27)

où

$$\begin{cases} w = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} - 2V_2)}; \\ \delta = \frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1 - 8(M + E_{n_r})\frac{V_1}{\alpha^2|q|}}\right). \end{cases}$$
(2.28)

La constante de normalisation N_{n_r} résulte de la condition

$$\int_{\frac{1}{2\alpha}\ln|q|}^{+\infty} \left| u_{n_r}^{q \le -1}(r) \right|^2 dr = 1.$$
(2.29)

Le calcul mène à

$$N_{n_r} = \left[\frac{4\alpha w(n_r + w + \delta)}{n_r + \delta} \frac{n_r! \Gamma(n_r + 2w + 2\delta)}{\Gamma(n_r + 2w + 1)\Gamma(n_r + 2\delta)}\right]^{\frac{1}{2}}.$$
(2.30)

2.3.2 Deuxième cas : -1 < q < 0

L'analyse que nous présentée ci-dessus est toujours valable, mais dans ce cas, la transformation $r = \frac{1}{\alpha}(y + \frac{1}{2}\ln|q|)$ convertit $r \in]0, +\infty[$ en $y \in]-\frac{1}{2\alpha}\ln|q|, +\infty[$. Ceci signifie que le noyau (2.20) représente le propagateur décrivant l'évolution d'une particule placée dans un potentiel du type Manning-Rosen sur le demi-axe $y > y_0 = -\frac{1}{2\alpha}\ln|q|$. Comme une intégration directe des chemins n'est pas possible, le problème peut être résolu par un artifice qui consiste à incorporer un terme auxiliaire défini par une fonction δ de Dirac dans l'équation (2.20) pour former une barrière impénétrable [8] au point $y = y_0$. Alors, la fonction de Green (2.19) devient

$$G_{MR}^{\delta}\left(y'',y';\widetilde{E}^{2}\right) = i \int_{0}^{\infty} dS \exp\left(i\frac{\widetilde{E}^{2}}{\alpha^{2}}S\right) K_{MR}^{\delta}\left(y'',y';S\right), \qquad (2.31)$$

où

$$K_{MR}^{\delta}(y'',y';S) = \int Dy(s) \exp\left\{i \int_{0}^{S} \left[\frac{\dot{y}^{2}}{2} - V_{MR}^{\delta}(y)\right] ds\right\}.$$
 (2.32)

Cette intégrale de chemin (2.32) peut être interprétée comme étant le propagateur d'une particule qui se déplace dans un potentiel de la forme :

$$V_{MR}^{\delta}(y) = V_{MR}^{0}(y) - \eta \delta(y - y_0), \qquad (2.33)$$

où $V_{MR}^0(y)$ est l'expression du potentiel (2.21). Comme il est tout à fait clair, vu la forme compliquée du potentiel (2.33), que le calcul par l'intégrale de chemin de l'équation (2.31) ne peut pas effectuée directement. Nous nous proposons d'appliquer l'approche des perturbations qui consiste à exprimer exp $\left(i\eta \int_{s'}^{s''} \delta(y-y_0)ds\right)$ en série de puissances. Alors, le propagateur (2.32) peut s'écrire de cette façon :

$$\begin{aligned} K^{\delta}(y'', y'; S) &= K^{0}_{MR}(y'', y'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\eta)^{n}}{n!} \prod_{j=1}^{n} \left[\int_{s_{i}}^{s_{j+1}} ds_{j} \int_{-\infty}^{\infty} dy_{j} \right] \\ &\times K^{0}_{MR}(y_{1}, y'; s_{1} - s_{i}) \,\delta\left(y_{1} - y_{0}\right) \,K^{0}_{MR}\left(y_{2}, y_{1}; s_{2} - s_{1}\right) \\ &\times \dots \times \delta\left(y_{n-1} - y_{0}\right) \,K^{0}_{MR}\left(y_{n}, y_{n-1}; s_{2} - s_{1}\right) \\ &\times \delta\left(s_{n} - s_{0}\right) \,K^{0}_{MR}\left(y'', y_{n}; S - s_{n}\right) \\ &= K^{0}_{MR}(y'', y'; S) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\eta)^{n} \int_{s_{i}}^{s_{f}} ds_{n} \int_{s_{i}}^{s_{n}} ds_{n-1} \dots \int_{s_{i}}^{s_{2}} ds_{1} \\ &\times K^{0}_{MR}\left(y_{0}, y'; s_{1} - s_{i}\right) K^{0}_{MR}\left(y_{0}, y_{0}; s_{2} - s_{1}\right) \\ &\times K^{0}_{MR}\left(y_{0}, y_{0}; s_{n} - s_{n-1}\right) K^{0}_{MR}\left(y'', y_{0}; S - s_{n}\right), \end{aligned}$$

$$(2.34)$$

où nous avons ordonné le temps de la manière suivante : $s' = s_0 < s_1 < s_2 < ... < s_n < s_{n+1} = s''$. Pour effectuer les intégrations successives sur les variables s_j dans l'équation (2.34), nous insérons (2.34) dans (2.31), et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de Fourier, nous obtenons

$$G_{MR}^{\delta}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) = G_{MR}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) - \frac{G_{MR}\left(y'', y_{0}; \tilde{E}^{2}\right)G_{MR}\left(y_{0}, y'; \tilde{E}^{2}\right)}{G_{MR}\left(y_{0}, y_{0}; \tilde{E}^{2}\right) - \frac{1}{\eta}},$$
(2.35)

où $G_{MR}\left(y'', y'; \tilde{E}^2\right)$ est la fonction de Green (2.23) associée au potentiel de Manning-Rosen standard (2.21).

Si maintenant on fait tendre $\eta \to -\infty$, le système physique sera forcé de se mouvoir dans le potentiel $V_{MR}^0(y)$ borné par une barrière infiniment répulsive [8, 10] localisée au point $y = y_0$. Dans ce cas, la fonction de Green est alors donnée par :

$$\tilde{G}_{MR}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) = \lim_{\eta \to -\infty} G_{MR}^{\delta}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) \\
= G_{MR}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) - \frac{G_{MR}^{0}\left(y'', y_{0}; \tilde{E}^{2}\right)G_{MR}^{0}\left(y_{0}, y'; \tilde{E}^{2}\right)}{G_{MR}^{0}\left(y_{0}, y_{0}; \tilde{E}^{2}\right)} .$$
(2.36)

Finalement, lorsque -1 < q < 0, la fonction de Green radiale de notre problème a pour expression :

$$G_0(r'',r') = -\frac{1}{2\alpha} \tilde{G}^0_{MR} \left(y'', y'; \tilde{E}^2 \right).$$
(2.37)

Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (2.36), c'est à dire, par l'équation $G_{MR}^0\left(y_0, y_0; \tilde{E}^2\right) = 0$, ou encore par l'équation transcendante

$${}_{2}F_{1}(\delta + w - p, \delta + p + w, 2w + 1; |q|) = 0,$$
(2.38)

où les quantités δ , p et w ont les valeurs

$$\begin{cases} \delta = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{8(E_{n_r} + M)V_1}{\alpha^2 |q|}} \right); \\ p = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} + 2V_2)}; \\ w = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} - 2V_2)}. \end{cases}$$
(2.39)

L'équation (2.38) peut être résolue numériquement pour connaître les niveaux d'énergie discrets de la particule. Les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme :

$$u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) = r \Psi_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) = C \left(1 - |q| e^{-2\alpha r}\right)^{\delta} \left(|q| e^{-2\alpha r}\right)^{w} \\ \times {}_2F_1(\delta + w - p, \delta + p + w, 2w + 1; |q| e^{-2\alpha r}),$$
(2.40)

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

$$u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) \to 0, \quad \text{quand } r \to 0,$$
 (2.41)

 et

$$u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) \to 0$$
, quand $r \to \infty$. (2.42)

2.4 Potentiels de Rosen-Morse sphériques déformés

Pour q > 0, le potentiel (2.1) est du type Rosen-Morse déformé qui est défini dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . Afin de ramener l'intégrale (2.14), pour l = 0, à une forme résoluble, nous procédons comme dans le cas précédent. Nous opérons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in \mathbb{R}^+ \to y \in \left] -\frac{1}{2} \ln q, +\infty \right[$$
 (2.43)

définie par

$$r = \frac{1}{\alpha} \left(y + \frac{1}{2} \ln q \right). \tag{2.44}$$

En posant $\varepsilon_{\Lambda} = \alpha^{-2} \varepsilon_s$ ou $\Lambda = \alpha^{-2} S$, nous pouvons écrire (2.14), pour les états s, sous la forme suivante :

$$G_0(r'',r') = -\frac{1}{2\alpha} \tilde{G}^0_{RM} \left(y'', y'; \tilde{E}^2 \right), \qquad (2.45)$$

où

$$\tilde{G}_{RM}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) = i \int_{0}^{\infty} dS \exp\left(i\frac{\tilde{E}^{2}}{\alpha^{2}}S\right) K_{RM}^{0}\left(y'', y'; S\right), \qquad (2.46)$$

 et

$$K_{RM}^{0}(y'',y';S) = \int Dy(s) \exp\left\{i\int_{0}^{S} \left[\frac{\dot{y}^{2}}{2} + \tilde{V}_{2} \tanh y - \frac{\tilde{V}_{1}}{q\cosh^{2} y}\right]ds\right\}.$$
 (2.47)

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

$$\widetilde{V}_1 = (E+M)\frac{V_1}{\alpha^2}; \qquad \widetilde{V}_2 = -(E+M)\frac{V_2}{\alpha^2}.$$
 (2.48)

Le propagateur (2.47) a la même forme que l'intégrale de chemin relative au potentiel introduit à l'origine par Rosen et Morse pour discuter les états de vibration des molécules polyatomiques [16]. Le potentiel de Rosen et Morse est défini pour $y \in \mathbb{R}$, mais, dans le cas présent, nous avons transformé l'intégrale de chemin pour le potentiel (2.1) en une intégrale de chemin pour un potentiel du type Rosen-Morse standard via la transformation $r \to r(y)$ qui convertit $r \in \mathbb{R}^+ \to y \in \left] -\frac{1}{2} \ln q, +\infty\right[$. Ceci signifie que le mouvement de la particule prend place sur le demi-axe $y > y_0 = -\frac{1}{2} \ln q$. Pour calculer alors la fonction de Green relative aux ondes s, nous procédons comme dans le cas précédent et nous obtenons

$$\tilde{G}_{RM}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) = G_{RM}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) - \frac{G_{RM}^{0}\left(y'', y_{0}; \tilde{E}^{2}\right)G_{RM}^{0}\left(y_{0}, y'; \tilde{E}^{2}\right)}{G_{RM}^{0}\left(y_{0}, y_{0}; \tilde{E}^{2}\right)},$$
(2.49)

où $G_{RM}^0\left(y'', y'; \tilde{E}^2\right)$ est la fonction de Green associée au potentiel standard de Rosen et Morse [16]

$$V_{RM}(y) = \widetilde{V}_2 \tanh y - \frac{V_1}{q \cosh^2 y}; \qquad y \in \mathbb{R}.$$
(2.50)

Il est connu que la solution par l'intégrale de chemin pour ce potentiel conduit à l'expression suivante de la fonction de Green [10, 26, 27]

$$G_{RM}^{0}\left(y'', y'; \tilde{E}^{2}\right) = \frac{\Gamma(M_{1} - L_{E})\Gamma(L_{E} + M_{1} + 1)}{\Gamma(M_{1} + M_{2} + 1)\Gamma(M_{1} - M_{2} + 1)} \\
\times \left(\frac{1 - \tanh y'}{2} \frac{1 - \tanh y''}{2}\right)^{(M_{1} + M_{2})/2} \\
\times \left(\frac{1 + \tanh y}{2} \frac{1 + \tanh y''}{2}\right)^{(M_{1} - M_{2})/2} \\
\times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} - M_{2} + 1; \frac{1 + \tanh y_{>}}{2}\right) \\
\times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} + M_{2} + 1; \frac{1 - \tanh y_{<}}{2}\right), \quad (2.51)$$

avec la notation

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 8\frac{(E+M)V_1}{\alpha^2 q}};\\ M_{1,2} = \left(\sqrt{(M+E)(M-E-2V_2)} \pm \sqrt{(M+E)(M-E+2V_2)}\right). \end{cases}$$
(2.52)

Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Les niveaux d'énergie des états liés sont déterminés par les pôles de la fonction de Green (2.49), c'est à dire, par l'équation $G^0_{RM}\left(y_0, y_0; \tilde{E}^2\right) = 0$, ou encore par la condition de quantification suivante qui est une équation transcendante comprenant la fonction hypergéométrique

$${}_{2}F_{1}\left(p+w-\delta+1, p+w+\delta, 2p+1; \frac{1}{1+q}\right) = 0, \qquad (2.53)$$

où les paramètres δ , p et w sont définis par

$$\begin{cases} \delta = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 8\frac{(E_{n_r} + M)V_1}{\alpha^2 q}};\\ p = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} + 2V_2)};\\ w = \frac{1}{2\alpha}\sqrt{(M + E_{n_r})(M - E_{n_r} - 2V_2)}. \end{cases}$$
(2.54)

En utilisant la fonction de Green (2.51) relative au potentiel de Rosen-Morse et le lien entre (2.45) et (2.51), nous trouvons que les fonctions d'onde correspondantes aux états liés sont de la forme :

$$u_{n_r}^{q>0}(r) = r\Psi_{n_r}^{q>0}(r) = C\left(\frac{1}{1+qe^{-2\alpha r}}\right)^p \left(\frac{q}{q+e^{2\alpha r}}\right)^w \times {}_2F_1(p+w-\delta+1,p+w+\delta,2p+1;\frac{1}{1+qe^{-2\alpha r}}),$$
(2.55)

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

$$u_{n_r}^{q>0}(r) \to 0, \quad \text{quand } r \to 0,$$

$$(2.56)$$

 et

$$u_{n_r}^{q>0}(r) \to 0, \quad \text{quand } r \to \infty.$$
 (2.57)

2.5 Cas particuliers

2.5.1 Premier cas : potentiels de Rosen-Morse standard

En posant q = 1, et en changeant V_2 en $(-V_2)$, l'expression (2.1) devient ce que l'on appelle le potentiel de Rosen-morse standard

$$V(r) = -\frac{V_1}{\cosh^2(\alpha r)} + V_2 \tanh(\alpha r).$$
(2.58)

Les niveaux d'énergie E_{n_r} sont déterminés à partir de (2.53) par l'équation transcendante

$${}_{2}F_{1}\left(p+w-\delta+1, p+w+\delta, 2p+1; \frac{1}{2}\right) = 0, \qquad (2.59)$$

et les fonctions d'onde non normalisées (2.55) deviennent dans ce cas :

$$u_{n_r}^{q=1}(r) = r\Psi_{n_r}^{q=1}(r) = C\left(\frac{1}{1-e^{-2\alpha r}}\right)^p \left(\frac{1}{1-e^{2\alpha r}}\right)^w \times {}_2F_1\left(p+w-\delta+1, p+w+\delta, 2p+1; \frac{1}{1+e^{-2\alpha r}}\right).$$
(2.60)

2.5.2 Deuxième cas : potentiels de Eckart

en prenant q = 1, et en changeant V_1 en $(-V_1)$, le potentiel (2.1) se réduit au potentiel d'Eckart :

$$V(r) = \frac{V_1}{\cosh^2(\alpha r)} - V_2 \tanh(\alpha r).$$
(2.61)

La condition de quantification des niveaux d'énergie et les fonctions d'onde non normalisées peuvent être tirées à partir des équations (2.53) et (2.55). Elles s'écrivent respectivement :

$${}_{2}F_{1}\left(p+w-\delta+1, p+w+\delta, 2w+1; \frac{1}{2}\right) = 0, \qquad (2.62)$$

 et

$$u_{n_r}^{q=1}(r) = r\Psi_{n_r}^{q=1}(r) = C\left(\frac{1}{1+e^{-2\alpha r}}\right)^p \left(\frac{1}{1+e^{2\alpha r}}\right)^w \times {}_2F_1\left(p+w-\delta+1, p+w+\delta, 2w+1; \frac{1}{1+e^{-2\alpha r}}\right).$$
(2.63)

Chapitre 3

Particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur et un potentiel scalaire du type exponentiel à cinq paramètres

3.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de traiter rigoureusement, dans le cadre des intégrales de chemin de Feynman, le problème de mécanique quantique concernant une particule relativiste sans spin soumise à l'action combinée d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire composés de plusieurs fonctions exponentielles de la coordonnée radiale. Ces potentiels ont été l'objet d'un intérêt considérable ces dernières années à cause de leurs applications dans plusieurs branches de la physique et de la chimie telles que la physique nucléaire [28], la physique atomique [29], la physique de l'état solide [30] et la chimie quantique [31]. Ce modèle de potentiels vecteur et scalaire égaux, du type exponentiel et dépendant l'un et l'autre de cinq paramètres a la forme suivante :

$$V_q(r) = S_q(r) = \frac{A}{e^{2\alpha r} + q} + \frac{B}{(e^{2\alpha r} + q)^2} + \frac{Ce^{\alpha r}}{e^{2\alpha r} + q} + \frac{De^{\alpha r}}{(e^{2\alpha r} + q)^2},$$
(3.1)

оù

$$\begin{cases}
A = Q_3^2 + g - \frac{Q_2^2}{q} + 2\alpha Q_2; & B = Q_2^2 - qQ_3^2 - 2\alpha qQ_2; \\
C = g\frac{Q_3}{Q_2} - \frac{Q_2Q_3}{q} + \alpha Q_3; & D = 2Q_2Q_3 - 2\alpha qQ_3,
\end{cases}$$
(3.2)

avec $g = 2Q_1Q_2 + \frac{Q_2^2}{q}$. Les coefficients Q_1 , Q_2 , Q_3 , q et α sont des paramètres réels pouvant être choisis de façon à donner à l'expression (3.1) la forme de plusieurs potentiels spécifiques tels que les potentiels dits de Hulthén, Pöschl-Teller, Rosen-Morse, Eckart et Morse.

Un traitement des potentiels (3.1) avec $-1 \le q < 0$ et q > 0 a été présenté récemment dans le cadre de l'approche supersymétrique en mécanique quantique [12], mais il apparaît que les solutions obtenues pour le problème des états s ne sont pas satisfaisantes lorsque -1 < q < 0 ou q > 0 pour deux raisons. D'une part, l'équation non linéaire de Riccati établie par les auteurs de cette étude avec le super potentiel

$$W(r) = \frac{g}{2Q_2} - \frac{Q_2}{2q} + \frac{Q_2}{e^{2\alpha r} + q} + \frac{Q_3}{e^{2\alpha r} + q}e^{\alpha r},$$
(3.3)

n'est pas vérifiée et d'autre part, lorsque $r \to 0$, la condition à la limite $u_0(0) = 0$, équivalente à la condition d'hermiticité de l'opérateur \hat{P}_r associé à la composante de la quantité de mouvement sur le rayon vecteur \vec{r} , n'est pas remplie par l'expression de la fonction d'onde de l'état fondamental $u_0(r)$. Ces deux arguments sont suffisants pour réexaminer minutieusement ce problème.

Dans le second paragraphe, nous construisons la fonction de Green radiale associée à un potentiel vecteur $V_q(r)$ et un potentiel scalaire $S_q(r)$ égaux. Dans le troisième pa-

ragraphe, nous évaluons l'intégrale de chemin pour les potentiels de Hulthén généralisés (q < 0) en distinguant deux cas : $q \le -1$ et -1 < q < 0. Lorsque $q \le -1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln |q| < r < \infty$, nous montrons que la fonction de Green radiale relative aux potentiels en que stion pour un état de moment cinétique orbital l se ramène à la fonction de Green pour le potentiel de Rosen-Morse q-déformé en utilisant $\frac{1}{r^2} \approx \frac{4|q|\alpha^2 e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r}+q)^2}$ comme approximation du terme centrifuge et en appliquant la technique de transformation spatio-temporelle. Nous en déduisons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde convenablement normalisées. Pour -1 < q < 0, la fonction de Green radiale avec l = 0 relative aux potentiels (3.1) dans l'intervalle \mathbb{R}^+ est convertie en celle du potentiel $V_{RM}^{0,q}(u)$ de Rosen-Morse q-déformé qui est défini sur la demi-droite] $\frac{1}{2} \ln (1 - |q|), +\infty [$. Dans ce cas, nous calculons la fonction de Green en mettant les conditions aux limites de Dirichlet au point $u = \frac{1}{2} \ln (1 - |q|)$. Dans le quatrième paragraphe, nous discutons les potentiels de Woods-Saxon généralisés (q > 0). Nous montrons que l'intégrale de chemin se ramène à celle du potentiel de Manning-Rosen $V_{MR}(y)$ défini sur la demidroite $\left|\frac{1}{2}\ln\left(1+\frac{1}{q}\right),+\infty\right|$. Nous évaluons la fonction de Green en suivant la méthode utilisée dans le cas précédent. Dans ces deux derniers cas, les pôles des fonctions de Green donnent des expressions implicites, c'est à dire des équations transcendantes pour le spectre d'énergie. Les potentiels standard de Hulthén, Pöschl-Teller, Rosen-Morse, Eckart et Morse sont étudiés comme des cas particuliers dans le cinquième paragraphe.

3.2 Fonction de Green

Pour étudier les états stationnaires d'une particuel sans spin, de Masse M et de charge (-e) en présence d'un potentiel vecteur $V_q(r)$ et d'un potentiel scalaire $S_q(r)$, nous nous intéressons au calcul de la fonction de Green qui obéit à l'équation de Klein-Gordon

$$\left[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2 \right] G(x'', x') = \delta^4(x'' - x'), \tag{3.4}$$

où $eA = \begin{pmatrix} V_q(r) \\ \vec{0} \end{pmatrix}$. L'espace-temps plat de Minkowski est muni de la métrique pseudoeuclidienne $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. En utilisant la rprésentation intégrale de Schwinger, il est possible d'écrire la fonction de Green solution de l'équation (3.1) sous la forme :

$$G(x'',x') = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda \left\langle x'' \left| \exp\left[\frac{i}{2} \left[(P - eA)^2 - (M + S_q)^2 \right] \Lambda \right] \right| x' \right\rangle.$$
(3.5)

où Λ joue le rôle de nouveau paramètre pseudo-temporel. Comme $V_q(r)$ et $S_q(r)$ sont des potentiels centraux, nous avons un système à symétrie sphérique qui peut être décrit convenablement en coordonnées polaires et la fonction de Green peut se développer en ondes partielles :

$$G(\vec{r}'', t'', \vec{r}', t') = \frac{1}{r''r'} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} G_l(r'', t'', r', t') P_l(\cos\Theta),$$
(3.6)

où $P_l(\cos \Theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \Theta$ avec $\cos \Theta = \cos \theta'' \cos \theta' + \sin \theta' \sin \theta' \cos(\phi'' - \phi')$. La fonction de Green radiale est donnée par

$$G_{l}(r'',t'',r',t') = \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} d\Lambda \ \langle r'',t''| \exp\left[\frac{i}{2} \left[(-P_{r}^{2} + (P_{0} - V_{q})^{2} - \frac{l(l+1)}{r^{2}} - (M+S_{q})^{2}\right]\Lambda\right] |r',t'\rangle, \qquad (3.7)$$

Suivant Kleinert [23], nous pouvons écrire cette expression comme une intégrale de chemin sous forme discrète par rapport au pseudo-temps S',

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'', t'', r', t'; S'), \qquad (3.8)$$

où le noyau transformé $P_l(r'', t'', r', t'; S')$ est donné sous forme canonique compacte par

$$P_{l}(r'', t'', r', t'; S') = f_{R}(r'')f_{L}(r') \langle r'', t''| \exp\left[\frac{i}{2}S'f_{L}(r)\left[(-P_{r}^{2} + (P_{0} - V_{q})^{2} - \frac{l(l+1)}{r^{2}} - (M+S_{q})^{2}\right]f_{R}(r)\right] |r', t'\rangle$$

$$= f_{R}(r'')f_{L}(r') \int Dr(s')Dt(s') \int \frac{DP_{r}(s')DP_{0}(s')}{(2\pi)^{2}}$$

$$\times \exp\left\{i\int_{0}^{S'} -P_{r}\dot{r} + P_{0}\dot{t} + \frac{1}{2}f_{L}(r)\left[-P_{r}^{2} + (P_{0} - V)^{2} - \frac{l(l+1)}{r^{2}} - (S+M)^{2}\right]f_{R}(r)ds'\right\}.$$
(3.9)

Sous forme discrète, il s'écrit explicement

$$P_{l}(r'', t'', r', t'; S') = f_{R}(r'') f_{L}(r') \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \int [dr_{n} dt_{n}] \prod_{n=1}^{N+1} \int \left[\frac{d(P_{r})_{n} d(P_{0})_{n}}{(2\pi)^{2}} \right] \\ \times \exp\left[i \sum_{n=1}^{N+1} A_{1}^{N} \right], \qquad (3.10)$$

dans lequel on a introduit les fonctions régulatrices $f_L(r)$ et $f_R(r)$ définies par Kleinert de la façon suivante :

$$f(r) = f_L(r)f_R(r) = f^{1-\lambda}(r)f^{\lambda}(r),$$
 (3.11)

où λ est le paramètre de dédoublement et A_1^n est l'action élémentaire donnée par l'équation

$$A_{1}^{n} = -(P_{r})_{n}\Delta r_{n} + (P_{0})_{n}\Delta t_{n} + \frac{\varepsilon_{s'}}{2}f_{L}(r_{n}) \left[-(P_{r})_{n}^{2} + (P_{0})_{n} - V_{q}(r_{n})\right]^{2} - \frac{l(l+1)}{r_{n}^{2}} - (M + S_{q}(r_{n}))^{2} f_{R}(r_{n-1}), \qquad (3.12)$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_{s'} = \frac{S'}{N+1} = ds' = \frac{ds}{f_L(r_n)f_R(r_{n-1})} \quad , \quad ds = \varepsilon_s = \frac{\Lambda}{N+1}. \tag{3.13}$$

En opérant successivement les intégrations sur les variables t_n , $(P_0)_n$ et $(P_r)_n$ dans l'expression (3.10), nous pouvons réécrire la fonction de Green partielle (3.8) sous la forme :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[iE(t'' - t')\right] G_l(r'', r'), \qquad (3.14)$$

où

$$G_l(r'',r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty dS' P_l(r'',r';S').$$
(3.15)

Afin de simplifier le calcul du noyau $P_l(r'', r'; S')$, donnons au paramètre de dédoublement la valeur $\lambda = \frac{1}{2}$, c'est à dire, nous choisissons un développement de l'action et de la mesure autour du point moyen puisque le résultat final ne dépend d'aucun point [23]. On a alors

$$P_{l}(r'',r';S') = \frac{[f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int \frac{dr_{n}}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}f(r_{n})}} \right] \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} A_{2}^{n} \right\}, \quad (3.16)$$

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

$$A_{2}^{n} = \frac{\Delta r_{n}^{2}}{2\varepsilon_{s'}\sqrt{f(r_{n})f(r_{n-1})}} - \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \left(M^{2} - E^{2} + 2\left(E + M\right)V_{q}(r_{n}) + \frac{l(l+1)}{r_{n}^{2}}\right)\sqrt{f(r_{n})f(r_{n-1})}$$
(3.17)

Indépendamment de la méthode de résolution adoptée pour ce problème, on se heurte à des difficultés, d'une part à cause de la forme générale du potentiel $V_q(r)$ et d'autre part, en raison de la présence du terme centrifuge $\frac{l(l+1)}{r^2}$. Nous contournons ces difficultés en éliminant le paramètre Q_3 ($Q_3 = 0$) et en employant l'expression $\frac{4|q|\alpha^2 e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r} - |q|)^2}$ comme une approximation du terme centrifuge en $\frac{1}{r^2}$ lorsque le paramètre $q \leq -1$ et $\alpha r \ll 1$. Nous nous proposons dans ce qui suit de construire la fonction de Green (3.15) et de déterminer le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde en distinguant trois cas.

3.3 Potentiels de Hulthén généralisés

Lorsque le paramètre de déformation q est négatif, les potentiels (3.1) décrivent une forme générale du potentiel de Hulthén [32]. Si -1 < q < 0, Les potentiels (3.1) sont continus sur tout l'intervalle \mathbb{R}^+ , mais, si $q \leq -1$, ils ont une forte singularité localisée au point $r = r_0 = \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$, crééant une barrière infranchissable, et dans ce cas, nous avons deux régions distinctes, l'une est caractérisée par l'intervalle $]0, r_0[$ et l'autre par l'intervalle $]r_0, \infty[$. Ceci nous amène à envisager de construire la fonction de Green radiale (3.15) par l'intégrale des chemins dans chaque cas.

3.3.1 Premier cas : $q \leq -1$

Dans ce cas, nous allons discuter l'intégrale de chemin relative aux potentiels (3.1) seulement dans l'intervalle $]r_0, \infty[$ puisque, dans l'autre intervalle, la solution ne peut pas être obtenue analytiquement. De plus, elle est sans intérêt physique. Afin de construire l'intégrale de chemin pour un état de moment cinétique orbital l, nous remplaçons d'abord $\frac{1}{r^2}$ approximativement par $\frac{4|q|\alpha^2 e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r}-|q|)^2}$ et nous opérons ensuite la transformation spatiale

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

définie par

$$r = \frac{1}{2\alpha} \ln\left[\exp(2\alpha\xi) + |q|\right], \qquad (3.18)$$

accompagnée de la fonction régulatrice appropriée

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{4\cosh^2_{|q|}(\alpha\xi)} = g^{\prime 2}(\xi).$$
(3.19)

Sous ces transformations, le noyau (3.16) devient

$$P_{l}(r'',r';S') = [f(r'')f(r')]^{\frac{1}{4}} \lim_{N \to \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_{s'}}} \prod_{n=1}^{N} \left[\int d\xi_{n} \right] \\ \times \exp\left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{(\Delta\xi_{n})^{2}}{2\varepsilon_{s'}} + \frac{1}{8\varepsilon_{s'}} \left(\frac{g''^{2}}{g'^{2}} - \frac{2}{3} \frac{g'''}{g'} \right) (\Delta\xi_{n})^{4} \right. \\ \left. -\varepsilon_{s'} \alpha^{2} \left(\frac{M^{2} - E^{2}}{4\alpha^{2}} + \frac{(E + M)a}{2\alpha^{2}q^{2}} + l(l+1) \right) \right. \\ \left. + \frac{\varepsilon_{s'}}{2} \alpha^{2} \left(\frac{|q| (M^{2} - E^{2})}{4\alpha^{2}} + \frac{E + M}{2\alpha^{2}} \left(b + \frac{a}{|q|} \right) \right) \frac{1}{\cosh^{2}_{|q|} (\alpha\xi_{n})} \right. \\ \left. -\varepsilon_{s'} \alpha^{2} \left(\frac{M^{2} - E^{2}}{4\alpha^{2}} - \frac{(E + M)a}{2\alpha^{2}q^{2}} - l(l+1) \right) \tanh_{|q|} (\alpha\xi_{n}) \right] \right\}.$$

$$(3.20)$$

Notons que le terme en $(\Delta \xi_n)^4$ apparaissant dans l'expression de l'action contenue dans le noyau (3.20) contribue de façon significative à l'intégrale de chemin. Il peut être évalué au moyen de la théorie des perturbations et remplacé par :

$$\left\langle (\Delta\xi_n)^4 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta\xi_n) (\Delta\xi_n)^4 \left(\frac{1}{2i\pi\varepsilon_{s'}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{i}{2\varepsilon_{s'}} (\Delta\xi_n)^2\right] = -3\varepsilon_{s'}^2. \tag{3.21}$$

Le changement de variables $u_n = \alpha \xi_n$ et $\varepsilon_{\sigma} = \alpha^2 \varepsilon_{s'}$ nous permet de mettre la fonction de Green (3.15), pour les états l, sous la forme :

$$G_{l}(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} \left[f(r'') f(r') \right]^{\frac{1}{4}} G_{RM}^{l} \left(u'', u'; \tilde{E}_{l} \right), \qquad (3.22)$$

où

$$G_{RM}^{l}\left(u'', u'; \tilde{E}_{l}\right) = i \int_{0}^{\infty} d\sigma \, \exp\left(i\tilde{E}_{l}\sigma\right) P_{RM}^{l}\left(u'', u'; \sigma\right), \qquad (3.23)$$

 avec

$$\tilde{E}_l = -\left(\frac{M^2 - E^2}{4\alpha^2} + \frac{(E+M)a}{2\alpha^2 q^2} + l(l+1) + \frac{1}{4}\right),\tag{3.24}$$

 et

$$P_{RM}^{l}\left(u'', u'; \sigma\right) = \int Du\left(\tau\right) \exp\left\{i \int_{0}^{\sigma} \left[\frac{\dot{u}^{2}}{2} - V_{RM}^{l,q}\left(u\right)\right] d\tau\right\}$$
(3.25)

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

$$V_{RM}^{l,q}\left(u\right) = A_l \tanh_{|q|}\left(u\right) - \frac{B}{\cosh_{|q|}^2\left(u\right)}; \quad u \in \mathbb{R}.$$
(3.26)

Ici, nous avons posé

$$\begin{cases}
A_{l} = \frac{M^{2} - E^{2}}{4\alpha^{2}} - \frac{(E+M)a}{2\alpha^{2}q^{2}} - l(l+1) - \frac{1}{4}; \\
B = \frac{1}{2} \left(\frac{|q|(M^{2} - E^{2})}{4\alpha^{2}} + \frac{E+M}{2\alpha^{2}} \left(b + \frac{a}{|q|} \right) - \frac{|q|}{4} \right).
\end{cases}$$
(3.27)

Comme la solution exacte (3.23) est bien connue, nous pouvons donc écrire directement le résultat [10, 26, 27]

$$\begin{aligned}
G_{RM}^{l}\left(u'', u'; \widetilde{E}_{l}\right) &= \frac{\Gamma(M_{1} - L_{E})\Gamma(L_{E} + M_{1} + 1)}{\Gamma(M_{1} + M_{2} + 1)\Gamma(M_{1} - M_{2} + 1)} \\
&\times \left(\frac{1 - \tanh_{|q|}u'}{2} \cdot \frac{1 - \tanh_{|q|}u''}{2}\right)^{\frac{M_{1} - M_{2}}{2}} \\
&\times \left(\frac{1 + \tanh_{|q|}u'}{2} \cdot \frac{1 + \tanh_{|q|}u''}{2}\right)^{\frac{M_{1} - M_{2}}{2}} \\
&\times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} - M_{2} + 1; \frac{1}{2}(1 + \tanh_{|q|}u_{>})\right) \\
&\times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} + M_{2} + 1; \frac{1}{2}(1 - \tanh_{|q|}u_{<})\right), \end{aligned}$$
(3.28)

où nous avons utilisé les abréviations suivantes :

$$\begin{pmatrix}
L_E = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{16} + 2E_{PT'} \right)^{\frac{1}{2}}; \\
E_{PT'} = \frac{B}{|q|} + \frac{3}{32}; \\
M_{1,2} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{2 \left(A_l - \widetilde{E}_l \right) \pm \sqrt{-2 \left(A_l + \widetilde{E}_l \right)} \right)}.
\end{cases}$$
(3.29)

Compte tenu des relations entre les variables r, ξ et u, la fonction de Green radiale $G_l(r'', r')$ relative au potentiels (3.1), pour $q \leq -1$ et dans l'intervalle $]r_0, \infty[$ est alors donnée par

$$G_{l}(r'', r') = -\frac{1}{2\alpha} \frac{\Gamma(M_{1} - L_{E})\Gamma(L_{E} + M_{1} + 1)}{\Gamma(M_{1} + M_{2} + 1)\Gamma(M_{1} - M_{2} + 1)} \left(q^{2}e^{-2\alpha(r'' + r')}\right)^{\frac{M_{1} + M_{2}}{2}} \\ \times \left[\left(1 - |q|e^{-2\alpha r''}\right)\left(1 - |q|e^{-2\alpha r'}\right)\right]^{\frac{M_{1} - M_{2} + 1}{2}} \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} - M_{2} + 1; 1 - |q|e^{-2\alpha r'}\right) \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} + M_{2} + 1; |q|e^{-2\alpha r''}\right). \quad (3.30)$$

Spectre d'énergie et fonctions d'onde

Le spectre d'énergie pour les états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (3.30) qui sont ceux de la fonction d'Euler $\Gamma(M_1 - L_E)$. Ils se présentent lorsque $M_1 - L_E = -n_r$; $n_r = 0, 1, 2, ...$ En tenant compte de (3.24), (3.27) et (3.29), on montre que le spectre d'énergie est donné par l'équation

$$M^{2} - E_{n_{r},l}^{2} = \alpha^{2} \left[\frac{(n_{r} + \frac{1}{2})^{2} + (l + \frac{1}{2})^{2} + (2n_{r} + 1)\sqrt{\frac{(M + E_{n_{r},l})a}{2\alpha^{2}|q|^{2}} + (l + \frac{1}{2})^{2}} - \frac{(M + E_{n_{r},l})b}{2\alpha^{2}|q|}}{2\alpha^{2}|q|} \right]^{2} \cdot \frac{n_{r} + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{(M + E_{n_{r},l})a}{2\alpha^{2}|q|^{2}} + (l + \frac{1}{2})^{2}}}{(3.31)}$$

Ainsi, cette équation qui définit implicitement les niveaux d'énergie $E_{n_r,l}$, est une équation transcendante plutôt compliquée. Elle possède plusieurs solutions pour une valeur

donnée de n_r . Pour extraire les fonctions d'onde de l'expression de la fonction de Green (3.30), nous utilisons la formule de transformation de Gauss (voir Gradshtein et Ryzhik [24], p. 1043, Eq. (9.131.2))

$${}_{2}F_{1}(\alpha,\beta,\gamma,z) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} {}_{2}F_{1}(\alpha,\beta,\alpha+\beta-\gamma+1,1-z) + (1-z)^{\gamma-\alpha-\beta} \\ \times \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} {}_{2}F_{1}(\gamma-\alpha,\gamma-\beta,\gamma-\alpha-\beta+1,1-z), (3.32)$$

dans laquelle le second terme devient nul du fait que la fonction d'Euler $\Gamma(\alpha)$ est infinie lorsque nous prenons $\alpha = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$. D'où le résultat :

$$u_{n_{r},l}^{q\leq-1}(r) = r\Psi_{n_{r},l}^{q\leq-1}(r) = N_{n_{r},l} \left(1 - |q| e^{-2\alpha r}\right)^{\delta_{l}+1} \left(|q| e^{-2\alpha r}\right)^{\varepsilon_{n_{r},l}} \\ \times {}_{2}F_{1}(-n_{r}, n_{r} + 2\varepsilon_{n_{r},l} + 2\delta_{l} + 2, 2\varepsilon_{n_{r},l} + 1; |q| e^{-2\alpha r}), \quad (3.33)$$

 avec

$$\begin{cases} \varepsilon_{n_r,l} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r,l}^2}; & Q_{n_r,l} = \sqrt{\varepsilon_{n_r,l}^2 + \frac{\left(M + E_{n_r,l}\right)}{2\alpha^2} \left(\frac{b}{|q|} + \frac{a}{q^2}\right)}; \\ \delta_l = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{\left(M + E_{n_r,l}\right)a}{2\alpha^2q^2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}. \end{cases}$$
(3.34)

Le calcul du coefficient de normalisation donne

$$N_{n_r,l} = \left[\frac{2\alpha\varepsilon_{n_r,l}(n_r + \varepsilon_{n_r,l} + \delta_l + 1)}{n_r + \delta_l + 1} \frac{\Gamma(n_r + 2\varepsilon_{n_r,l} + 1)\Gamma(n_r + 2\varepsilon_{n_r,l} + 2\delta_l + 2)}{n_r!\Gamma(n_r + 2\delta_l + 2)}\right]^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{\Gamma(2\varepsilon_{n_r,l} + 1)}.$$
(3.35)

Notons que les fonctions d'onde (3.33) vérifient les conditions aux limites

$$u_{n_{r,l}}^{q<-1}(r) \to 0$$
, quand $r \to \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$, (3.36)

$$u_{nr,l}^{q<-1}(r) \to 0, \quad \text{quand } r \to \infty.$$
 (3.37)

3.3.2 Deuxième cas : -1 < q < 0

Lorsque 0 < q < 1, les potentiels (3.1) sont définis sur l'intervalle \mathbb{R}^+ . Dans ce cas, le changement de variable (3.18) convertit $r \in \mathbb{R}^+$ en $u = \alpha \xi \in \left] \frac{1}{2\alpha} \ln \left[1 - |q|\right], \infty \right[$. Comme l'approximation du terme centrifuge utilisée dans le cas précédent n'est pas valable lorsque q > -1, nous nous limitons à l'étude du problème des ondes s. On se reportera à la thèse de Zouache [33] pour trouver une discussion détaillée sur les conditions de validité de cette approximation. Par conséquent, le noyau (3.25), pour les états s, est le propagateur décrivant le mouvement d'une particule en présence d'un potentiel du type Rosen-Morse q-déformé défini sur la demi-droite $u > u_0 = \frac{1}{2} \ln (1 - |q|)$. En procédant comme dans le chapitre précédent, la fonction de Green relative aux ondes s (l = 0) a pour expression :

$$G_0(r'',r') = -\frac{1}{2\alpha} \left[f(r'')f(r') \right]^{\frac{1}{4}} \widetilde{G}^0_{RM}(u'',u';\widetilde{E}_0), \qquad (3.38)$$

avec

$$\widetilde{G}_{RM}^{0}(u'', u'; \widetilde{E}_{0}) = G_{RM}^{0}(u'', u'; \widetilde{E}_{0}) - \frac{G_{RM}^{0}(u'', u_{0}; \widetilde{E}_{0})G_{RM}^{0}(u_{0}, u'; \widetilde{E}_{0})}{G_{RM}^{0}(u_{0}, u_{0}; \widetilde{E}_{0})},$$
(3.39)

où $G^0_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0)$ est la fonction de Green (3.28) associée au potentiel de Rosen-Morse pour les ondes s (l = 0).

Le spectre d'énergie est déterminé par les pôles de l'expression (3.39), c'est à dire, par l'équation $G^0_{RM}(u_0, u_0; \tilde{E}_0) = 0$, ou encore par l'équation transcendente

$${}_{2}F_{1}(\varepsilon_{n_{r}} - Q_{n_{r}} + \delta + 1, \varepsilon_{n_{r}} + Q_{n_{r}} + \delta + 1, 2\delta + 2; 1 - |q|) = 0,$$
(3.40)

 et

où les quantités ε_{n_r} , Q_{n_r} et δ sont déduites des équations (3.34). Cette équation transcendante peut être résolue numériquement pour obtenir les niveaux d'énergie du spectre discret.

En utilisant les relations entre (3.38) et (3.28) pour l = 0, la formule de transformation de Gauss (3.32) et en revenant à la variable radiale à l'aide de transformation inverse de (3.18), nous obtenons, pour les fonctions d'onde des états stationnaires correspondants, l'expression suivante :

$$u_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) = r \Psi_{n_r}^{-1 < q < 0}(r) = N \left(1 - |q| e^{-2\alpha r} \right)^{\delta_0 + 1} \left(|q| e^{-2\alpha r} \right)^{\varepsilon_{n_r}} \\ \times {}_2 F_1(\varepsilon_{n_r} - Q_{n_r} + \delta + 1, \varepsilon_{n_r} + Q_{n_r} + \delta + 1, 2\delta + 2; 1 - |q| e^{-2\alpha r}),$$
(3.41)

où N est un facteur constant.

3.4 Potentiels de Woods-Saxon généralisés

Considérons le cas où le paramètre de déformation q est positif. Les potentiels (3.1) représentent une généralisation du potentiel de Woods-Saxon [34] définie dans l'intervalle \mathbb{R}^+ . Pour réduire l'intégrale de chemin (3.15), pour l = 0, à une forme résoluble, nous procédons comme dans le paragraphe précédent. Nous appliquons la transformation de coordonnée suivante :

$$r \in \mathbb{R}^+ \to \xi \in \left] \frac{1}{2\alpha} \ln(1+q), +\infty \right[$$
 (3.42)

définie par

$$r = \frac{1}{\alpha} \ln \left[\exp(2\alpha\xi) - q \right], \qquad (3.43)$$

et nous introduisons la fonction régulatrice

$$f(r(\xi)) = \frac{\exp(2\alpha\xi)}{4\sinh_q^2(\alpha\xi)} = g'^2(\xi).$$
 (3.44)

Après quelques calculs simples et semblables à ceux effectués dans le paragraphe cidessus, nous pouvons exprimer la fonction de Green radiale (3.15) en termes de la nouvelle variable ξ et du nouveau temps S'. Ensuite, en effectuant les changements $y = \alpha \xi - \ln \sqrt{q}$ et $\varepsilon_{s'} = \alpha^{-2} \varepsilon_{\sigma}$, nous pouvons écrire (3.15), pour les états s, sous la forme suivante :

$$G_0(r'',r') = -\frac{1}{2\alpha} \left[f(r'')f(r') \right]^{\frac{1}{4}} \widetilde{G}^0_{MR}(y'',y';\widetilde{E}_0), \qquad (3.45)$$

où

$$\widetilde{G}_{MR}^{0}(y'',y';\widetilde{E}_{0}) = i \int_{0}^{\infty} d\sigma \exp\left(i\widetilde{E}_{0}\sigma\right) P_{0}\left(y'',y';\sigma\right), \qquad (3.46)$$

avec

$$\widetilde{E}_0 = -\left(\frac{M^2 - E^2}{4\alpha^2} + \frac{(M+E)a}{2q^2\alpha^2} + \frac{1}{4}\right),\tag{3.47}$$

 et

$$P_0(y'',y';\sigma) = \int \mathcal{D}y(\tau) \exp\left\{i\int_0^\sigma \left[\frac{\dot{y}^2}{2} + A\coth y - \frac{B}{q\sinh^2 y}\right]d\tau\right\},\tag{3.48}$$

dans lequel nous avons introduit, par raison de simplicité, les notations suivantes :

$$\begin{cases} A = -\left(\frac{M^2 - E^2}{4\alpha^2} - \frac{(M + E)a}{2q^2\alpha^2} - \frac{1}{4}\right);\\ B = \frac{q}{2}\left[\frac{M^2 - E^2}{4\alpha^2} + \frac{(M + E)}{2\alpha^2}\left(\frac{a}{q^2} - \frac{b}{q}\right) - \frac{1}{4}\right]. \end{cases}$$
(3.49)

Le propagateur (3.48) a la même forme que l'intégrale de chemin associée au potentiel $V_{MR}(y)$ proposé par Manning et Rosen [25] pour analyser les états de vibration des molécules diatomiques. Il faut signaler que le potentiel de Manning-Rosen est défini pour

 $y \in \mathbb{R}^+$, mais, dans le cas présent, nous avons converti l'intégrale de chemin pour les potentiels (3.1) en une intégrale de chemin pour un potentiel du type Manning et Rosen au moyen de la transformation $r \to r(y)$ qui reduit $\mathbb{R}^+ \to \left]\frac{1}{2}\ln\left(1+\frac{1}{q}\right), +\infty\right[$. Ceci signifie que le mouvement de la particule a lieu sur la demi-droite $y > y_0 = \frac{1}{2}\ln\left(1+\frac{1}{q}\right)$. Pour calculer la fonction de Green (3.46), nous appliquons une démarche semblable à celle employée dans le cas précédent et nous obtenons

$$\widetilde{G}_{MR}^{0}(y'',y';\widetilde{E}_{0}) = G_{MR}(y'',y';\widetilde{E}_{0}) - \frac{G_{MR}(y'',y_{0};\widetilde{E}_{0})G_{MR}(y_{0},y';\widetilde{E}_{0})}{G_{MR}(y_{0},y_{0};\widetilde{E}_{0})},$$
(3.50)

expression dans laquelle $G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_0)$ représente la fonction deGreen associée au potentiel de Manning et Rosen standard dont la solution exacte bien connue a la forme :

$$G_{MR}(y'', y'; \tilde{E}_{0}) = \frac{\Gamma(M_{1} - L_{E})\Gamma(L_{E} + M_{1} + 1)}{\Gamma(M_{1} - M_{2} + 1)\Gamma(M_{1} + M_{2} + 1)} \\ \times \left(\frac{2}{1 + \coth y''} \frac{2}{1 + \coth y'}\right)^{\frac{M_{1} + M_{2} + 1}{2}} \\ \times \left(\frac{\coth y' - 1}{\coth y' + 1} \frac{\coth y'' - 1}{\coth y'' + 1}\right)^{\frac{M_{1} - M_{2}}{2}} \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} - M_{2} + 1; \frac{\coth y_{>} - 1}{\coth y_{>} + 1}\right) \\ \times {}_{2}F_{1}\left(M_{1} - L_{E}, L_{E} + M_{1} + 1, M_{1} + M_{2} + 1; \frac{2}{1 + \coth y_{<}}\right),$$
(3.51)

avec

$$\begin{cases} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{2(A - \widetilde{E}_0)};\\ M_{1,2} = \sqrt{\frac{2B}{q} + \frac{1}{4}} \pm \frac{1}{2}\sqrt{-2(A + \widetilde{E}_0)}. \end{cases}$$
(3.52)

Le spectre d'énergie pour les états liés est déterminé à partir des pôles de la fonction de Green (3.50), c'est à dire, par l'équation $G_{MR}(y_0, y_0; \widetilde{E}_0) = 0$,ou encore par la condition de quantification

$${}_{2}F_{1}(\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}-\delta_{0},\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}+\delta_{0}+1,2\epsilon_{n_{r}}+1;\frac{q}{q+1})=0.$$
(3.53)

C'est une équation transcendante impliquant la fonction hypergéométrique où les quantités $\epsilon,\,Q$ et δ sont données par

$$\begin{cases} \epsilon_{n_r} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r}^2}; \\ Q_{n_r} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r}^2 + \frac{2(M + E_{n_r})}{q} \left(\frac{a}{q} - b\right)}; \\ \delta_0 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2(M + E_{n_r})a}{q^2 \alpha^2} + 1}. \end{cases}$$
(3.54)

Par conséquent, pour connaître les niveaux d'énergie discrets, on doit résoudre numériquement l'équation transcendante (3.53). Les fonctions d'onde des états liés correspondantes au spectre d'énergie donné par l'équation (3.53) s'écrivent :

$$u_{n_{r}}^{q>0}(r) = r\Psi_{n_{r}}^{q>0}(r)$$

$$= N\left(\frac{1}{1+qe^{-\alpha r}}\right)^{Q_{n_{r}}} \left(\frac{q}{e^{2\alpha r}+q}\right)^{\epsilon_{n_{r}}}$$

$$\times_{2}F_{1}\left(\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}-\delta_{0},\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}+\delta_{0}+1,2\epsilon_{n_{r}}+1;\frac{q}{e^{2\alpha r}+q}\right). (3.55)$$

où N est un facteur constant. Il faut souligner que les fonctions d'onde (3.55) satisfont aux conditions aux limites

$$\lim_{r \to 0} u_{n_r,l}^{q>0}(r) = 0, \tag{3.56}$$

 et

$$\lim_{r \to \infty} u_{n_r,l}^{q>0}(r) = 0.$$
(3.57)

3.5 Cas particuliers

3.5.1 Premier cas : potentiels de Hulthén

En posant $Q_2^2 + \frac{Q_2}{a} = 0$, $g = -V_0$, q = -1 et en remplaçant α par $\frac{1}{2a}$, les potentiels (3.1) se réduisent à la forme du potentiel de Hulthén standard [32]

$$V(r) = -\frac{V_0}{e^{\frac{r}{a}} - 1}.$$
(3.58)

Les quantités (3.34) peuvent s'écrire donc

$$\left\{\varepsilon_{n_{r,l}} = a\sqrt{M^2 - E_{n_{r,l}}^2}; \qquad Q_{n_{r,l}} = \sqrt{\varepsilon_{n_{r,l}}^2 - 2a^2 \frac{(M + E_{n_{r,l}})}{q^2}}; \qquad \delta_l = l.. \quad (3.59)$$

Le spectre d'énergie discret et les fonctions d'onde normalisées peuvent être déduits à partir des équations (3.31) et (3.33). Ils valent

$$E_{n_r,l}^{q=1} = \frac{V_0}{2} \frac{(n_r + l + 1)^2 - 8MV_0 a^2}{(n_r + l + 1)^2 + 4MV_0 a^2} \pm \frac{1}{4a} \frac{(n_r + l + 1)^2 \sqrt{16a^2 M(M + V_0) - (n_r + l + 1)^2}}{(n_r + l + 1)^2 + 4MV_0 a^2}$$
(3.60)

 et

$$u_{n_{r},l}^{q\leq-1}(r) = r\Psi_{n_{r},l}^{q\leq-1}(r)$$

$$= \left[\frac{1}{a}\frac{\varepsilon_{n_{r},l}(n_{r}+\varepsilon_{n_{r},l}+l+1)}{n_{r}+l+1}\frac{\Gamma(n_{r}+2\varepsilon_{n_{r},l}+1)\Gamma(n_{r}+2\varepsilon_{n_{r},l}+2l+2)}{n_{r}!\Gamma(n_{r}+2l+2)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \frac{1}{\Gamma(2\varepsilon_{n_{r},l}+1)}\left(1-e^{-\frac{r}{a}}\right)^{l+1}\left(e^{-\frac{r}{a}}\right)^{\varepsilon_{n_{r},l}}$$

$$\times {}_{2}F_{1}(-n_{r},n_{r}+2\varepsilon_{n_{r},l}+2l+2,2\varepsilon_{n_{r},l}+1;e^{-\frac{r}{a}}). \quad (3.61)$$

Ces résultats coincident avec ceux obtenus également par l'approche des intégrales de chemin dans la Ref .[35] en prenant $V_0 = S_0$.

3.5.2 Deuxième cas : Potentiels de Pöschl-Teller radiaux

En prenant q = 1, $\alpha = \frac{1}{d}$, g = 0 et en posant $Q_2^2 - 2\frac{Q_2}{d} = 4V_0$, les potentiels (3.1) deviennent des potentiels de Pöschl-Teller radiaux [36] avec un décalage constant

$$V(r) = V_0 \tanh^2\left(\frac{r}{d}\right) - V_0. \tag{3.62}$$

Les paramètres ε_{n_r} , Q_{n_r} , et δ_0 définis par les expressions (3.54) peuvent s'écrire

$$\begin{cases} \epsilon_{n_r} = \frac{d}{2}\sqrt{M^2 - E_{n_r}^2}; \\ Q_{n_r} = \frac{d}{2}\sqrt{M^2 - E_{n_r}^2 - 16V_0(M + E_{n_r})}; \\ \delta_0 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{4} - 2V_0(M + E_{n_r})d^2}. \end{cases}$$
(3.63)

La condition de quantification pour les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde des états liés peuvent être déduites à partir des équations (3.53) et (3.55) :

$${}_{2}F_{1}(\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}-\delta_{0},\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}+\delta_{0}+1,2\epsilon_{n_{r}}+1;\frac{1}{2})=0,$$
(3.64)

$$u_{n_r}^{q=1}(r) = r\Psi_{n_r}^{q=1}(r)$$

$$= N\left(\frac{1}{1+e^{-2\frac{r}{d}}}\right)^{Q_{n_r}} \left(\frac{1}{e^{2\frac{r}{d}}+1}\right)^{\epsilon_{n_r}}$$

$$\times_2 F_1\left(\epsilon_{n_r}+Q_{n_r}-\delta_0, \epsilon_{n_r}+Q_{n_r}+\delta_0+1, 2\epsilon_{n_r}+1; \frac{1}{e^{2\frac{r}{d}}+1}\right). \quad (3.65)$$

Ces résultats sont différents de ceux donnés dans les Refs. [12, 36].

3.5.3 Troisième cas : puits de potentiels de Rosen-Morse radiaux

En prenant $q = 1, Q_3 = 0$ et en posant

$$\begin{cases} g - Q_2^2 + 2\alpha Q_2 = -2A - 4B; \\ Q_2^2 - 2\alpha Q_2 = 4B, \end{cases}$$
(3.66)

les potentiels (3.1) se réduisent au puits de potentiel de Rosen-Morse radial avec un décalage constant [16] :

$$V(r) = A \tanh\left(\alpha r\right) - \frac{B}{\cosh^2(\alpha r)} - A.$$
(3.67)

Dans ce cas, les quantités ε_{n_r} , Q_{n_r} , et δ_0 sont

$$\begin{cases} \epsilon_{n_r} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r}^2}; \\ Q_{n_r} = \sqrt{\frac{M^2 - E_{n_r}^2}{4\alpha^2} - \frac{(M + E_{n_r})}{\alpha^2}}A; \\ \delta_0 = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{(M + E_{n_r})}{\alpha^2}}B. \end{cases}$$
(3.68)

La condition de quantification de l'énergie et les fonctions d'onde pour les états s sont tirées respectivement de (3.53) et (3.55) :

$${}_{2}F_{1}(\epsilon_{n_{r}} + Q_{n_{r}} - \delta_{0}, \epsilon_{n_{r}} + Q_{n_{r}} + \delta_{0} + 1, 2\epsilon_{n_{r}} + 1; \frac{1}{2}) = 0, \qquad (3.69)$$

$$u_{n_{r}}^{q=1}(r) = r\Psi_{n_{r}}^{q=1}(r)$$

$$= N\left(\frac{1}{1+e^{-2\alpha r}}\right)^{Q_{n_{r}}} \left(\frac{1}{e^{2\alpha r}+1}\right)^{\epsilon_{n_{r}}}$$

$$\times_{2}F_{1}\left(\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}-\delta_{0},\epsilon_{n_{r}}+Q_{n_{r}}+\delta_{0}+1,2\epsilon_{n_{r}}+1;\frac{1}{e^{2\frac{r}{d}}+1}\right). \quad (3.70)$$

3.5.4 Quatrième cas : potentiels de Eckart radiaux

En choisissant q = -1 et en posant

$$\begin{cases} g + Q_2 (Q_2 + 2\alpha) = 4A - 2B; \\ Q_2 (Q_2 + 2\alpha) = 4B, \end{cases}$$
(3.71)

les potentiels (3.1) deviennent des potentiels de Eckart radiaux avec un décalage constant [17] :

$$V(r) = \frac{A}{\sinh^2(\alpha r)} - B\cosh(\alpha r) + B, \qquad (3.72)$$

,

et on déduit de (3.31) et (3.33) le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états l:

$$M^{2} - E_{n_{r},l}^{2} = \alpha^{2} \left[\frac{\left(n_{r} + \frac{1}{2}\right)^{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)^{2} + (2n_{r} + 1)\sqrt{\frac{\left(M + E_{n_{r},l}\right)}{2\alpha^{2}}\left(2A - B\right) + \left(l + \frac{1}{2}\right)^{2}} - \frac{2\left(M + E_{n_{r},l}\right)A}{\alpha^{2}}}{n_{r} + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{\left(M + E_{n_{r},l}\right)}{2\alpha^{2}}\left(2A - B\right) + \left(l + \frac{1}{2}\right)^{2}}} \right]^{2}$$
(3.73)

$$u_{n_{r,l}}^{q\leq-1}(r) = r\Psi_{n_{r,l}}^{q\leq-1}(r) = \left[\frac{2\alpha\varepsilon_{n_{r,l}}(n_{r}+\varepsilon_{n_{r,l}}+\delta_{l}+1)}{n_{r}+\delta_{l}+1}\frac{\Gamma(n_{r}+2\varepsilon_{n_{r,l}}+1)\Gamma(n_{r}+2\varepsilon_{n_{r,l}}+2\delta_{l}+2)}{n_{r}!\Gamma(n_{r}+2\delta_{l}+2)}\right]^{\frac{1}{2}} \times \frac{1}{\Gamma(2\varepsilon_{n_{r,l}}+1)}\left(1-e^{-2\alpha r}\right)^{\delta_{l}+1}\left(e^{-2\alpha r}\right)^{\varepsilon_{n_{r,l}}}}{\times {}_{2}F_{1}(-n_{r},n_{r}+2\varepsilon_{n_{r,l}}+2\delta_{l}+2,2\varepsilon_{n_{r,l}}+1;e^{-2\alpha r}), \qquad (3.74)$$

avec

$$\begin{cases} \varepsilon_{n_r,l} = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{M^2 - E_{n_r,l}^2}; \\ \delta_l = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{(M + E_{n_r,l})}{2\alpha^2}} (2A - B) + (l + \frac{1}{2})^2. \end{cases}$$
(3.75)

3.5.5 Cinquième cas : potentiels de Morse radiaux

En posant q = 0 dans les expressions (3.1), nous obtenons des potentiels de Morse radiaux,

$$V_M(r) = ae^{-2\eta r} - be^{-\eta r}, (3.76)$$

avec les paramètres a, b et η définis par $a = Q_2^2$, $b = -2(Q_1 + \alpha)Q_2$, $Q_2 = -D_e e^{\eta r_e}$ et $\eta = 2\alpha$. 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 aisément à partir des équations (3.53) que :

$$\begin{cases}
Q_{n_r} \approx_{q \to 0} -\frac{1}{2} \left(\frac{Q_1}{\alpha} + \frac{Q_2}{\alpha q} \right) \sqrt{2(M + E_{n_r})}; \\
\delta_0 \approx_{q \to 0} -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{Q_2}{\alpha q} \right) \sqrt{2(M + E_{n_r})}; \\
\epsilon_{n_r} + Q_{n_r} - \delta_0 \approx_{q \to 0} \frac{1}{2} - \frac{1}{2\alpha} (Q_1 + \alpha) \sqrt{2(M + E_{n_r})} + \epsilon_{n_r}; \\
\epsilon_{n_r} + Q_{n_r} + \delta_0 + 1 \approx_{q \to 0} - \frac{Q_2}{\alpha q} \sqrt{2(M + E_{n_r})} \to +\infty,
\end{cases}$$
(3.77)

et en se servant de la formule [37]

$$\lim_{\beta \to \infty} {}_{2} F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) = {}_{1} F_1\left(\alpha, \gamma; z\right), \qquad (3.78)$$

il est facile de montrer que, dans le cas limite $q \longrightarrow 0,$ les fonctions d'onde (3.55) deviennent

$$u_{n_{r}}^{q=0}(r) = r\Psi_{n_{r}}^{q=0}(r)$$

$$= N \exp\left(-\sqrt{M^{2} - E_{n_{r}}^{2}}r\right) \exp\left(\frac{Q_{2}}{2\alpha}\sqrt{2(M + E_{n_{r}})}e^{-2\alpha r}\right)$$

$$\times_{2}F_{1}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\alpha}(Q_{1} + \alpha)\sqrt{2(M + E_{n_{r}})} + \epsilon_{n_{r}}, 2\epsilon_{n_{r}} + 1; -\frac{Q_{2}}{\alpha}\sqrt{2(M + E_{n_{r}})}e^{-2\alpha r}\right),$$
(3.79)

et la condition de quantification transcendente de l'énergie des états liés (3.52) prend la

forme :

$${}_{2}F_{1}\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2\alpha}(Q_{1}+\alpha)\sqrt{2(M+E_{n_{r}})}+\epsilon_{n_{r}}, 2\epsilon_{n_{r}}+1; -\frac{Q_{2}}{\alpha}\sqrt{2(M+E_{n_{r}})}\right)=0.$$
(3.80)

En tenant compte du fait que $\eta r_e \gg 1$, c'est à dire $|Q_2| \to \infty$, et en utilisant le comportement asymptotique de la fonction hypergéométrique confluente [34], nous pouvons voir que la condition de quantification de l'énergie (3.80) est définie par :

$$\frac{1}{2} - \frac{1}{2\alpha}(Q_1 + \alpha)\sqrt{2(M + E_{n_r})} + \epsilon_{n_r} = -n_r; \ n_r = 0, 1, 2, \dots$$
(3.81)

De cette condition, nous obtenons l'équation d'énergie

$$M^{2} - E_{n_{r}}^{2} = 4\alpha^{2} \left[\left(n_{r} + \frac{1}{2} \right)^{2} + \left(n_{r} + \frac{1}{2} \right) \left(\frac{Q_{1}}{\alpha} + 1 \right) \sqrt{2(M + E_{n_{r}})} + \frac{1}{2\alpha^{2}} \left(Q_{1} + \alpha \right)^{2} \left(M + E_{n_{r}} \right) \right].$$
(3.82)

Notons que les fonctions d'onde (3.79) et l'équation (3.82) définissant le spectre de l'énergie peuvent également être obtenues d'une autre façon. En partant des fonctions d'onde (3.41) et en passant à la limite $q \to 0$, on voyons facilement que

$$\begin{cases} Q_{n_r} \simeq_{q \to 0} \frac{1}{2} \left(\frac{Q_1}{\alpha} + \frac{Q_2}{\alpha q} \right) \sqrt{2(M + E_{n_r})}; \\ \delta_0 \simeq_{q \to 0} -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{Q_2}{\alpha q} \right) \sqrt{2(M + E_{n_r})}; \\ \epsilon_{n_r} - Q_{n_r} + \delta_0 + 1 \simeq_{q \to 0} \frac{1}{2} - \frac{1}{2\alpha} (Q_1 + \alpha) \sqrt{2(M + E_{n_r})} + \epsilon_{n_r}; \\ \epsilon_{n_r} + Q_{n_r} + \delta_0 + 1 \simeq_{q \to 0} \frac{Q_2}{\alpha q} \sqrt{2(M + E_{n_r})} \to +\infty, \end{cases}$$
(3.83)

et en utilisant ensuite la formule (3.78), nous retrouvons les fonctions d'onde (3.79) et donc l'équation (3.82) caractérisant le spectre d'énergie. Ce qui signifie que l'énergie est une fonction continue par rapport au paramètre q en passant par la valeur q = 0.

Conclusion

Dans ce travail, nous avons présenté une analyse complète, par l'approche des intégrales de chemin de Feynman, d'un ensemble de systèmes quantiques relativistes gouvernés par des formes de potentiels largement utilisés dans plusieurs branches de la physique et en chimie quantique.

Nous avons étudié un premier système constitué d'un particule relativiste, chargée et sans spin, soumise à un potentiel vecteur et à un autre scalaire à une dimension. Ces deux potentiels sont égaux et du type Rosen Morse dépendant d'un paramètre réel de déformation q qui sert comme paramètre supplémentaire dans la description des interactions inter atomiques. Nous avons distingué deux cas : -1 < q < 0 ou q > 0 et $q \leq -1$. Le calcul de la fonction de Green, sous forme compacte dans chaque cas, nous permet de déterminer le spectre d'énergie et d'extraire les fonctions d'onde des états liés qui sont ensuite correctement normalisées.

Nous avons ensuite abordé un second système consistant en une particule placée dans le champ d'un potentiel vecteur et d'un autre scalaire à symétrie sphérique, égaux et aussi du type Rosen-Morse déformé (q > 0) ou du genre Manning-Rosen modifié (q < 0). Le paramètre réel q est absolument différent de zéro comme dans le cas du système précédent. Pour $q \leq -1$, l'évaluation de la fonction de Green est directe. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés sont obtenus. Dans ce problème de potentiels à symértie sphérique , lorsque -1 < q < 0, le mouvement quantique est forcé de se produire sur le demi-axe $y > y_0$ et non sur le demi-axe y > 0. Dans ce cas, la construction de la fonction de Green est plus difficile puisque nous avons été amené à introduire un mur

impénétrable localisé au point $y = y_0$. Pour tenir compte de cette condition à la limite dans le cadre des intégrales de chemin, nous avons introduit un potentiel d'interaction δ -fonction de Dirac dans l'expression de l'action et calculé la fonction de Green par la méthode des perturbations. En supposant ensuite la force de la pertubation représentée par la fonction δ de Dirac infiniment répulsive, nous avons la fonction de Green de notre problème sous la forme d'une somme de deux termes compacts. Cette démarche de calcul de la fonction de Green est également appliquée dans le cas des potentiels de Rosen-Morse $\left(q>0\right.\right)$ et au problème des potentiels vecteur et scalaire du type exponentiel dépendant de cinq paramètres dans les cas où le paramètre de déformation est $-1\,<\,q\,<\,0$ ou q > 0. Dans ces quatre cas, les conditions de quantification pour les niveaux d'énergie des états liés sont des équations transcendantes comportant la fonction hypergéométrique. Dans ce dernier problème, lorsque le paramètre de déformation est $q \leq -1$ et dans la région $r > \frac{1}{2\alpha} \ln |q|$, nous avons construit la fonction de Green radiale associée à l'onde partielle d'ordre l en adoptant une approximation particulière du potentiel centrifuge et en appliquant une transformation spatio-temporelle appropriée. Le spectre analytique de l'énergie et les fonctions d'onde normalisées sont déduits.

Bibliographie

- [1] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [2] P. M. A. Dirac, The principles of quantum mechanics (Oxford Clarindon press, London, 1958).
- [3] W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys., **33** (1925) 879; M. Born et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys., **34** (1925) 858; M. Born , W. Heisenberg et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys., **35** (1926) 557; P. M. A. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A 109** (1925) 642.
- [4] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [5] I. H. Duru et H. Kleinert, Phys. Lett. B 84 (1979) 185; Fortschr. Phys. 30 (1982) 401.
- [6] C. Grosche et F. Steiner, A table of Feynman path integrals, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1998).
- [7] A. O. Barut et I. H. Duru, Phys. Rev. A 38 (1988) 5906.
- [8] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, Phys.Rev. **D** 22 (1980) 3012.
- [9] M. carreau, J. Math. Phys. 33 (1992) 4139; M. Carreau, E. Farhi et S. Gutmann, Phys. Rev. D 42 (1990) 1194.
- [10] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1.
- [11] W. C. Qiang, Chin. Phys. **13** (2004) 571.
- [12] Y. F. Diao, L. Z. Yi et C. S. Jia, Phys. Lett. A 332 (2004) 157.
- [13] X. Q. Zhao, C. S. Jia et Q. B. Yang, Phys. Lett. A 337 (2005) 189.

- [14] E. Ölgar, R. Koç et H. Tütüncüler, Phys. Scr. 78 (2008) 015011.
- [15] M. R. Setare et O. Hatami, Int. J. Theor. Phys. 48 (2009) 2977.
- [16] N. Rosen et P. M. Morse, Phys. Rev. 42 (1932) 210.
- [17] C. Eckart, Phys. Rev. **35** (1930) 1303.
- [18] N. N. Nieto, Phys. Rev. A **17** (1978) 1273.
- [19] R. Jaquet et W. H. Miller, J. Phys. Chem. 89 (1985) 2139.
- [20] G. Junker et A. Inomata, Path Integrals from mev to MeV, Bielefeld Encounters in Physics and Mathematics VII, 1985, p. 315, eds. M. C. Gutzwiller, A. Inomata, J. R. Klauder et L. Steit (World Scientific, Singapore, 1986).
- [21] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. 158 (1991) 63; J. Phys. A : Math. Gen. 34 (2001)
 4281.
- [22] J. Schwinger, Phys. Rev. 82 (1951) 664.
- [23] H. Kleinert, Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics and financial markets (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).
- [24] I. S. Gradshtein et I. M. Ryzhik, Tables of Integrals, Series and Products (Academic Press, New York, 1965).
- [25] M. F. Manning et N. Rosen, Phys. Rev. 44 (1933) 953.
- [26] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, J. Math. Phys. To appear.
- [27] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, J. Math. Phys. 48 (2007) 032102.
- [28] O. P. Bahethi et M. G. Fuda, J. Math. Phys. 12 (1971) 2076; C. S. Lam, Y. P. Varshni, Phys. Rev. A 4 (1971) 1874; H. Haeringen, Phys. Rev. A 18 (1978) 56;
 B. Durand et L. Durand, Phys. Rev. D 23 (1981) 1092; R. Dutt et P. Varshni, J. Math. Phys. 24 (1983) 2770; L. Hall, Phys. Rev. A 32 (1983) 263.
- [29] J. Lindhard et A. Winther, Nucl. Phys. A 166 (1971) 413; U. Myhrman, J. Math.
 Phys. 21 (1980) 1732; J. Phys. A : Math. Gen. 166 (2001) 4281.

- [30] A.A. Berezin, Phys. Stat. Sol. (B) 50 (1972) 71; J. Phys. C : Solid State Phys. 12 (1979) L363; Phys. Rev. B 33 (1986) 2122.
- [31] J. Grunniger, J. Chem. Phys. 55 (1971) 3561; K. Szalcwicz et H.J. Mokhorst, J.
 Chem. Phys. 75 (1981) 5785; G. Malli, Chem. Phys. Lett. 26 (1981) 578.
- [32] L. Hulthén, Ark. Mat. Astron. Fys. **28A** (1942) 5.
- [33] A. Zouache, Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009, Université Mentouri de Constantine.
- [34] S. Flügge, *Practical quantum mechanics* (Springer Verlag, Berlin, 1974).
- [35] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, Ann. Phys. (NY) 332 (2007) 2179.
- [36] W. C. Qiang, R. S. Zhou et Y. Gao, Phys. Lett. A 371 (2007) 201.
- [37] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).

Résumé

Dans le cadre de la mécanique quantique relativiste, nous avons traité, par l'intermédiaire des intégrales de chemin, un ensemble de trois systèmes quantiques intéressant plusieurs branches de la physique théorique (moléculaire, atomique ou nucléaire) et la chimie quantique. Ces systèmes sont gouvernés à la fois par un potentiel vecteur et un potentiel scalaire, identiques et dépendant en particulier d'un paramètre réel de déformation noté q. Le premier système est placé dans des potentiels à une dimension et les deux autres sont commandés par des potentiels à symétrie sphérique. Différents cas sont distingués selon les valeurs réelles du paramètre q. Dans le cas de ces derniers types de potentiels, le mouvement quantique est forcé de se produire sur une demi-droite lorsque -1 < q < 0 ou q > 0. Le problème de l'intégrale de chemin avec la condition à la limite de Dirichlet est résolu par la technique de développement en série de perturbations. Après avoir calculé la fonction de Green sous forme compacte dans chaque cas, nous avons déterminé les équations donnant le spectre d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes.

Mots clés:

Intégrales de chemin, propagateur, fonction de Green, potentiel de Rosen-Morse, potentiel de Manning-Rosen, potentiel de Hulthén, potentiel de Pöschl-Teller, potentiel de Eckart, potentiel de Morse, états liés.

Abstract

In the framework of relativistic quantum mechanics, we have treated, via the path integral approach, a set of three quantum systems of interest in many branches of theoretical physics (molecular, atomic or nuclear) and in quantum chemistry. These systems are governed in the same time by a vector potential and a scalar potential, identical and which depend, in particular, on a real deformation parameter noted q. The first system is placed in one-dimensional potential and the other two are ruled by spherically symmetric potentials. Different cases are distinguished according to the real values of the parameter q. In the case of the latter types of potentials, the quantum motion is forced to take place on a half-line when -1 < q < 0 or q > 0. The path integral problem with the boundary condition of Dirichlet is solved by the perturbation expansion technique. Having calculated the Green function in closed form in each case, we have determined the equations giving the energy spectrum and corresponding corresponding wave functions.

Keywords:

Path integral, propagator, Green function, Rosen-Morse potential, Manning-Rosen potential, Hulthén potential, Pöschl-Teller potential, Eckart potential, Morse potential, bound states.