

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE CONSTANTINE 1  
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

Application de l'intégrale de chemin à certains systèmes  
quantiques déformés

Par

Zohra KHIAT

Soutenu le     /     / 2014

**devant le Jury :**

Président :	F. Benamira	Prof.	Univ. Constantine 1
Rapporteur :	L. Guechi	Prof.	Univ. Constantine 1
Examineurs :	S. R. Zouzou	Prof.	Univ. Constantine 1
	K. Boudjemaa	M. C. A	Univ. Khenchela

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Généralités sur les intégrales de chemin</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction . . . . .	5
1.2 Propagateur . . . . .	6
1.3 Intégrale de chemin dans l'espace des phases . . . . .	7
1.4 Techniques de transformations . . . . .	8
1.4.1 Transformation de coordonnées . . . . .	8
1.4.2 Reparamétrisation des chemins . . . . .	9
1.5 Méthode des perturbations . . . . .	11
<b>2 Mouvement d'une particule dans un potentiel électrique non central</b>	<b>14</b>
2.1 Introduction . . . . .	14
2.2 Fonction de Green . . . . .	16
2.3 L'oscillateur harmonique plus le potentiel $V(\theta)$ . . . . .	23
2.4 Le potentiel de Coulomb plus le potentiel $V(\theta)$ . . . . .	25
2.5 Cas particuliers . . . . .	26
2.5.1 Premier cas : l'oscillateur en forme d'anneau . . . . .	27
2.5.2 Deuxième cas : le potentiel en forme d'anneau de Hartmann . . . . .	28
2.5.3 Troisième cas : un potentiel central . . . . .	29

<b>3 Etats liés d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur plus un potentiel scalaire du type Pöschl-Teller général déformé</b>	<b>31</b>
3.1 Introduction . . . . .	31
3.2 Fonction de Green . . . . .	33
3.3 Premier cas : $q \geq 1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < +\infty$ . . . . .	36
3.4 Deuxième cas : $0 < q < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$ . . . . .	41
3.5 Potentiel de Morse radial . . . . .	44
<b>Conclusion</b>	<b>46</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>48</b>

# Introduction

Depuis le succès de la résolution des équations d'onde avec des potentiels simples tels que le potentiel de l'oscillateur harmonique, le potentiel de Coulomb et le potentiel de Morse dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, un développement considérable est fait dans la construction de modèles de potentiels pour décrire de façon plus réaliste des interactions nucléaires, interatomiques ou moléculaires. Comme exemple, nous pouvons citer des généralisations non centrales des potentiels de Coulomb, de l'oscillateur harmonique radial et de la barrière radiale rencontrées dans cinq classes de potentiels présentées par Makarov et ses collaborateurs [1] dans une étude systématique de systèmes non relativistes possédant des symétries dynamiques.

Toujours en rapport avec l'oscillateur harmonique et le potentiel de Coulomb, plusieurs auteurs [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] avaient discuté leur généralisation dans un espace courbe caractérisé par une courbure constante. Il faut mentionner aussi que deux larges classes de potentiels dits potentiels de Natanzon [12] généralisent les potentiels usuels à symétrie sphérique. Il y a deux types de potentiels de Natanzon qui dépendent de six paramètres indépendants ou libres : l'un confluent et l'autre hypergéométrique. Le type confluent comprend l'oscillateur harmonique radial, le potentiel de Coulomb et le potentiel de Morse radial comme des cas particuliers et le type hypergéométrique décrit à la fois le potentiel de Pöschl-Teller général [13], le potentiel de Rosen-Morse général [14], le potentiel de Manning-Rosen [15] et le potentiel de Eckart [16]. Chaque cas résulte d'une adaptation particulière des paramètres et de la fonction définie implicitement par une certaine équation différentielle.

La construction des modèles se fait non seulement par une modification des potentiels usuels, mais aussi par une déformation ayant vu le jour très récemment. Ce nouveau type de potentiels est basé sur une  $q$ -déformation des potentiels hyperboliques introduite pour la première fois par Arai [17] dans une étude d'une classe de potentiels invariants de forme effectuée dans le cadre de la supersymétrie en mécanique quantique. L'introduction du paramètre  $q$  sert comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions interatomiques. Dans un problème radial, le paramètre  $q$  permet, en particulier, de définir la position du centre de masse de la molécule distincte de l'origine de la coordonnée.

L'objet de ce travail concerne l'application de l'approche des intégrales de chemin à divers systèmes dynamiques intéressant la physique théorique et la chimie quantique.

Ce mémoire comporte trois chapitres. Le premier chapitre donne un exposé d'un abord très simple du formalisme et des méthodes de l'intégrale de chemin. Le second chapitre concerne l'analyse du problème d'une particule soumise à un potentiel électrique non central. Nous commençons d'abord par établir la fonction de Green associée à ce potentiel avec une dépendance radiale générale. La partie radiale de la fonction de Green est calculable explicitement pour des systèmes avec une dépendance radiale ayant la forme d'un oscillateur harmonique sphérique ou d'un potentiel de Coulomb. Nous donnons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde dans tous les cas. Le dernier chapitre est consacré au traitement du problème des états liés d'une particule relativiste sans spin, de masse  $M$  et de charge  $(-e)$  qui se déplace sous l'effet d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire à symétrie sphérique. Ils sont égaux et du type Pöschl-Teller général dépendant d'un paramètre réel  $q$  de déformation. Le problème de la construction de la fonction de Green se présente de façon différente suivant la valeur du paramètre  $q$ . Pour  $q \geq 1$ , le calcul de la fonction de Green pour l'onde de moment cinétique orbital  $l$  est direct grâce à une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge et lorsque  $0 < q < 1$ , la fonction de Green relative aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) sera construite à l'aide de la méthode des perturbations. Dans chaque cas, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde seront déduits.

# Chapitre 1

## Généralités sur les intégrales de chemin

### 1.1 Introduction

Le formalisme des intégrales de chemin [18] est récent puisqu'il remonte à l'année 1948 en comparaison avec la mécanique ondulatoire de Schrödinger [19] et la mécanique des matrices de Heisenberg [20] qui sont deux formulations équivalentes de la mécanique quantique proposées presque simultanément entre les années 1923 et 1927. Feynman et Hibbs [21] étaient les premiers à développer les concepts physiques et mathématiques fondamentaux qui sont à la base de ce formalisme en mécanique quantique. Depuis sa formulation par Feynman jusqu'en 1978, l'approche des intégrales de chemin était limitée au calcul du propagateur pour un système quantique gouverné par un lagrangien quadratique. Le traitement exact de l'atome d'hydrogène en 1979 au moyen d'une reparamétrisation des chemins [22, 23] avait été un succès remarquable et un tournant décisif dans le développement de ce formalisme. Depuis cette date, de nombreux exemples de problèmes avaient été résolus dans ce cadre à l'aide de transformations spatiales et temporelles de plus en plus compliquées [24, 25, 26, 27] .

Ce chapitre est consacré aux notions élémentaires concernant les intégrales de chemin.

La définition du propagateur sous forme discrète est exposée dans le paragraphe 2 et l'intégrale de chemin dans l'espace des phases dans le paragraphe 3. La technique de transformation temporelle dite couramment reparamétrisation des chemins est rappelée dans le paragraphe 4. Le cinquième et dernier paragraphe est destiné à une présentation succincte de la méthode des perturbations appliquée à un problème avec des conditions aux limites de Dirichlet.

## 1.2 Propagateur

Dans l'espace-temps, une particule est repérée par les coordonnées  $(x_a, t_a)$  et  $(x_b, t_b)$  avec  $A$  comme point de départ et  $B$  le point d'arrivée. La fonction d'onde  $\Psi(x_a, t_a)$  étant l'amplitude de probabilité de trouver la particule à l'instant  $t_a$  au point  $x_a$  et  $\Psi(x_b, t_b)$  est celle de la trouver au point  $x_b$  à l'instant  $t_b$ . Le lien entre ces deux amplitudes se fait grâce au propagateur puisque l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point  $B(x_b, t_b)$  s'obtient en effectuant la somme ou l'intégrale sur toutes les amplitudes de coordonnées  $(x_a, t_a)$ ,  $(x'_a, t_a)$ ,  $(x''_a, t_a)$  ..., situées dans l'espace-temps sur la surface  $t = t_a$ , multipliée par la probabilité de transition entre  $A$  et  $B$  appelée propagateur. On écrit donc

$$\Psi(x_b, t_b) = \int K(x_b, t_b; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a. \quad (1.1)$$

$K(x_b, t_b; x_a, t_a)$  étant le propagateur défini par Feynman et Hibbs [21] comme suit :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\}, \quad (1.2)$$

où  $S[x(t)]$  est l'action classique

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt, \quad (1.3)$$

avec le lagrangien  $L(x, \dot{x}, t)$  pour la particule donné par :

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (1.4)$$

En subdivisant l'intervalle de temps  $[t_a, t_b]$  en  $(N + 1)$  intervalles élémentaires égaux tels que  $\varepsilon = t_n - t_{n-1} = \frac{t_b - t_a}{N+1}$ , et en utilisant les notations habituelles  $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$ ,  $\tilde{x}_n = \frac{x_n + x_{n-1}}{2}$ ,  $x_b = x(t_{N+1})$  et  $x_a = x(t_0)$ , l'expression du propagateur (1.2) se met sous la forme discrète suivante :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_n \right\}, \quad (1.5)$$

avec l'action élémentaire

$$A_n = \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta x_n)^2 - \varepsilon V(\tilde{x}_n). \quad (1.6)$$

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

Considérons le propagateur infinitésimal

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) = \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H} | x_{n-1} \rangle. \quad (1.7)$$

À  $\varepsilon = t_n - t_{n-1} \rightarrow \infty$ , il s'écrit

$$\langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H} | x_{n-1} \rangle \simeq \langle x_n | x_{n-1} \rangle - \frac{i}{\hbar}\varepsilon \langle x_n | H | x_{n-1} \rangle. \quad (1.8)$$

En tenant compte de la relation

$$\langle x_n | x_{n-1} \rangle = \delta(x_n - x_{n-1}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{x_n} e^{\frac{i}{\hbar} p_{x_n} (x_n - x_{n-1})}, \quad (1.9)$$

nous aurons

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_{x_n}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [p_{x_n}(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon H] \right\}. \quad (1.10)$$

Par conséquent le propagateur s'écrit dans l'espace des phases

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_{x_n}}{2\pi\hbar} \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ p_{x_n} \Delta x_n - \varepsilon \left( \frac{p_{x_n}^2}{2M} - V(\tilde{x}_n) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

## 1.4 Techniques de transformations

### 1.4.1 Transformation de coordonnées

Pour simplifier parfois le calcul de l'intégrale de chemin, il est nécessaire d'effectuer un changement de variables qui n'est pas aussi évident comme dans le cas d'une équation différentielle. Si nous faisons le changement de variable  $x \rightarrow q$ , défini par :

$$x = h(q), \quad (1.12)$$

le lagrangien (1.4) devient

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{M}{2} [h'(q)]^2 \dot{q}^2 - V(q), \quad (1.13)$$

où  $h'(q) = \frac{dh(q)}{dq}$ .

Afin d'appliquer la transformation spatiale (1.12) à l'expression de l'action élémentaire (1.6), nous écrivons

$$x_n = h(q_n), \quad (1.14)$$

et en adoptant un développement limité autour du point moyen  $\tilde{q}_n = \frac{q_n + q_{n-1}}{2}$ , un calcul simple montre que

$$(\Delta x_n)^2 \approx [h'(\tilde{q}_n)]^2 (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{12} h'(\tilde{q}_n) h'''(\tilde{q}_n) (\Delta q_n)^4. \quad (1.15)$$

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

$$A_n = \frac{M}{2\varepsilon} \left( [h'(\tilde{q}_n)]^2 (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{12} h'(\tilde{q}_n) h'''(\tilde{q}_n) (\Delta q_n)^4 \right) - \varepsilon V(\tilde{q}_n). \quad (1.16)$$

Notons que la transformation spatiale (1.12) simplifie l'expression du potentiel, mais le terme énergie cinétique devient explicitement dépendant de la nouvelle variable  $q$ .

### 1.4.2 Reparamétrisation des chemins

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

$$\frac{dt}{ds} = h'^2(q), \quad (1.17)$$

où  $s$  est le nouveau paramètre temporel. Sous forme discrète, la définition symétrique de cette transformation s'écrit

$$\begin{aligned} \varepsilon &= h'(q_n) h'(q_{n-1}) \sigma_n \\ &\simeq h'^2(\tilde{q}_n) \left[ 1 + \frac{(\Delta q_n)^2}{4} \left( \frac{h'''(\tilde{q}_n)}{h'(\tilde{q}_n)} - \frac{h''^2(\tilde{q}_n)}{h'^2(\tilde{q}_n)} \right) \right] \sigma_n. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Comme  $\sigma_n$  dépend explicitement du chemin, nous devons insérer la contrainte

$$h'(q_a) h'(q_b) \int_0^\infty \delta \left( T - \int_0^S h'^2(q) ds \right) dS = 1. \quad (1.19)$$

En appliquant les transformations (1.12), (1.17), suivies de l'introduction de la contrainte (1.19) dans l'expression du propagateur (1.5) et en exprimant la fonction delta de Dirac comme une transformée de Fourier, nous sommes amenés à calculer la fonction de Green

$$\begin{aligned} G(x_b, x_a; E) &= \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K(x_b, t_b; x_a, t_a) \\ &= [h'(q_a)h'(q_b)]^{\frac{1}{2}} \int_0^S P(q_b, q_a; S) dS, \end{aligned} \quad (1.20)$$

où le noyau  $P(q_b, q_a; S)$  est donné par

$$P(q_b, q_a; S) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_n}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dq_n \right] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \tilde{A}_n \right\}, \quad (1.21)$$

avec

$$\tilde{A}_n = \frac{M}{2\sigma_n} (\Delta q_n)^2 - \sigma_n h'^2(\tilde{q}_n) (V(\tilde{q}_n) - E) + \left( \frac{h'''(\tilde{q}_n)}{h'(\tilde{q}_n)} - \frac{2 h''^2(\tilde{q}_n)}{3 h'^2(\tilde{q}_n)} \right) \frac{(\Delta q_n)^4}{8\sigma_n}. \quad (1.22)$$

Notons que le terme en  $(\Delta q_n)^4$  contenu dans l'expression de l'action peut être remplacé par une correction quantique en utilisant l'identité

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp\left(-\frac{\alpha}{\sigma} x^2\right) dx = \frac{3}{4} \frac{\alpha^2}{\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\alpha}{\sigma} x^2\right) dx. \quad (1.23)$$

L'intégrale de chemin (1.21) devient alors

$$\begin{aligned} P(q_b, q_a; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_n}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dq_n \right] \\ &\times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\sigma_n} (\Delta q_n)^2 - \sigma_n h'^2(\tilde{q}_n) (V(\tilde{q}_n) - E) \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{3\hbar^2}{8M} \sigma_n \left( \frac{h'''(\tilde{q}_n)}{h'(\tilde{q}_n)} - \frac{2 h''^2(\tilde{q}_n)}{3 h'^2(\tilde{q}_n)} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

La fonction de Green (1.20) peut être évaluée exactement lorsque le potentiel  $V$  et la transformation spatiale sont connus.

## 1.5 Méthode des perturbations

En mécanique quantique standard qui s'appuie sur la formulation de Schrödinger ou sur celle de Heisenberg, la méthode des perturbations est couramment utilisée dans la résolution de la plupart des problèmes. Cependant, cette méthode peut être également employée dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin de Feynman de façon très simple et avec une grande efficacité. Nous allons présenter ici un rappel concernant cette technique qui sera utilisée dans le dernier chapitre. Pour cela, considérons un potentiel  $W(x) = V(x) + \tilde{V}(x)$  trop compliqué et ne se laissant pas traiter directement par l'intégrale de chemin et tel que  $V(x)$  est un potentiel pour lequel l'intégrale de chemin est supposée connue et donnée par :

$$K^{(V)}(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\}. \quad (1.25)$$

Le propagateur

$$K(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - W(x) \right] dt \right\} \quad (1.26)$$

associé au potentiel  $W(x)$  s'écrit

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x) - \tilde{V}(x) \right] dt \right\} \\
&= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\} \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \tilde{V}(x) dt \right\} \tag{1.27}
\end{aligned}$$

En développant en série de puissances le terme contenant  $\tilde{V}(x)$  de l'intégrale de chemin et en considérant  $V(x)$  comme une perturbation, nous aurons

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \int_{t'}^{t''} dt_j \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; T) \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; T - t_n) \\
&= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \int_{t'}^{t_{j+1}} dt_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; t_1 - t') \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; t'' - t_n), \tag{1.28}
\end{aligned}$$

où nous avons ordonné les variables temporelles de la manière suivante [28, 29, 30] :  $t' = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n+1} = t''$  et où nous avons posé  $T = t'' - t'$ .

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

$$\begin{cases} G(x'', x'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(i\frac{ET}{\hbar}\right) K(x'', x'; T), \\ G^{(V)}(x'', x'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(i\frac{ET}{\hbar}\right) K^{(V)}(x'', x'; T) \end{cases} \quad (1.29)$$

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

$$\tilde{V}(x) = -\alpha\delta(x - a), \quad (1.30)$$

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

$$G^{(\delta)}(x'', x'; E) = G^{(V)}(x'', x'; E) - \frac{G^{(V)}(x'', a; E) G^{(V)}(a, x'; E)}{G^{(V)}(a, a; E) - \frac{1}{\alpha}}, \quad (1.31)$$

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

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

$$G^{(V)}(a, a; E_n^{(\delta)}) = \frac{1}{\alpha} \quad (1.32)$$

qui est en général une équation transcendante.

# Chapitre 2

## Mouvement d'une particule dans un potentiel électrique non central

### 2.1 Introduction

Les généralisations non centrales des potentiels de Coulomb, de l'oscillateur harmonique et de la barrière radiale dans un espace à trois dimensions sont très utiles pour la description des systèmes à symétrie non sphérique en physique quantique et en chimie. Comme exemple, nous pouvons citer deux potentiels à symétrie axiale. Le premier exemple est le potentiel en forme d'anneau proposé par Hartmann en 1972 et le deuxième par Quesne en 1988, utilisés comme modèles pour décrire les molécules en forme d'anneau [31, 32, 33, 34]. Les potentiels de Hartmann et de Quesne ont été étudiés en utilisant des approches variées telles que la technique des intégrales de chemin [35, 36, 37] et la méthode algébrique [38, 39, 40, 41, 42, 43]. Ces deux modèles possèdent des caractéristiques analytiques qui appartiennent à un ensemble de potentiels à trois dimensions étudiés par Smorodinsky, Winternitz et leurs collaborateurs [1] et qui étaient réexaminés en 1990 par Evans [44, 45, 46]. Il présenta une liste détaillée de ces potentiels de Smorodinsky-Winternitz comprenant les intégrales premières correspondantes et tous les systèmes de

coordonnées dans lesquels la séparation des variables est possible. En outre, la méthode des intégrales de chemin et l'approche algébrique  $so(2,1)$  ont aussi été utilisées dans le traitement quantique de ces potentiels [47, 48].

L'oscillateur harmonique, le potentiel de Coulomb et les potentiels en forme d'anneau sont des cas particuliers du potentiel électrique non central qui peut être donné comme suit :

$$V(r, \theta) = V(r) + \frac{1}{r^2}V(\theta), \quad (2.1)$$

où  $V(r)$  est un potentiel radial et la partie dépendant de  $\theta$  est définie par :

$$V(\theta) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\gamma + \beta \sin^2 \theta + \alpha \sin^4 \theta}{\sin^2 \theta \cos^2 \theta}, \quad (2.2)$$

où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont des constantes réelles. Sans perte de généralité, notons que nous pouvons faire le changement de variable  $\theta \rightarrow (\theta/2)$  dans  $V(\theta)$ . Le potentiel défini par l'expression (2.1) peut être ajouté à la liste des potentiels de Smorodinsky-Winternitz admettant des solutions exactes de l'équation de Schrödinger. Comme les potentiels en forme d'anneau,  $V(r, \theta)$  joue un rôle important dans toutes les situations où la symétrie axiale est présente. Par exemple, il est d'un grand intérêt pour l'étude des états de rotation-vibration des molécules diatomiques.

Récemment, ce potentiel [49] et le potentiel en forme d'anneau de l'oscillateur harmonique à trois dimensions [50] ont été traités à travers la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cadre de la méthode de Nikiforov-Uvarov, mais les coefficients  $A$ ,  $B$  et  $L$  dans la référence [49] et  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{b}$  et  $\Lambda$  dans la référence [50] n'ont pas été donnés correctement. Lorsque  $V(\theta) = 0$ , il est clair que leurs solutions ne sont pas valables pour tous les états, c'est à dire, pour un nombre quantique orbital  $l = 0$ , puisque selon leurs travaux, les valeurs de  $l$  sont définies comme  $l = 1 + 2\nu + |m|$ , ( $\nu, |m| \in \mathbb{N}$ ) dans la référence [49] et  $l = 1 + 2n_r + |m|$ , ( $n_r, |m| \in \mathbb{N}$ ) dans la référence [50]. Nous pensons donc qu'une étude plus rigoureuse du potentiel composé décrit par l'expression (2.1) mérite d'être entreprise

en utilisant l'approche des intégrales de chemin.

Dans le second paragraphe, nous construirons la fonction de Green pour le potentiel (2.1) avec une dépendance radiale générale  $V(r)$  par intégration des chemins. Après avoir séparé et effectué l'intégration sur les variables angulaires  $\phi_j$ , il est montré que la partie en  $(r, \theta)$  peut se décomposer en deux noyaux indépendants, l'une associée à la variable radiale et l'autre à la variable polaire grâce à la procédure de reparamétrisation des chemins. La partie angulaire est ramenée au propagateur relatif au potentiel de Pöschl-Teller étudié depuis quelques années par plusieurs auteurs [51, 52, 53]. Dans le troisième paragraphe, nous considérons le cas où le potentiel radial est celui de l'oscillateur harmonique. Le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde des états liés sont calculés. Dans le quatrième paragraphe, le cas où la dépendance radiale de (2.1) est un potentiel de Coulomb attractif sera discuté. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées sont aussi trouvés. L'oscillateur en forme d'anneau et le potentiel en forme d'anneau de Hartmann sont étudiés comme des cas particuliers dans le dernier paragraphe.

## 2.2 Fonction de Green

En coordonnées sphériques, le propagateur de Feynman associé au potentiel (2.1) s'écrit sous forme discrète :

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}'' , \vec{r}' ; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left( \frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}N} \prod_{j=1}^{N-1} r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n \\
 &\times \exp \left( \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N S(n, n-1) \right), \tag{2.3}
 \end{aligned}$$

où

$$S(n, n-1) = \frac{\mu}{2\varepsilon} [r_n^2 + r_{n-1}^2 - 2r_n r_{n-1} (\cos \theta_n \cos \theta_{n-1} + \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \cos(\Delta \phi_n))] - \varepsilon \left( V(\tilde{r}_n) + \frac{1}{\tilde{r}_n^2} V(\tilde{\theta}_n) \right) \quad (2.4)$$

représente l'action dans l'intervalle élémentaire  $[t_{n-1}, t_n]$ , avec les notations habituelles  $\varepsilon = t_n - t_{n-1}$ ,  $T = N\varepsilon = t'' - t'$ ,  $\vec{r}'' = \vec{r}(t'')$ ,  $\vec{r}' = \vec{r}(t')$ , et pour toute variable  $u$  :  $u_n = u(t_n)$ ,  $\tilde{u}_n = (u_n + u_{n-1})/2$ ,  $\Delta u_n = u_n - u_{n-1}$ .

Nous nous occupons d'abord de la séparation de la partie dépendante de la variable angulaire azimutale  $\phi$  dans l'intégrale de chemin. Pour faire cela, nous utilisons le développement de Fourier (voir Ref. [54], p. 973, Eq. (8.511.4))

$$\exp [z \cos(\Delta \phi)] = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} I_m(z) \exp [im(\Delta \phi)], \quad (2.5)$$

et le comportement asymptotique (voir Ref. [54], p. 961, Eq. (8.451)) de la fonction de Bessel modifiée, pour  $\varepsilon$  petit :

$$I_m\left(\frac{u}{\varepsilon}\right) \approx \left(\frac{\varepsilon}{2\pi v}\right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ \frac{u}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon}{2u} \left( m^2 - \frac{1}{4} \right) \right]. \quad (2.6)$$

En effectuant le calcul des intégrales sur les variables angulaires  $\phi_n$ , le propagateur se décomposera alors en noyaux partiels ainsi :

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp [im(\phi'' - \phi')]}{2\pi} K_m(r'', \theta'', r', \theta'; T), \quad (2.7)$$

où

$$K_m(r'', \theta'', r', \theta'; T) = \frac{1}{[r''^2 r'^2 \sin \theta'' \sin \theta']^{\frac{1}{2}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \varepsilon} \right)^N \prod_{j=1}^N (r_n r_{n-1})^{\frac{1}{2}} \times \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N A(n, n-1) \right\}, \quad (2.8)$$

avec

$$\begin{aligned}
A(n, n-1) &= \frac{\mu}{2\varepsilon} \left[ (\Delta r_n)^2 + 4r_n r_{n-1} \sin^2 \left( \frac{\Delta \theta_n}{2} \right) \right] + \varepsilon \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu \tilde{r}_n^2} - V(\tilde{r}_n) \right) \\
&\quad - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu \tilde{r}_n^2} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right). \tag{2.9}
\end{aligned}$$

Symétrisons l'expression (2.8) par rapport au point moyen de l'intervalle temporel élémentaire  $[t_{n-1}, t_n]$  et développons la mesure jusqu'à l'ordre 2 en  $\Delta r_n$ ,

$$\prod_{n=1}^N (r_n r_{n-1})^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \approx \prod_{n=1}^N \tilde{r}_n \left( 1 - \frac{(\Delta r_n)^2}{8\tilde{r}_n^2} \right) \prod_{j=1}^{N-1} dr_n d\theta_n, \tag{2.10}$$

et l'action  $A(n, n-1)$  jusqu'à l'ordre 4 in  $\Delta u_n$ ,

$$\begin{aligned}
A(n, n-1) &\approx \frac{\mu}{2\varepsilon} [(\Delta r_n)^2 + \tilde{r}_n^2 (\Delta \theta_n)^2] \\
&\quad - \frac{\mu}{8\varepsilon} \left( (\Delta r_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 + \tilde{r}_n^2 \frac{(\Delta \theta_n)^4}{3} \right) + \varepsilon \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu \tilde{r}_n^2} - V(\tilde{r}_n) \right) \\
&\quad - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu \tilde{r}_n^2} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right). \tag{2.11}
\end{aligned}$$

Ensuite, à l'aide de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [55], introduisons une correction purement quantique en effectuant les substitutions suivantes :

$$(\Delta r_n)^2 \rightarrow \frac{i\hbar\varepsilon}{\mu}; (\Delta r_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 \rightarrow \frac{1}{\tilde{r}_n^2} \left( \frac{i\hbar\varepsilon}{\mu} \right)^2; (\Delta \theta_n)^4 \rightarrow \frac{3}{\tilde{r}_n^4} \left( \frac{i\hbar\varepsilon}{\mu} \right)^2. \tag{2.12}$$

Le noyau partiel (2.8) devient alors

$$\begin{aligned}
K_m(r'', \theta'', r', \theta'; T) &= \frac{1}{[r''^2 r'^2 \sin \theta'' \sin \theta']^{\frac{1}{2}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \varepsilon} \right)^N \prod_{j=1}^N \tilde{r}_n \\
&\quad \times \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{A}(n, n-1) \right\}, \tag{2.13}
\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{A}(n, n-1) \approx & \frac{\mu}{2\varepsilon} [(\Delta r_n)^2 + \tilde{r}_n^2 (\Delta \theta_n)^2] + \varepsilon \left[ \frac{\hbar^2}{2\mu\tilde{r}_n^2} \left( \alpha + \frac{1}{4} \right) - V(\tilde{r}_n) \right] \\ & - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu\tilde{r}_n^2} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right). \end{aligned} \quad (2.14)$$

A ce niveau, nous remarquons que les variables radiale et angulaire  $r_n$  et  $\theta_n$  ne sont pas séparées. Pour effectuer leur séparation, introduisons d'abord l'énergie  $E$  en passant à la fonction de Green (transformée de Fourier du propagateur) :

$$G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) = \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{i}{\hbar} ET \right] K(\vec{r}'', \vec{r}'; T), \quad (2.15)$$

et appliquons ensuite la technique de reparamétrisation des chemins [22, 23], en effectuant la transformation temporelle  $t \rightarrow s$  définie par :

$$\frac{dt}{ds} = r^2(s), \quad (2.16)$$

ou, sous forme discrète

$$\varepsilon = \sigma_n r_n r_{n-1} = \sigma_n \tilde{r}_n^2 \left( 1 - \frac{(\Delta r_n)^2}{4\tilde{r}_n^2} \right); \quad \sigma_n = s_n - s_{n-1}. \quad (2.17)$$

En tenant compte de la contrainte

$$T = \int_0^S r^2(s) ds, \quad (2.18)$$

la fonction de Green (2.15) se récrit ainsi :

$$G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(im(\phi'' - \phi'))}{2\pi} \int_0^\infty dS P_E^m(r'', \theta'', r', \theta'; S), \quad (2.19)$$

où

$$\begin{aligned}
P_E^m(r'', \theta'', r', \theta'; S) &= \frac{1}{\sqrt{\sin \theta'' \sin \theta'}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \sigma_n} \right) \frac{1}{\tilde{r}_j} \left( 1 + \frac{(\Delta r_n)^2}{4\tilde{r}_n^2} \right) \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\mu}{2\sigma_n} \left( 1 + \frac{(\Delta r_n)^2}{4\tilde{r}_n^2} \right) \left( \frac{(\Delta r_n)^2}{\tilde{r}_n^2} + (\Delta \theta_n)^2 \right) \right. \right. \\
&+ \sigma_n \left[ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \alpha + \frac{1}{4} \right) - \tilde{r}_n^2 (V(\tilde{r}_n) - E) \right] \\
&\left. \left. - \frac{\hbar^2 \sigma_n}{8\mu} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{2.20}$$

est le nouveau noyau.

Remplaçons les termes d'ordre 2 et 4 contenus dans la mesure et dans l'action, en utilisant une nouvelle fois la procédure de Mc Laughlin et Schulman

$$(\Delta r_n)^2 \rightarrow \tilde{r}_n^2 \left( \frac{i\hbar\sigma_n}{\mu} \right); (\Delta r_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 \rightarrow \tilde{r}_n^2 \left( \frac{i\hbar\sigma_n}{\mu} \right)^2; (\Delta r_n)^4 \rightarrow 3\tilde{r}_n^4 \left( \frac{i\hbar\sigma_n}{\mu} \right)^2. \tag{2.21}$$

Ceci conduit à une correction purement quantique  $\left(-\frac{\hbar^2}{4\mu}\sigma_n\right)$ . Par conséquent, l'expression (2.20) admet une séparation des variables  $r_n$  et  $\theta_n$  et se décompose en un produit d'un noyau radial et d'un noyau angulaire

$$P_E^m(r'', \theta'', r', \theta'; S) = P_E^m(r'', r'; S) P_E^m(\theta'', \theta'; S), \tag{2.22}$$

avec

$$\begin{aligned}
P_E^m(r'', r'; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\tilde{r}_n} \prod_{n=1}^{N-1} dr_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\mu}{2\sigma_n} \frac{(\Delta r_n)^2}{\tilde{r}_n^2} \right. \right. \\
&\left. \left. + \sigma_n \tilde{r}_n^2 (E - V(\tilde{r}_n)) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \alpha - \frac{1}{4} \right) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{2.23}$$

et

$$\begin{aligned}
P_E^m(\theta'', \theta'; S) &= [\sin \theta'' \sin \theta']^{-\frac{1}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \left( \frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_n \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\mu}{2\sigma_n} (\Delta\theta_n)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \sigma_n \frac{\hbar^2}{8\mu} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{2} [\sin \theta'' \sin \theta']^{-\frac{1}{2}} K^{(PT)}(\theta'', \theta'; S)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

où  $K^{(PT)}(\theta'', \theta'; S)$  peut être identifié avec le propagateur relatif à une particule de masse  $M = 4\mu$  placée dans le potentiel de Pöschl-Teller. Ce propagateur a été évalué par l'approche de l'intégration des chemins sur la variété du groupe  $SU(2)$ . Sa solution est de la forme [51, 52, 53] :

$$\begin{aligned}
K^{(PT)}(\theta'', \theta'; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} d\left(\frac{\theta_n}{2}\right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2\sigma_n} \left( \frac{\Delta\theta_n}{2} \right)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \sigma_n \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right) \right] \right\} \\
&= \sum_{\nu=0}^{+\infty} \exp \left[ -i \frac{\hbar}{2M} (2\nu + \kappa + \lambda + 1)^2 S \right] \Psi_\nu^{PT}(\theta'') \Psi_\nu^{PT*}(\theta'),
\end{aligned} \tag{2.25}$$

où

$$\kappa = \sqrt{4\gamma + m^2}, \quad \lambda = \sqrt{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2}, \tag{2.26}$$

et les fonctions d'onde sont données par :

$$\begin{aligned} \Psi_\nu^{PT}(\theta) &= \left[ 2(2\nu + \kappa + \lambda + 1) \frac{\nu! \Gamma((\nu + \kappa + \lambda + 1))}{\Gamma((\nu + \kappa + 1)) \Gamma((\nu + \lambda + 1))} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^{\kappa + \frac{1}{2}} \left( \frac{\theta}{2} \right) \\ &\times \cos^{\lambda + \frac{1}{2}} \left( \frac{\theta}{2} \right) P_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\cos \theta). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Ici les  $P_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\cos \theta)$  denotent des polynômes de Jacobi.

Nous insérons ensuite les équations (2.27), (2.25), (2.24), (2.23) et (2.22) dans (2.19) et nous revenons à l'ancienne variable temporelle  $t$  en utilisant la transformation inverse  $s \rightarrow t$  définie par  $ds/dt = r^{-2}(t)$ . En tenant compte de la correction purement quantique calculée suivant la procédure de Mc Laughlin et Schulman, la fonction de Green (2.19) devient alors

$$G(\vec{r}'' , \vec{r}' ; E) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \Phi_m(\phi'') \Phi_m^*(\phi') \Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\theta'') \Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)*}(\theta') G_{m, \nu}(r'', r' ; E), \quad (2.28)$$

où les fonctions d'onde  $\Phi_m(\phi)$  and  $\Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\theta)$ , convenablement normalisées, sont

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.29)$$

et

$$\begin{aligned} \Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\theta) &= \left[ \left( \nu + \frac{\kappa + \lambda + 1}{2} \right) \frac{\nu! \Gamma((\nu + \kappa + \lambda + 1))}{\Gamma((\nu + \kappa + 1)) \Gamma((\nu + \lambda + 1))} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^\kappa \left( \frac{\theta}{2} \right) \\ &\times \cos^\lambda \left( \frac{\theta}{2} \right) P_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\cos \theta), \end{aligned} \quad (2.30)$$

et

$$G_{m, \nu}(r'', r' ; E) = \frac{1}{r'' r'} \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{iET}{\hbar} \right] \int Dr(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(r, \dot{r}) dt \right\} \quad (2.31)$$

est la fonction de Green radiale avec le Lagrangien radial effectif donné par :

$$L(r, \dot{r}) = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{L}{r^2} - V(r). \quad (2.32)$$

Ici, la constante  $L$  est définie par :

$$L = \frac{1}{4} \left( 2\nu + \sqrt{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2} + \sqrt{4\gamma + m^2} + 1 \right)^2 - \alpha - \frac{1}{4}. \quad (2.33)$$

L'expression (2.31) peut être évaluée lorsque le potentiel  $V(r)$  est précisé. Notons que les fonctions d'onde normalisées données par l'équation (2.30) et les constantes (2.26) et (2.33) sont différentes de celles de la référence [49] .

## 2.3 L'oscillateur harmonique plus le potentiel $V(\theta)$

Lorsque  $V(r)$  est pris comme étant le potentiel de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2, \quad (2.34)$$

la fonction de Green radiale (2.31) prend la forme de la fonction de Green radiale de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions plus une barrière centrifuge qui a été calculée depuis longtemps [56] . Le résultat de ce calcul est

$$\begin{aligned} G_{m,\nu}(r'', r'; E) &= \frac{\mu\omega}{i\hbar\sqrt{r''r'}} \int_0^\infty dT \frac{\exp\left[\frac{iET}{\hbar}\right]}{\sin(\omega T)} I_{\sqrt{L+\frac{1}{4}}} \left( \frac{\mu\omega r''r'}{i\hbar \sin(\omega T)} \right) \\ &\times \exp\left[ \frac{i\mu\omega}{2\hbar} (r''^2 + r'^2) \cot(\omega T) \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Grâce à la formule [54] ,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dq \frac{\exp(-2pq)}{\sinh q} \exp\left[-\frac{1}{2}(x+y)\coth q\right] I_{2\gamma}\left(\frac{\sqrt{xy}}{\sinh q}\right) \\ &= \frac{\Gamma\left(p+\gamma+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{xy}\Gamma(2\gamma+1)} M_{-p,\gamma}(x) W_{-p,\gamma}(y), \end{aligned} \quad (2.36)$$

qui est valable pour  $\text{Re}(p+\gamma+\frac{1}{2}) > 0$ ,  $\text{Re}(\gamma) > 0$  et  $y > x$ , l'expression intégrée de la fonction de Green (2.35) pour  $r'' > r'$ , prend la forme compacte suivante :

$$\begin{aligned} G_{m,\nu}(r'', r'; E) &= \frac{1}{i\omega (r''r')^{\frac{3}{2}}} \frac{\Gamma\left(p+\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\sqrt{L+\frac{1}{4}}+1\right)} \\ &\quad \times M_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right) W_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r''^2\right), \quad r'' > r' \end{aligned} \quad (2.37)$$

où  $M_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right)$  et  $W_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r''^2\right)$  sont des fonctions de Whittaker standard et  $p = -E/2\hbar\omega$ .

Le spectre d'énergie des états liés peut être déduit à partir des pôles de la fonction de Green radiale qui se produisent lorsque l'argument de la fonction  $\Gamma\left(p+\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}+\frac{1}{2}\right)$  est un nombre entier négatif ou égal à zéro, c'est à dire, lorsque  $p+\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}+\frac{1}{2} = -n_r$ , pour  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . Les niveaux d'énergie sont alors donnés par :

$$E_{n_r,\nu,m} = \hbar\omega \left(2n_r + \sqrt{L+\frac{1}{4}}+1\right). \quad (2.38)$$

Aux pôles, les fonctions de Whittaker peuvent être exprimées en termes des fonctions hypergéométriques confluentes comme suit (voir Ref. [54], p. 1059, formules (9.220.2) et (9.220.4) ) :

$$M_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right) = e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r'^2} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right)^{\frac{1+\sqrt{L+\frac{1}{4}}}{2}} {}_1F_1\left(-n_r, 1+\sqrt{L+\frac{1}{4}}; \frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right), \quad (2.39)$$

$$W_{-p, \frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r''^2 \right) = (-1)^{n_r} \frac{\Gamma \left( n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)}{\Gamma \left( \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)} M_{-p, \frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r''^2 \right). \quad (2.40)$$

D'où, nous avons près des pôles,

$$G_{n_r, \nu, m}(r'', r'; E) \sim \frac{i\hbar}{E - E_{n_r, \nu, m}} R_{n_r, \nu, m}(r'') R_{n_r, \nu, m}(r'), \quad (2.41)$$

avec les fonctions d'onde normalisées

$$\begin{aligned} R_{n_r, \nu, m}(r) &= \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left[ \frac{2\Gamma \left( n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)}{n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma \left( \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)} \\ &\times \exp \left( -\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2 \right) \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right)^{-\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}} {}_1F_1 \left( -n_r, 1 + \sqrt{L + \frac{1}{4}}; \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

## 2.4 Le potentiel de Coulomb plus le potentiel $V(\theta)$

Lorsque  $V(r)$  est le potentiel de Coulomb attractif d'un atome hydrogénoïde défini par :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (2.43)$$

la fonction de Green radiale (2.31) prend la forme :

$$\begin{aligned} G_{m, \nu}(r'', r'; E) &= \frac{1}{r'' r'} \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{iET}{\hbar} \right] \int Dr(t) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left( \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2 L}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{r} \right) dt \right\}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

En utilisant les résultats obtenus par l'intégration des chemins dans la référence [53] et en intégrant finalement sur  $T$ , nous arrivons à

$$G_{m,\nu}(r'', r'; E) = \frac{2}{i\omega r'' r'} \frac{\Gamma\left(p + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1\right)} M_{-p, \sqrt{L + \frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r'\right) W_{-p, \sqrt{L + \frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r''\right), \quad (2.45)$$

où  $p = -\frac{2Ze^2}{\hbar\omega}$ ,  $\omega = 2\sqrt{-\frac{2E}{\mu}}$  et  $r'' > r'$ .

Afin de déterminer le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde radiales, convenablement normalisées, nous procédons comme dans le paragraphe précédent et nous obtenons

$$E_{n_r, \nu, m} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 \left[ n_r + \frac{1}{2} \sqrt{\left(2\nu + \sqrt{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2} + \sqrt{4\gamma + m^2} + 1\right)^2 - 4\alpha + \frac{1}{2}} \right]^2}, \quad (2.46)$$

$$R_{n_r, \nu, m}(r) = \frac{2}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)^2 \Gamma\left(2\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1\right)} \left[ \frac{\Gamma\left(n_r + 2\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1\right)}{a n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \exp\left(-\frac{r}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}\right) \left(\frac{2r}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}\right)^{-\frac{1}{2} + \sqrt{L + \frac{1}{4}}} \\ \times {}_1F_1\left(-n_r, 2\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1; \frac{2r}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}\right), \quad (2.47)$$

où  $a = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}$  est le rayon de Bohr.

## 2.5 Cas particuliers

Pour vérifier l'exactitude des résultats donnés ci-dessus et les comparer à ceux disponibles dans la littérature, nous considérons trois cas.

### 2.5.1 Premier cas : l'oscillateur en forme d'anneau

En posant  $\alpha = \beta = 0$ ,  $\gamma \neq 0$  et en prenant  $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$  dans la définition (2.1), nous obtenons le potentiel suivant :

$$V(r, \theta) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{2\hbar^2}{\mu} \frac{\gamma}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad 0 < \theta < \pi. \quad (2.48)$$

Ce potentiel a été traité, dans le cadre des coordonnées cylindriques circulaires, à travers la résolution de l'équation de Schrödinger [34], et via l'approche des intégrales de chemin [57].

Les paramètres (2.26) et (2.33) s'écrivent donc

$$\begin{cases} \kappa = \lambda = \sqrt{4\gamma + m^2} = \eta, \\ L = J(J + 1), \end{cases} \quad (2.49)$$

avec  $J = \nu + \eta$ .

La fonction de Green associée à l'oscillateur en forme d'anneau peut être déduite des expressions (2.37) et (2.29),

$$\begin{aligned} G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) &= \frac{1}{2\pi i \omega (r'' r')^{\frac{3}{2}}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left( J + \frac{1}{2} \right) \frac{\Gamma(J + \eta + 1) \Gamma\left(p + \frac{J}{2} + \frac{3}{4}\right)}{\Gamma(J - \eta + 1) \Gamma\left(J + \frac{3}{2}\right)} \\ &\times e^{im(\phi'' - \phi')} P_J^{-\eta}(\cos \theta'') P_J^{-\eta}(\cos \theta') \\ &\times W_{-p, \frac{1}{2}(J + \frac{1}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r''^2 \right) M_{-p, \frac{1}{2}(J + \frac{1}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r'^2 \right), \end{aligned} \quad (2.50)$$

avec  $p = -E/2\hbar\omega$ .

Le spectre discret de l'énergie peut être déduit de l'expression (2.38),

$$E_{n_r, \nu, m} = \hbar\omega \left( 2n_r + J + \frac{3}{2} \right). \quad (2.51)$$

Les fonctions d'onde normalisées sont données par (2.29) pour la partie azimutale et

peuvent être déduites à partir des expressions (2.30) et (2.42) pour les parties polaire et radiale,

$$\Phi_J^{(\eta,\eta)}(\theta) = \left[ \left( J + \frac{1}{2} \right) \frac{\Gamma(J + \eta + 1)}{\Gamma(J - \eta + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} P_J^{-\eta}(\cos \theta), \quad (2.52)$$

et

$$\begin{aligned} R_{n_r,\nu,m}(r) &= \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left[ \frac{2\Gamma(n_r + J + \frac{3}{2})}{n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(J + \frac{3}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right)^{\frac{J}{2}} \\ &\times \exp\left(-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2\right) {}_1F_1\left(-n_r, J + \frac{3}{2}; \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right). \end{aligned} \quad (2.53)$$

## 2.5.2 Deuxième cas : le potentiel en forme d'anneau de Hartmann

Pour  $\alpha = \beta = 0$ ,  $\gamma \neq 0$  et  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ , le potentiel (2.1) se réduit à

$$V(r, \theta) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{2\hbar^2}{\mu} \frac{\gamma}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad 0 < \theta < \pi. \quad (2.54)$$

Ce potentiel a été proposé par Hartmann comme un modèle pour décrire la molécule de benzène [31, 32, 33].

La fonction de Green relative à ce potentiel peut être déduite à partir des expressions (2.45) et (2.28),

$$\begin{aligned} G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) &= \frac{1}{2\pi i \omega r'' r'} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} (2J + 1) \frac{\Gamma(J + \eta + 1) \Gamma(p + J + \frac{1}{2})}{\Gamma(J - \eta + 1) \Gamma(2J + 2)} e^{im(\phi'' - \phi')} \\ &\times P_J^{-\eta}(\cos \theta'') P_J^{-\eta}(\cos \theta') W_{-p, J + \frac{1}{2}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r''\right) M_{-p, J + \frac{1}{2}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r'\right), \end{aligned} \quad (2.55)$$

où  $p = -2Ze^2/\hbar\omega$ , et  $\omega = 2\sqrt{-2E/\mu}$ .

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde radiales peuvent être obtenus à partir des

expressions (2.46) et (2.47),

$$E_{n_r, \nu, m} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (n_r + J + 1)^2}, \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned} R_{n_r, \nu, m}(r) &= \left[ \frac{a \Gamma(n_r + 2J + 2)}{2 n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(2J + 2)} \\ &\times \left( \frac{2r}{a(n_r + J + 1)} \right)^J \exp\left( -\frac{r}{a(n_r + J + 1)} \right) \\ &{}_1F_1\left( -n_r, 2J + 1; \frac{2r}{a(n_r + J + 1)} \right). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Les fonctions d'onde pour les parties azimutale et polaire sont identiques aux expressions (2.19) et (2.52).

### 2.5.3 Troisième cas : un potentiel central

Si nous éliminons le potentiel  $V(\theta)$  en posant  $\alpha = \beta = \gamma = 0$ , le potentiel (2.1) se réduit à un potentiel central  $V(r)$ . Les paramètres  $\kappa, \lambda$  et  $L$  définis par les expressions (2.26) et (2.33) s'écrivent

$$\kappa = \lambda = \eta = |m|, \quad L = l(l + 1), \quad (2.58)$$

où  $l = \nu + |m|$  représente le nombre quantique orbital, qui prend les valeurs  $l = 0, 1, 2, \dots$ , dépend des combinaisons de  $\nu$  et  $|m|$ .

Dans le cas où  $V(r)$  est le potentiel de l'oscillateur harmonique à trois dimensions, le spectre de l'énergie (2.38) devient

$$E_{n_r, l} = \hbar\omega \left( 2n_r + l + \frac{3}{2} \right). \quad (2.59)$$

Les fonctions d'onde bien connues et complètes peuvent être déduites à partir des équations (2.29), (2.30) et (2.42),

$$\begin{aligned}
\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left[ (l+1) \frac{\Gamma(l+|m|+1)\Gamma(n_r+l+\frac{3}{2})}{n_r!\Gamma(l-|m|+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right)^{\frac{l}{2}} \exp\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) \\
&\times {}_1F_1\left(-n_r, l+\frac{3}{2}; \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) P_l^{-|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}. \tag{2.60}
\end{aligned}$$

Lorsque  $V(r)$  est le potentiel coulombien d'un atome hydrogénoïde, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés s'obtiennent à partir des équations (2.46), (2.29), (2.30) et (2.47),

$$E_{n_r, l} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (n_r + l + 1)^2}, \tag{2.61}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{a(n_r + l + 1)^2} \left[ \frac{2l+1}{\pi a} \frac{\Gamma(l+|m|+1)\Gamma(n_r+2l+2)}{n_r!\Gamma(l-|m|+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \left( \frac{2r}{a(n_r + l + 1)} \right)^l \exp\left(-\frac{r}{a(n_r + l + 1)}\right) \\
&\times {}_1F_1\left(-n_r, 2l+2; \frac{2r}{a(n_r + l + 1)}\right) P_l^{-|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}. \tag{2.62}
\end{aligned}$$

# Chapitre 3

## Etats liés d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur plus un potentiel scalaire du type Pöschl-Teller général déformé

### 3.1 Introduction

Il y a une littérature très abondante sur l'étude de l'équation de Klein-Gordon d'une particule en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux en envisageant des modèles de potentiel typiques tels que le potentiel de Hartmann et le potentiel de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions [58], le potentiel de Kratzer en forme d'anneau [59, 60], le potentiel de Rosen-Morse [61], le potentiel exponentiel à plusieurs paramètres [62], le potentiel du puits double symétrique [63], le potentiel en forme d'anneau [64], le potentiel de Makarov [65] et le potentiel trigonométrique carré [66].

Récemment, l'équation de Klein-Gordon avec un potentiel scalaire et un potentiel vecteur égaux et de type Pöschl-Teller général a été résolue approximativement pour un état de moment cinétique  $l$  par la méthode standard [67] et dans le cadre du formalisme de

la supersymétrie en mécanique quantique [68] . Durant la même année, une modification est apportée à ce potentiel de façon à lui faire épouser la forme :

$$V_q(r) = \frac{V_1 - V_2 \cosh_q(\alpha r)}{\sinh_q^2(\alpha r)}, \quad (3.1)$$

où  $V_1$  et  $V_2$  sont des constantes positives telles que  $V_1 > V_2$  et  $q$  est un paramètre de déformation qui peut prendre toute valeur positive. Ce paramètre de déformation est introduit pour créer un mur impénétrable entre le mouvement de la particule et l'origine de la coordonnée. Ce mur peut être identifié avec le centre de masse de la molécule.

Une tentative de résolution de l'équation de Dirac sous la condition de la symétrie de spin  $V_q(r) = S_q(r)$  a été effectuée pour déterminer le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états  $s$  ( $l = 0$ ) par Dong et son collaborateur [69]. Cependant, les résultats obtenus sont valables seulement pour  $q \geq 1$  et  $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < \infty$ . C'est pourquoi nous allons reprendre en détail l'étude de ce potentiel dans le cadre des intégrales de chemin en considérant une particule chargée et sans spin.

Dans le second paragraphe, nous formulons l'expression de la fonction de Green dans le cas général  $V_q(r) \neq S_q(r)$  et dans la suite, ces potentiels sont supposés égaux. Dans le troisième paragraphe, nous étudions le cas où  $q \geq 1$  et  $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < \infty$ . Nous construisons la fonction de Green radiale relative à un état de moment cinétique orbital  $l$  en adoptant une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge. Nous en déduisons l'équation d'énergie et les fonctions d'onde des états liés. Dans le quatrième paragraphe, nous discutons le cas où  $0 < q < 1$ . Comme l'approximation utilisée précédemment ne convient pas, nous nous limitons à la construction de la fonction de Green associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) à partir de laquelle nous tirons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde. Dans le dernier paragraphe, nous considérons le cas où  $q = 0$  qui correspond au potentiel de Morse. L'équation d'énergie et les fonctions d'onde sont déduites du cas précédent en faisant tendre  $q \rightarrow 0$ .

## 3.2 Fonction de Green

Pour traiter le problème des états liés d'une particule en mouvement dans un potentiel vecteur  $V_q(r)$  et un potentiel scalaire  $S_q(r)$  à l'aide des intégrales de chemin de Feynman, considérons la fonction de Green qui obéit à l'équation de Klein-Gordon donnée par :

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

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

La construction de la solution de l'équation (3.2) peut être entamée en partant de la représentation intégrale de Schwinger [70] qui consiste à écrire la fonction de Green sous la forme [71, 72, 73, 74, 75] :

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

Comme les potentiels  $V_q(r)$  et  $S_q(r)$  possèdent la symétrie sphérique, la fonction de Green (3.3) peut être développée sur la base des ondes sphériques ainsi :

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

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

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda), \quad (3.5)$$

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

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) &= \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] \Lambda \left. \right\} | r', t' \rangle \\
&= \int Dr(\tau) Dt(\tau) \int \frac{DP_r(\tau) DP_0(\tau)}{(2\pi)^2} \\
&\quad \times \exp \left\{ i \int_0^\Lambda \left[ -P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r') (-P_r^2 + (P_0 - V)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S)^2 \right) \right] d\tau \right\}. \tag{3.6}
\end{aligned}$$

Sous forme discrète, ce noyau s'écrit :

$$\begin{aligned}
P_{ld}(r'', t'', r', t'; S') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n dt_n \right] \\
&\quad \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right], \tag{3.7}
\end{aligned}$$

dans lequel nous avons introduit les fonctions régulatrices  $f_L(r)$  et  $f_R(r)$  définies par Kleinert [26] ainsi :

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r), \tag{3.8}$$

où  $A_1^n$  est l'action élémentaire donnée par :

$$\begin{aligned}
A_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ -(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2 \right], \tag{3.9}
\end{aligned}$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_\tau = \frac{\Lambda}{N+1} = d\tau \quad , \quad \Delta r_n = r_n - r_{n-1}, \quad \Delta t_n = t_n - t_{n-1}. \quad (3.10)$$

Pour évaluer (3.7), nous constatons d'abord que le calcul des intégrales sur les variables  $t_n$  dans l'expression (3.7) donnent  $N$  distributions de Dirac  $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$ . En intégrant ensuite sur les variables  $(P_0)_n$ , on trouve

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots (P_0)_{N+1} = E. \quad (3.11)$$

Par conséquent, le propagateur  $P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda)$  peut se mettre sous la forme :

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; \Lambda), \quad (3.12)$$

dans laquelle le noyau  $P_l(r'', r'; \Lambda)$  est donné par :

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right], \quad (3.13)$$

avec l'action élémentaire

$$A_2^n = -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ -(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + (E - V_q(r_n))^2 - (M + S_q(r_n))^2 \right]. \quad (3.14)$$

Par substitution de l'expression du noyau (3.11) dans (3.5), nous remarquons que le terme dépendant du temps  $t$  ne contient pas la variable pseudo-temporelle  $\Lambda$ . Donc, nous pouvons récrire la fonction de Green partielle (3.5) sous la forme :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (3.15)$$

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', r'; \Lambda). \quad (3.16)$$

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

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{1}{2i\pi\varepsilon_\tau} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} A_3^n \right\}, \quad (3.17)$$

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

$$A_2^n = \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\tau} - \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ (M + S_q(r_n))^2 - (E - V_q(r_n))^2 + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right]. \quad (3.18)$$

Cette intégrale de chemin (3.17) ne peut être évaluée exactement à cause de la présence du terme potentiel centrifuge contenu dans l'expression de l'action lorsque nous nous intéressons à l'étude des ondes  $l$ . Toutefois, il est facile de montrer [76, 77] que l'expression  $\frac{1}{r_n^2} \approx \frac{4q\alpha^2 e^{2\alpha r_n}}{(e^{2\alpha r_n} - q)^2} + \frac{\alpha^2}{12}$  peut être utilisée comme une bonne approximation dans le terme centrifuge lorsque le paramètre  $q \geq 1$  et  $\alpha r \ll 1$ .

Nous allons aborder dans ce qui suit le calcul de la fonction de Green (3.16) en choisissant  $S_q(r) = V_q(r)$  et nous devons distinguer trois cas.

### 3.3 Premier cas : $q \geq 1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < +\infty$

Dans ce cas, nous allons calculer l'intégrale de chemin associée aux potentiels vecteur et scalaire identiques (3.1) seulement dans l'intervalle  $]\frac{1}{2\alpha} \ln q, +\infty[$  puisque, dans l'autre intervalle  $]0, \frac{1}{2\alpha} \ln q[$ , la solution ne peut être obtenue analytiquement et de plus, elle ne présente aucun intérêt physique notable. Afin de construire la fonction de Green radiale pour un état de moment cinétique orbital  $l$ , nous remplaçons d'abord  $\frac{1}{r^2}$  par  $\frac{4q\alpha^2 e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r} - q)^2} + \frac{\alpha^2}{12}$  comme une approximation du facteur  $\frac{1}{r^2}$  contenu dans le terme potentiel centrifuge qui apparaît dans l'expression de l'action. Compte tenu de cette approximation, la fonction de Green (3.16) se réécrit

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \exp \left[ -\frac{i}{2} \epsilon_l^2 \Lambda \right] P_{mPT}(r'', r'; \Lambda), \quad (3.19)$$

où le noyau  $P_{mPT}(r'', r'; \Lambda)$  est le propagateur associé au potentiel de Pöschl-Teller modifié déformé

$$P_{mPT}(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\epsilon_\tau}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta r_n)^2}{2\epsilon_\tau} - \frac{\epsilon_\tau}{2} \left( \frac{\eta_l^2 - \frac{1}{4}}{\sinh^2_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r_n}{2} \right)} - \frac{\nu_l^2 - \frac{1}{4}}{\cosh^2_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r_n}{2} \right)} \right) \right] \right\}, \quad (3.20)$$

avec les paramètres  $\epsilon_l$ ,  $\eta_l$  et  $\nu_l$  définis par :

$$\begin{cases} \epsilon_l = \sqrt{M^2 - E^2 + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}}, \\ \eta_l = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} - V_2 \right) + \frac{\sqrt{q}\alpha^2 l(l+1)}{4}}, \\ \nu_l = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} + V_2 \right) + \frac{\sqrt{q}\alpha^2 l(l+1)}{4}}. \end{cases} \quad (3.21)$$

En effectuant le changement de variables  $u = \frac{\alpha}{2} \left( r - \frac{1}{2\alpha} \ln q \right)$  et  $\epsilon_\sigma = \frac{\alpha^2}{4} \epsilon_\tau$ , nous pouvons mettre la fonction de Green (3.19), pour les états  $l$ , sous la forme :

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{i\alpha} \int_0^\infty d\sigma \exp \left[ i\tilde{E}_l \sigma \right] P_{mPT}(u'', u'; \sigma), \quad (3.22)$$

avec

$$\tilde{E}_l = -2\tilde{\epsilon}_l, \quad \tilde{\epsilon}_l = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E^2 + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}}, \quad (3.23)$$

et

$$\begin{aligned}
P_{mPT}(u'', u'; \sigma) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\sigma}} \prod_{n=1}^N \left[ \int du_n \right] \\
&\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta u_n)^2}{2\varepsilon_\sigma} - \frac{\varepsilon_\sigma}{2} \left( \frac{\tilde{\eta}_l^2 - \frac{1}{4}}{\sinh^2(u_n)} - \frac{\tilde{\nu}_l^2 - \frac{1}{4}}{\cosh^2(u_n)} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.24}$$

est le propagateur associé au potentiel de Pöschl-Teller où les paramètres  $\tilde{\eta}_l$  et  $\tilde{\nu}_l$  sont donnés par :

$$\begin{cases} \tilde{\eta}_l = \sqrt{\frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} - V_2 \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}, \\ \tilde{\nu}_l = \sqrt{\frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} + V_2 \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \end{cases} \tag{3.25}$$

Comme la solution exacte de la fonction de Green pour le potentiel de Pöschl-Teller est bien connue dans la littérature, nous nous contentons donc d'écrire directement le résultat [78, 79, 80] :

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r') &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}})\Gamma(L_{\tilde{E}} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{\cosh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r''}{2}\right) \cosh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r'}{2}\right)}{q^{\frac{1}{2}}} \right)^{M_1 - M_2} \\
&\times \left( \tanh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r''}{2}\right) \tanh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r'}{2}\right) \right)^{M_1 + M_2 + \frac{1}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{q^{\frac{1}{2}}}{\cosh_{\sqrt{q}}^2\left(\frac{\alpha r_{\leq}}{2}\right)} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \tanh_{\sqrt{q}}^2\left(\frac{\alpha r_{\geq}}{2}\right) \right),
\end{aligned} \tag{3.26}$$

où nous avons utilisé les notations suivantes :

$$\begin{cases} L_{\tilde{E}} = \frac{1}{2}(\tilde{\nu}_l - 1), \\ M_1 = \frac{1}{2}\tilde{\eta}_l + \tilde{\epsilon}_l, \\ M_1 = \frac{1}{2}\tilde{\eta}_l - \tilde{\epsilon}_l. \end{cases} \quad (3.27)$$

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

Les pôles de la fonction de Green correspondent aux valeurs permises de l'énergie pour les états liés de la particule. Ce sont précisément les pôles de la fonction  $\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}})$  qui s'obtiennent lorsque  $M_1 - L_{\tilde{E}} = -n_r$ , pour  $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'équation

$$\begin{aligned} M^2 - E_{n_r, l}^2 = & \alpha^2 \left[ n_r + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2(M + E_{n_r, l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} - \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2(M + E_{n_r, l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} + \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2} \right]^2 - \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

avec les fonctions d'onde données par :

$$\begin{aligned} u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) \\ &= A \left( \frac{q^{\frac{1}{4}}}{\cosh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right)} \right)^{2\tilde{\epsilon}_{n_r, l}} \left( \tanh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2} + \tilde{\eta}_{n_r, l}} \\ &\quad \times {}_2F_1 \left( -n_r, n_r + \tilde{\eta}_{n_r, l} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 1, 2\tilde{\eta}_{n_r, l} + 1; \tanh_{\sqrt{q}}^2 \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Compte tenu du lien entre les fonctions hypergéométriques et les polynômes de Jacobi (voir Ref. [54], p. 952, Eq. (8.406.1))

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1 \left( -n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-t}{2} \right), \quad (3.30)$$

les fonctions d'onde (3.29) se mettent aussi sous la forme :

$$u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = N_{n_r,l} \left( \frac{q^{\frac{1}{4}}}{\cosh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right)} \right)^{2\tilde{\epsilon}_{n_r,l}} \left( \tanh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2} + \tilde{\eta}_{n_r,l}} \\ \times P_{n_r}^{(\tilde{\eta}_{n_r,l}, 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l})} \left( 1 - 2 \tanh_{\sqrt{q}}^2 \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right), \quad (3.31)$$

où  $N_{n_r,l}$  est un facteur normalisant qui se calcule à l'aide de la condition de normalisation

$$\int_{\frac{1}{2\alpha} \ln q}^{\infty} \left| u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) \right|^2 dr = 1. \quad (3.32)$$

Tous calculs faits, on trouve

$$N_{n_r,l} = \left[ \frac{2\alpha q^{\frac{\tilde{\epsilon}_{n_r,l}}{2}} \tilde{\epsilon}_{n_r,l} n_r! \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + \tilde{\eta}_{n_r,l} + 1)}{\Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 1) \Gamma(n_r + \tilde{\eta}_{n_r,l} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.33)$$

Il est clair que la fonction d'onde (3.31) remplit la condition à la limite

$$\lim_{r \rightarrow \frac{1}{2\alpha} \ln q} u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = 0, \quad (3.34)$$

lorsque

$$\tilde{\epsilon}_{n_r,l} < 0. \quad (3.35)$$

Donc, compte tenu de (3.21) et (3.28), le nombre d'états liés est déterminé par :

$$n_{r \max} < -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} (\tilde{\nu}_{n_r,l} - \tilde{\eta}_{n_r,l}), \quad (3.36)$$

où

$$\begin{cases} \tilde{\nu}_{nr,l} = \sqrt{\frac{2(M+E_{nr,l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} - \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}, \\ \tilde{\eta}_{nr,l} = \sqrt{\frac{2(M+E_{nr,l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} + \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \end{cases} \quad (3.37)$$

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

Comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas précédent est valable seulement lorsque  $q \geq 1$  (voir thèse de Zouache [76] et Réf. [77]), nous nous plaçons donc dans le cas où le terme potentiel centrifuge est nul, c'est à dire, nous nous intéressons au problème des ondes s ( $l = 0$ ). La discussion développée ci-dessus est valable, mais dans ce cas, le changement de variables  $r \rightarrow u$  précédent transforme  $r \in \mathbb{R}^+$  en  $u \in ]-\frac{1}{4} \ln q, +\infty[$ . Ceci signifie que le noyau (3.24), pour  $l = 0$ , est le propagateur qui représente le mouvement d'une particule placée dans un potentiel du type Pöschl-Teller  $q$ -déformé défini sur la demi-droite  $u > u_0 = -\frac{1}{4} \ln q$ . Comme un calcul direct du propagateur par l'intégrale de chemin n'est pas possible, pour contourner cette difficulté formelle, le problème peut se résoudre au moyen d'une astuce qui consiste à introduire un terme potentiel auxiliaire représenté par une fonction  $\delta$  de Dirac dans l'expression de l'action contenue dans l'équation (3.24) pour former un mur impénétrable [30, 81] au point  $u = u_0 = -\frac{1}{4} \ln q$ . Alors, la fonction de Green (3.22), pour  $l = 0$ , devient

$$G_0^\delta(r'', r') = \frac{1}{i\alpha} \int_0^\infty d\sigma \exp\left(i\tilde{E}_0\sigma\right) P_{mPT}^\delta(u'', u'; \sigma), \quad (3.38)$$

où

$$\tilde{E}_0 = -\frac{2}{\alpha^2} (M^2 - E^2), \quad (3.39)$$

$$P_{mPT}^\delta(u'', u'; \sigma) = \int \mathcal{D}u(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{u}^2}{2} - V^\delta(u) \right] d\tau \right\}. \quad (3.40)$$

Cette intégrale de chemin (3.40) peut être interprétée comme étant le propagateur d'une particule soumise à un potentiel de la forme :

$$V^\delta(u) = V_{mPT}^0(u) - \lambda\delta(u - u_0). \quad (3.41)$$

où

$$V_{mPT}^0(u) = \frac{1}{2} \left( \frac{\tilde{\eta}_0^2 - \frac{1}{4}}{\sinh^2 u} - \frac{\tilde{\nu}_0^2 - \frac{1}{4}}{\cosh^2 u} \right), \quad (3.42)$$

avec

$$\begin{cases} \tilde{\eta}_0 = \sqrt{\frac{2(M+E)}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} + \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \frac{1}{4}} \\ \tilde{\nu}_0 = \sqrt{\frac{2(M+E)}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} - \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (3.43)$$

Comme il est tout fait clair, vu la forme trop compliquée du potentiel (3.41), que le calcul par l'intégrale de chemin du noyau (3.40) ne peut pas être effectué directement. Dans ce cas, il est commode d'appliquer la technique des perturbations en développant  $\exp \left[ i\lambda \int_{\tau'}^{\tau''} \delta(u - u_0) d\tau \right]$  en série de puissances. Ceci donne le développement en série suivant [21, 28, 29, 30] :

$$\begin{aligned} P_{mPT}^\delta(u'', u'; \sigma) &= P_{mPT}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\lambda)^n}{n!} \prod_{j=1}^n \left[ \int_{\tau'}^{\tau_{j+1}} d\tau_j \int_{-\infty}^{+\infty} du_j \right] \\ &P_{mPT}^0(u_1, u'; \tau_1 - \tau') \delta(u_1 - u_0) P_{mPT}^0(u_2, u_1; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\times \delta(u_{n-1} - u_0) P_{mPT}^0(u_n, u_{n-1}; \tau_n - \tau_{n-1}) \delta(u_n - u_0) \\ &\times P_{mPT}^0(u'', u_n; \tau'' - \tau_n) \\ &= P_{mPT}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\lambda)^n \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau_n \int_{\tau'}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_1 \\ &P_{mPT}^0(u_0, u'; \tau_1 - \tau') P_{mPT}^0(u_0, u_0; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\times P_{mPT}^0(u_0, u_0; \tau_n - \tau_{n-1}) P_{mPT}^0(u'', u_0; \tau'' - \tau_n), \end{aligned} \quad (3.44)$$

où nous avons ordonné le temps ainsi  $\tau' = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n < \tau_{n+1} = \tau''$  et  $\sigma = \tau'' - \tau'$ . Pour effectuer les intégrations successives sur les variables  $\tau_j$  dans l'équation (3.44), nous insérons (3.44) dans (3.38), et en utilisant le théorème de convolution de la

transformation de Fourier, il est possible d'écrire

$$G_0^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{mPT}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{mPT}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{mPT}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{mPT}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) - \frac{1}{\lambda}}, \quad (3.45)$$

expression dans laquelle  $G_{mPT}^0(u'', u'; \tilde{E}_0)$  est la fonction de Green associée au potentiel de Pöschl-Teller modifié (3.42). À la limite  $\lambda \rightarrow -\infty$ , la particule est contrainte de se déplacer dans le potentiel  $V_{mPT}^0(u)$  limité par une barrière infiniment répulsive [81, 82] localisé au point  $u = u_0$ . Dans ce cas, la fonction de Green, pour  $l = 0$ , s'écrit alors

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0) &= \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} G_0^\delta(r'', r') \\ &= G_{mPT}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{mPT}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{mPT}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{mPT}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par les pôles de l'équation (3.46), c'est à dire, par l'équation  $G_{mPT}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) = 0$ , ou encore par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{4q^{\frac{1}{2}}}{(1+q)^2}\right) = 0. \quad (3.47)$$

où

$$\begin{cases} \alpha = \tilde{\epsilon}_{n_r} + \frac{1}{2}(\tilde{\eta}_{n_r} - \tilde{\nu}_{n_r}) + \frac{1}{2}, \\ \beta = \tilde{\epsilon}_{n_r} + \frac{1}{2}(\tilde{\eta}_{n_r} + \tilde{\nu}_{n_r}) + \frac{1}{2}, \\ \gamma = 2\tilde{\epsilon}_{n_r} + 1. \end{cases} \quad (3.48)$$

Cette équation peut être résolue numériquement pour connaître les niveaux d'énergie discrets de la particule. Les fonctions d'onde correspondantes aux états liés sont données par :

$$\begin{aligned}
u_{n_r}^{0 < q^1}(r) &= N \left( \frac{q^{\frac{1}{4}}}{\cosh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r}{2}\right)} \right)^{2\tilde{\epsilon}_{n_r}} \left( \tanh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r}{2}\right) \right)^{\frac{1}{2} + \tilde{\eta}_{n_r}} \\
&\times {}_2F_1 \left( \alpha, \beta, \gamma; \frac{q^{\frac{1}{2}}}{\cosh_{\sqrt{q}}^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right)} \right), \tag{3.49}
\end{aligned}$$

où  $N$  est un facteur constant.

### 3.5 Potentiel de Morse radial

En posant  $q = 0$  dans le potentiel (3.1), nous obtenons le potentiel de Morse radial

$$V_0(r) = 4V_1e^{-2\alpha r} - 2V_2e^{-\alpha r}, \tag{3.50}$$

avec les paramètres  $V_1$  et  $V_2$  définis par  $V_1 = \frac{D_e}{4}e^{2\alpha r_e}$ ,  $V_2 = D_e e^{\alpha r_e}$  où  $D_e$  est la profondeur du puits de potentiel et  $r_e$  est la distance d'équilibre des deux noyaux de la molécule diatomique.

Dans ce cas, Il peut être vu à partir des équations (3.43) que

$$\begin{cases} \tilde{\eta}_0 \xrightarrow{q \rightarrow 0} -\frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{\alpha\sqrt{q}} \sqrt{2(M+E)V_1}, \\ \tilde{\nu}_0 \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{\alpha\sqrt{q}} \sqrt{2(M+E)V_1}. \end{cases} \tag{3.51}$$

D'autre part, en utilisant la formule [83]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1 \left( \alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta} \right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \tag{3.52}$$

il est facile de montrer qu'à la limite  $q \rightarrow 0$ , la fonction d'onde (3.48) devient

$$\begin{aligned}
u_0^{q=0}(r) &= C e^{-\tilde{\epsilon}_0 r \tilde{\epsilon}_0} \exp\left(-\frac{1}{\alpha} \sqrt{2(M+E)V_1} e^{-\alpha r}\right) \\
&\times {}_1F_1\left(\tilde{\epsilon}_0 - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{2}, 2\tilde{\epsilon}_0 + 1; \frac{4}{\alpha} \sqrt{2(M+E)V_1} e^{-\alpha r}\right).
\end{aligned} \tag{3.53}$$

et la condition de quantification transcendante déterminant les niveaux d'énergie des états liés (3.47) prend la forme :

$$\begin{aligned}
&{}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{4q^{\frac{1}{2}}}{(1+q)^2}\right) \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \\
&{}_1F_1\left(\tilde{\epsilon}_0 - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{2}, 2\tilde{\epsilon}_0 + 1; \frac{4}{\alpha} \sqrt{2(M+E)V_1}\right) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Comme  $V_1$  tend vers l'infini, à partir du comportement asymptotique de la fonction hypergéométrique [84], il s'ensuit que

$$\tilde{\epsilon}_0 - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{2} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \tag{3.55}$$

et ainsi nous obtenons l'équation d'énergie :

$$M^2 - E_{n_r}^2 = \alpha^2 \left( n_r - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E_{n_r})}{V_1}} + \frac{1}{2} \right)^2. \tag{3.56}$$

# Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement rigoureux, par la méthode des intégrales de chemin de Feynman, d'un ensemble de deux systèmes dynamiques très utiles dans plusieurs branches de la physique théorique et en chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons étudié un potentiel électrique à symétrie axiale dont la partie angulaire dépend de trois paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ . En utilisant le développement de Fourier de l'exponentielle du terme de l'action élémentaire dépendant de la variable azimutale  $\phi$ , le comportement asymptotique des fonctions de Bessel et une transformation temporelle, nous avons montré que les variables  $r$ ,  $\theta$  et  $\phi$  sont séparables. Ceci conduit au calcul explicite de la partie angulaire de la fonction de Green. La fonction de Green radiale est calculée dans les cas de l'oscillateur harmonique et du potentiel de Coulomb. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées sont obtenus respectivement à partir des pôles et des résidus de la fonction de Green radiale. Comme sous produits, nous avons retrouvé aisément les résultats concernant le potentiel de l'oscillateur en forme d'anneau et le potentiel de Hartmann.

Il faut souligner qu'en éliminant les paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , les spectres complets de l'oscillateur harmonique sphérique et d'un atome hydrogénoïde sont recouverts contrairement aux résultats obtenus à l'aide de la méthode de Nikiforov-Uvarov [49, 50] .

Dans le contexte relativiste, nous avons discuté le problème d'une particule sans spin, de masse  $M$  et de charge  $(-e)$  en présence d'un potentiel vecteur et un potentiel scalaire à symétrie sphérique qui sont égaux et du type Pöschl-Teller général déformé. Pour un paramètre de déformation  $q$  supérieur ou égal à l'unité, en remplaçant le potentiel

centrifuge par une expression approximative appropriée, la fonction de Green associée à l'onde  $l$  est construite sous forme compacte en utilisant simplement la méthode des transformations spatio-temporelles. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde sont extraits respectivement des pôles et des résidus de la fonction de Green. Pour  $0 < q < 1$ , comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas précédent n'étant plus valable, nous nous sommes limités donc à l'évaluation de la fonction de Green pour les ondes  $s$  ( $l = 0$ ). Le calcul est fait à l'aide de la méthode des perturbations pour tenir compte des conditions aux limites de Dirichlet imposées à la solution du problème. Dans ce cas, la condition de quantification de l'énergie est déterminée par une équation transcendante comprenant une fonction hypergéométrique qu'il faut résoudre numériquement pour connaître les niveaux d'énergie.

# Bibliographie

- [1] A. A. Makarov, J. A. Smorodinsky, Kh. Valiev et P. Winternitz, *Nuovo Cimento A* **52** (1967) 1061.
- [2] P. W. Higgs, *J. Phys. A : Math. Gen.* **12** (1979) 309.
- [3] Ya. A. Granovsky, A. S. Zhedanov et I. M. Lutzenko, *Theor. Math. Phys.* **91** (1992) 604.
- [4] N. Kayamata, *Nuovo Cimento B* **107** (1992) 763.
- [5] H. I. Leemon, *J. Phys. A : Math. Gen.* **12** (1979) 489.
- [6] L. Infeld, *Phys. Rev.* **59** (1941) 737..
- [7] L. Infeld et A. Schild, *Phys. Rev.* **67** (1945) 121.
- [8] A. F. Stevenson, *Phys. Rev.* **59** (1941) 842.
- [9] E. Schrodinger, *Proc. Roy. Irish Soc.* **46** (1941) 9.
- [10] E. Schrodinger, *Proc. Roy. Irish Soc.* **46** (1941) 183.
- [11] E. Schrodinger, *Proc. Roy. Irish Soc.* **47** (1941) 53.
- [12] G. A. Natanzon, *Theor. Math. Phys.* **38** (1979) 146.
- [13] G. Pöschl et E. Teller, *Z. Phys.* **83** (1933) 143.
- [14] N. Rosen et P. M. Morse, *Phys. Rev.* **42** (1932) 201.
- [15] M. F. Manning et N. Rosen, *Phys. Rev.* **44** (1933) 953.
- [16] C. Eckart, *Phys. Rev.* **35** (1930) 1303.

- [17] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. **158** (1991) 63; J. Phys. A : Math. Gen. **34** (2001) 4281.
- [18] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [19] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [20] W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. **33** (1925) 879; M. Born et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. **34** (1925) 858; M. Born, W. Heisenberg et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. **35** (1926) 557; P. M. A. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A 109** (1925) 642; P. M. A. Dirac, *The principles of quantum mechanics* (Oxford Press, London, 1958).
- [21] R. P. Feynman et A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integral* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [22] I. H. Duru et H. Kleinert, Phys. Lett. **B 84** (1979) 185.
- [23] I. H. Duru et H. Kleinert, Fortschr.Phys. **30** (1982) 401.
- [24] A. Inomata, H. Kuratsuji et C. C. Gerry, *Path integrals and coherent states of SU(2) and SU(1,1)* (World Scientific, Singapore, 1992).
- [25] D. C. Khandekar, S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, *Path integral methods and their applications* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [26] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics Polymer Physics and Financial Markets* (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).
- [27] C. Grosche et F. Steiner, *A table of Feynman path integrals* ( Springer, Berlin, 1998).
- [28] D. Bauch, Nuovo Cimento **B 85** (1985) 118.
- [29] S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Phys. Lett. **A 131** (1988) 8.
- [30] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1.
- [31] H. Hartmann, Theor. Chim. Acta **24** (1972) 201
- [32] H. Hartmann, R. Schuck et J. Radtke, Theor. Chim. Acta **42** (1976) 1.

- [33] H. Hartmann et D. Schuch, *Int. J. Quantum Chem.* **18** (1980) 125.
- [34] C. Quesne, *J. Phys.* **A 21** (1988) 3093.
- [35] M. V. Carpio et A. Inomata, in : *Path integrals from meV to MeV*, eds. M. C. Gutzwiller, A. Inomata, J. Klauder, L. Streit ( World Scientific, Singapore, 1986) 261.
- [36] I. Sokmen, *Phys. Lett.* **A 115** (1986) 249.
- [37] L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Phys. Lett.* **A 125** (1987) 277.
- [38] M. Kibler et T. Negadi, *Int. J. Quantum Chem.* **26** (1984) 405.
- [39] C. C. Gerry, *Phys. Lett.* **A 118** (1986) 445.
- [40] M. Kibler et P. Winternitz, *J. Phys.* **A : Math. Gen.** **20**(1987) 4097.
- [41] A. Guha et S. Mukherjee, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 840.
- [42] A. N. Vaidya et H. Boschi Filho, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 1951.
- [43] L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 3410.
- [44] N. W. Evans, *Phys. Lett.* **A 147** (1990) 483.
- [45] N. W. Evans, *Phys. Rev.* **A 41** (1990) 5666.
- [46] N. W. Evans, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 600.
- [47] C. Grosche, G. S. Pogosyan et A. N. Sissakian, *Fortschr. Phys.* **43** (1995) 453.
- [48] L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **42** (2001) 4684.
- [49] C. Berkdemir, *J. Math. Chem.* **46** (2009) 139.
- [50] M. C. Zhang, G. H. Sun et S. H. Dong, *Phys. Lett.* **A 374** (2010) 704.
- [51] I. H. Duru, *Phys. Rev.* **D 30** (1984) 2121.
- [52] M. Bohm et G. Junker, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 1978.
- [53] L. Chetouani, L. Guechi, M. Letlout et T. F. Hammann, *Nuovo Cimento* **B 105** (1990) 387.

- [54] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [55] B. S. Dewitt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957) ; D. W. Mc Laughlin et L. S. Schulman, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 2520.
- [56] D. Peak et A. Inomata, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1422.
- [57] M. V. Carpio-Bernido et C. C. Bernido, *Phys. Lett.* **A 134** (1989) 395.
- [58] A. A. Alhaidari, H. Bahlouli et A. Al-Hasan, *Phys. Lett.* **A 349** (2006) 87.
- [59] W. C. Qiang, *Chin. Phys.* **13** (2004) 575.
- [60] S. M. Ikhdair et R. Sever, *Cent. Eur. J. Phys.* **6** (2008) 141.
- [61] L. Z. Yi, L. Y. Liu et C. S. Jia, *Phys. Lett.* **A 333** (2004) 212.
- [62] Y. F. Diao, L. Y. Liu et C. S. Jia, *Phys. Lett.* **A 332** (2004) 157.
- [63] X. Q. Zhao, C. S. Jia et Q. B. Yang, *Phys. Lett.* **A 337** (2005) 189.
- [64] S. H. Dong et M. Lozada-Cassou, *Phys. Scr.* **74** (2006) 285.
- [65] F. Yasuk, A. Durmus et I. Boztosun, *J. Math. Phys.* **47** (2006) 082302.
- [66] L. B. Castro et A. S. de Castro, *Phys. Scr.* **75** (2007) 170.
- [67] W. C. Qiang et S. H. Dong, *Phys. Lett.* **A .372** (2008) 4789.
- [68] T. Chen, Y. F. Diao et C. S. Jia, *Phys. Scr.* **79** (2009) 065014.
- [69] G. F. Wei et S. H. Dong, *Phys. Lett.* **A 373** (2009) 2428.
- [70] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82** (1951) 664.
- [71] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **32** (1991) 441.
- [72] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **80** (1950) 440.
- [73] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* ( Wiley, New York, 1981).
- [74] B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Il Nuovo Cimento* **B 111** (1996) 99.

- [75] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, *Physica* **A 234** (1996) 529.
- [76] A. Zouache, *Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009*, Université Mentouri-Constantine.
- [77] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 032301.
- [78] C. Grosche, *Il Nuovo Cimento* **B 108** (1993) 1369.
- [79] H. Kleinert et I. Mustapic, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 643.
- [80] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38** (2005) 2947.
- [81] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, *Phys.Rev.* **D 22** (1980) 3012.
- [82] M. Carreau, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 4139; M. Carreau, E. Farhi et S. Gutmann, *Phys. Rev.* **D 42** (1990) 1194.
- [83] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [84] S. Flugge, *Practical quantum mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1974).

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Généralités sur les intégrales de chemin</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction . . . . .	5
1.2 Propagateur . . . . .	6
1.3 Intégrale de chemin dans l'espace des phases . . . . .	7
1.4 Techniques de transformations . . . . .	8
1.4.1 Transformation de coordonnées . . . . .	8
1.4.2 Reparamétrisation des chemins . . . . .	9
1.5 Méthode des perturbations . . . . .	11
<b>2 Mouvement d'une particule dans un potentiel électrique non central</b>	<b>14</b>
2.1 Introduction . . . . .	14
2.2 Fonction de Green . . . . .	16
2.3 L'oscillateur harmonique plus le potentiel $V(\theta)$ . . . . .	23
2.4 Le potentiel de Coulomb plus le potentiel $V(\theta)$ . . . . .	25
2.5 Cas particuliers . . . . .	26
2.5.1 Premier cas : l'oscillateur en forme d'anneau . . . . .	27
2.5.2 Deuxième cas : le potentiel en forme d'anneau de Hartmann . . . . .	28
2.5.3 Troisième cas : un potentiel central . . . . .	29

<b>3 Etats liés d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur plus un potentiel scalaire du type Pöschl-Teller général déformé</b>	<b>31</b>
3.1 Introduction . . . . .	31
3.2 Fonction de Green . . . . .	33
3.3 Premier cas : $q \geq 1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < +\infty$ . . . . .	36
3.4 Deuxième cas : $0 < q < 1$ et $r \in \mathbb{R}^+$ . . . . .	41
3.5 Potentiel de Morse radial . . . . .	44
<b>Conclusion</b>	<b>46</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>48</b>

# Introduction

Depuis le succès de la résolution des équations d'onde avec des potentiels simples tels que le potentiel de l'oscillateur harmonique, le potentiel de Coulomb et le potentiel de Morse dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, un développement considérable est fait dans la construction de modèles de potentiels pour décrire de façon plus réaliste des interactions nucléaires, interatomiques ou moléculaires. Comme exemple, nous pouvons citer des généralisations non centrales des potentiels de Coulomb, de l'oscillateur harmonique radial et de la barrière radiale rencontrées dans cinq classes de potentiels présentées par Makarov et ses collaborateurs [1] dans une étude systématique de systèmes non relativistes possédant des symétries dynamiques.

Toujours en rapport avec l'oscillateur harmonique et le potentiel de Coulomb, plusieurs auteurs [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] avaient discuté leur généralisation dans un espace courbe caractérisé par une courbure constante. Il faut mentionner aussi que deux larges classes de potentiels dits potentiels de Natanzon [12] généralisent les potentiels usuels à symétrie sphérique. Il y a deux types de potentiels de Natanzon qui dépendent de six paramètres indépendants ou libres : l'un confluent et l'autre hypergéométrique. Le type confluent comprend l'oscillateur harmonique radial, le potentiel de Coulomb et le potentiel de Morse radial comme des cas particuliers et le type hypergéométrique décrit à la fois le potentiel de Pöschl-Teller général [13], le potentiel de Rosen-Morse général [14], le potentiel de Manning-Rosen [15] et le potentiel de Eckart [16]. Chaque cas résulte d'une adaptation particulière des paramètres et de la fonction définie implicitement par une certaine équation différentielle.

La construction des modèles se fait non seulement par une modification des potentiels usuels, mais aussi par une déformation ayant vu le jour très récemment. Ce nouveau type de potentiels est basé sur une  $q$ -déformation des potentiels hyperboliques introduite pour la première fois par Arai [17] dans une étude d'une classe de potentiels invariants de forme effectuée dans le cadre de la supersymétrie en mécanique quantique. L'introduction du paramètre  $q$  sert comme un paramètre supplémentaire dans la description des interactions interatomiques. Dans un problème radial, le paramètre  $q$  permet, en particulier, de définir la position du centre de masse de la molécule distincte de l'origine de la coordonnée.

L'objet de ce travail concerne l'application de l'approche des intégrales de chemin à divers systèmes dynamiques intéressant la physique théorique et la chimie quantique.

Ce mémoire comporte trois chapitres. Le premier chapitre donne un exposé d'un abord très simple du formalisme et des méthodes de l'intégrale de chemin. Le second chapitre concerne l'analyse du problème d'une particule soumise à un potentiel électrique non central. Nous commençons d'abord par établir la fonction de Green associée à ce potentiel avec une dépendance radiale générale. La partie radiale de la fonction de Green est calculable explicitement pour des systèmes avec une dépendance radiale ayant la forme d'un oscillateur harmonique sphérique ou d'un potentiel de Coulomb. Nous donnons le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde dans tous les cas. Le dernier chapitre est consacré au traitement du problème des états liés d'une particule relativiste sans spin, de masse  $M$  et de charge  $(-e)$  qui se déplace sous l'effet d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire à symétrie sphérique. Ils sont égaux et du type Pöschl-Teller général dépendant d'un paramètre réel  $q$  de déformation. Le problème de la construction de la fonction de Green se présente de façon différente suivant la valeur du paramètre  $q$ . Pour  $q \geq 1$ , le calcul de la fonction de Green pour l'onde de moment cinétique orbital  $l$  est direct grâce à une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge et lorsque  $0 < q < 1$ , la fonction de Green relative aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) sera construite à l'aide de la méthode des perturbations. Dans chaque cas, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde seront déduits.

# Chapitre 1

## Généralités sur les intégrales de chemin

### 1.1 Introduction

Le formalisme des intégrales de chemin [18] est récent puisqu'il remonte à l'année 1948 en comparaison avec la mécanique ondulatoire de Schrödinger [19] et la mécanique des matrices de Heisenberg [20] qui sont deux formulations équivalentes de la mécanique quantique proposées presque simultanément entre les années 1923 et 1927. Feynman et Hibbs [21] étaient les premiers à développer les concepts physiques et mathématiques fondamentaux qui sont à la base de ce formalisme en mécanique quantique. Depuis sa formulation par Feynman jusqu'en 1978, l'approche des intégrales de chemin était limitée au calcul du propagateur pour un système quantique gouverné par un lagrangien quadratique. Le traitement exact de l'atome d'hydrogène en 1979 au moyen d'une reparamétrisation des chemins [22, 23] avait été un succès remarquable et un tournant décisif dans le développement de ce formalisme. Depuis cette date, de nombreux exemples de problèmes avaient été résolus dans ce cadre à l'aide de transformations spatiales et temporelles de plus en plus compliquées [24, 25, 26, 27] .

Ce chapitre est consacré aux notions élémentaires concernant les intégrales de chemin.

La définition du propagateur sous forme discrète est exposée dans le paragraphe 2 et l'intégrale de chemin dans l'espace des phases dans le paragraphe 3. La technique de transformation temporelle dite couramment reparamétrisation des chemins est rappelée dans le paragraphe 4. Le cinquième et dernier paragraphe est destiné à une présentation succincte de la méthode des perturbations appliquée à un problème avec des conditions aux limites de Dirichlet.

## 1.2 Propagateur

Dans l'espace-temps, une particule est repérée par les coordonnées  $(x_a, t_a)$  et  $(x_b, t_b)$  avec  $A$  comme point de départ et  $B$  le point d'arrivée. La fonction d'onde  $\Psi(x_a, t_a)$  étant l'amplitude de probabilité de trouver la particule à l'instant  $t_a$  au point  $x_a$  et  $\Psi(x_b, t_b)$  est celle de la trouver au point  $x_b$  à l'instant  $t_b$ . Le lien entre ces deux amplitudes se fait grâce au propagateur puisque l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point  $B(x_b, t_b)$  s'obtient en effectuant la somme ou l'intégrale sur toutes les amplitudes de coordonnées  $(x_a, t_a)$ ,  $(x'_a, t_a)$ ,  $(x''_a, t_a)$  ..., situées dans l'espace-temps sur la surface  $t = t_a$ , multipliée par la probabilité de transition entre  $A$  et  $B$  appelée propagateur. On écrit donc

$$\Psi(x_b, t_b) = \int K(x_b, t_b; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a. \quad (1.1)$$

$K(x_b, t_b; x_a, t_a)$  étant le propagateur défini par Feynman et Hibbs [21] comme suit :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\}, \quad (1.2)$$

où  $S[x(t)]$  est l'action classique

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt, \quad (1.3)$$

avec le lagrangien  $L(x, \dot{x}, t)$  pour la particule donné par :

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (1.4)$$

En subdivisant l'intervalle de temps  $[t_a, t_b]$  en  $(N + 1)$  intervalles élémentaires égaux tels que  $\varepsilon = t_n - t_{n-1} = \frac{t_b - t_a}{N+1}$ , et en utilisant les notations habituelles  $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$ ,  $\tilde{x}_n = \frac{x_n + x_{n-1}}{2}$ ,  $x_b = x(t_{N+1})$  et  $x_a = x(t_0)$ , l'expression du propagateur (1.2) se met sous la forme discrète suivante :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} A_n \right\}, \quad (1.5)$$

avec l'action élémentaire

$$A_n = \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta x_n)^2 - \varepsilon V(\tilde{x}_n). \quad (1.6)$$

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

Considérons le propagateur infinitésimal

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) = \langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H} | x_{n-1} \rangle. \quad (1.7)$$

À  $\varepsilon = t_n - t_{n-1} \rightarrow \infty$ , il s'écrit

$$\langle x_n | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H} | x_{n-1} \rangle \simeq \langle x_n | x_{n-1} \rangle - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \langle x_n | H | x_{n-1} \rangle. \quad (1.8)$$

En tenant compte de la relation

$$\langle x_n | x_{n-1} \rangle = \delta(x_n - x_{n-1}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_{x_n} e^{\frac{i}{\hbar} p_{x_n} (x_n - x_{n-1})}, \quad (1.9)$$

nous aurons

$$K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_{x_n}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [p_{x_n}(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon H] \right\}. \quad (1.10)$$

Par conséquent le propagateur s'écrit dans l'espace des phases

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_{x_n}}{2\pi\hbar} \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ p_{x_n} \Delta x_n - \varepsilon \left( \frac{p_{x_n}^2}{2M} - V(\tilde{x}_n) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

## 1.4 Techniques de transformations

### 1.4.1 Transformation de coordonnées

Pour simplifier parfois le calcul de l'intégrale de chemin, il est nécessaire d'effectuer un changement de variables qui n'est pas aussi évident comme dans le cas d'une équation différentielle. Si nous faisons le changement de variable  $x \rightarrow q$ , défini par :

$$x = h(q), \quad (1.12)$$

le lagrangien (1.4) devient

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{M}{2} [h'(q)]^2 \dot{q}^2 - V(q), \quad (1.13)$$

où  $h'(q) = \frac{dh(q)}{dq}$ .

Afin d'appliquer la transformation spatiale (1.12) à l'expression de l'action élémentaire (1.6), nous écrivons

$$x_n = h(q_n), \quad (1.14)$$

et en adoptant un développement limité autour du point moyen  $\tilde{q}_n = \frac{q_n + q_{n-1}}{2}$ , un calcul simple montre que

$$(\Delta x_n)^2 \approx [h'(\tilde{q}_n)]^2 (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{12} h'(\tilde{q}_n) h'''(\tilde{q}_n) (\Delta q_n)^4. \quad (1.15)$$

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

$$A_n = \frac{M}{2\varepsilon} \left( [h'(\tilde{q}_n)]^2 (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{12} h'(\tilde{q}_n) h'''(\tilde{q}_n) (\Delta q_n)^4 \right) - \varepsilon V(\tilde{q}_n). \quad (1.16)$$

Notons que la transformation spatiale (1.12) simplifie l'expression du potentiel, mais le terme énergie cinétique devient explicitement dépendant de la nouvelle variable  $q$ .

### 1.4.2 Reparamétrisation des chemins

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

$$\frac{dt}{ds} = h'^2(q), \quad (1.17)$$

où  $s$  est le nouveau paramètre temporel. Sous forme discrète, la définition symétrique de cette transformation s'écrit

$$\begin{aligned} \varepsilon &= h'(q_n) h'(q_{n-1}) \sigma_n \\ &\simeq h'^2(\tilde{q}_n) \left[ 1 + \frac{(\Delta q_n)^2}{4} \left( \frac{h'''(\tilde{q}_n)}{h'(\tilde{q}_n)} - \frac{h''^2(\tilde{q}_n)}{h'^2(\tilde{q}_n)} \right) \right] \sigma_n. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Comme  $\sigma_n$  dépend explicitement du chemin, nous devons insérer la contrainte

$$h'(q_a) h'(q_b) \int_0^\infty \delta \left( T - \int_0^S h'^2(q) ds \right) dS = 1. \quad (1.19)$$

En appliquant les transformations (1.12), (1.17), suivies de l'introduction de la contrainte (1.19) dans l'expression du propagateur (1.5) et en exprimant la fonction delta de Dirac comme une transformée de Fourier, nous sommes amenés à calculer la fonction de Green

$$\begin{aligned} G(x_b, x_a; E) &= \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} ET\right) K(x_b, t_b; x_a, t_a) \\ &= [h'(q_a)h'(q_b)]^{\frac{1}{2}} \int_0^S P(q_b, q_a; S) dS, \end{aligned} \quad (1.20)$$

où le noyau  $P(q_b, q_a; S)$  est donné par

$$P(q_b, q_a; S) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_n}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dq_n \right] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \tilde{A}_n \right\}, \quad (1.21)$$

avec

$$\tilde{A}_n = \frac{M}{2\sigma_n} (\Delta q_n)^2 - \sigma_n h'^2(\tilde{q}_n) (V(\tilde{q}_n) - E) + \left( \frac{h'''(\tilde{q}_n)}{h'(\tilde{q}_n)} - \frac{2 h''^2(\tilde{q}_n)}{3 h'^2(\tilde{q}_n)} \right) \frac{(\Delta q_n)^4}{8\sigma_n}. \quad (1.22)$$

Notons que le terme en  $(\Delta q_n)^4$  contenu dans l'expression de l'action peut être remplacé par une correction quantique en utilisant l'identité

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp\left(-\frac{\alpha}{\sigma} x^2\right) dx = \frac{3}{4} \frac{\alpha^2}{\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\alpha}{\sigma} x^2\right) dx. \quad (1.23)$$

L'intégrale de chemin (1.21) devient alors

$$\begin{aligned} P(q_b, q_a; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_n}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dq_n \right] \\ &\times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{M}{2\sigma_n} (\Delta q_n)^2 - \sigma_n h'^2(\tilde{q}_n) (V(\tilde{q}_n) - E) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{3\hbar^2}{8M} \sigma_n \left( \frac{h'''(\tilde{q}_n)}{h'(\tilde{q}_n)} - \frac{2 h''^2(\tilde{q}_n)}{3 h'^2(\tilde{q}_n)} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

La fonction de Green (1.20) peut être évaluée exactement lorsque le potentiel  $V$  et la transformation spatiale sont connus.

## 1.5 Méthode des perturbations

En mécanique quantique standard qui s'appuie sur la formulation de Schrödinger ou sur celle de Heisenberg, la méthode des perturbations est couramment utilisée dans la résolution de la plupart des problèmes. Cependant, cette méthode peut être également employée dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin de Feynman de façon très simple et avec une grande efficacité. Nous allons présenter ici un rappel concernant cette technique qui sera utilisée dans le dernier chapitre. Pour cela, considérons un potentiel  $W(x) = V(x) + \tilde{V}(x)$  trop compliqué et ne se laissant pas traiter directement par l'intégrale de chemin et tel que  $V(x)$  est un potentiel pour lequel l'intégrale de chemin est supposée connue et donnée par :

$$K^{(V)}(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\}. \quad (1.25)$$

Le propagateur

$$K(x'', x'; T) = \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - W(x) \right] dt \right\} \quad (1.26)$$

associé au potentiel  $W(x)$  s'écrit

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x) - \tilde{V}(x) \right] dt \right\} \\
&= \int_{x(t')=x'}^{x(t'')=x''} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \left[ \frac{M}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\} \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \tilde{V}(x) dt \right\} \tag{1.27}
\end{aligned}$$

En développant en série de puissances le terme contenant  $\tilde{V}(x)$  de l'intégrale de chemin et en considérant  $V(x)$  comme une perturbation, nous aurons

$$\begin{aligned}
K(x'', x'; T) &= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \int_{t'}^{t''} dt_j \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; T) \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; T - t_n) \\
&= K^{(V)}(x'', x'; T) + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \int_{t'}^{t_{j+1}} dt_j \int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \\
&\quad \times K^{(V)}(x_1, x'; t_1 - t') \tilde{V}(x_1) K^{(V)}(x_2, x_1; t_2 - t_1) \times \dots \\
&\quad \dots \times \tilde{V}(x_{n-1}) K^{(V)}(x_n, x_{n-1}; t_n - t_{n-1}) \tilde{V}(x_n) K^{(V)}(x'', x_n; t'' - t_n), \tag{1.28}
\end{aligned}$$

où nous avons ordonné les variables temporelles de la manière suivante [28, 29, 30] :  $t' = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n+1} = t''$  et où nous avons posé  $T = t'' - t'$ .

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

$$\begin{cases} G(x'', x'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(i\frac{ET}{\hbar}\right) K(x'', x'; T), \\ G^{(V)}(x'', x'; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(i\frac{ET}{\hbar}\right) K^{(V)}(x'', x'; T) \end{cases} \quad (1.29)$$

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

$$\tilde{V}(x) = -\alpha\delta(x - a), \quad (1.30)$$

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

$$G^{(\delta)}(x'', x'; E) = G^{(V)}(x'', x'; E) - \frac{G^{(V)}(x'', a; E) G^{(V)}(a, x'; E)}{G^{(V)}(a, a; E) - \frac{1}{\alpha}}, \quad (1.31)$$

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

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

$$G^{(V)}(a, a; E_n^{(\delta)}) = \frac{1}{\alpha} \quad (1.32)$$

qui est en général une équation transcendante.

# Chapitre 2

## Mouvement d'une particule dans un potentiel électrique non central

### 2.1 Introduction

Les généralisations non centrales des potentiels de Coulomb, de l'oscillateur harmonique et de la barrière radiale dans un espace à trois dimensions sont très utiles pour la description des systèmes à symétrie non sphérique en physique quantique et en chimie. Comme exemple, nous pouvons citer deux potentiels à symétrie axiale. Le premier exemple est le potentiel en forme d'anneau proposé par Hartmann en 1972 et le deuxième par Quesne en 1988, utilisés comme modèles pour décrire les molécules en forme d'anneau [31, 32, 33, 34]. Les potentiels de Hartmann et de Quesne ont été étudiés en utilisant des approches variées telles que la technique des intégrales de chemin [35, 36, 37] et la méthode algébrique [38, 39, 40, 41, 42, 43]. Ces deux modèles possèdent des caractéristiques analytiques qui appartiennent à un ensemble de potentiels à trois dimensions étudiés par Smorodinsky, Winternitz et leurs collaborateurs [1] et qui étaient réexaminés en 1990 par Evans [44, 45, 46]. Il présenta une liste détaillée de ces potentiels de Smorodinsky-Winternitz comprenant les intégrales premières correspondantes et tous les systèmes de

coordonnées dans lesquels la séparation des variables est possible. En outre, la méthode des intégrales de chemin et l'approche algébrique  $so(2,1)$  ont aussi été utilisées dans le traitement quantique de ces potentiels [47, 48].

L'oscillateur harmonique, le potentiel de Coulomb et les potentiels en forme d'anneau sont des cas particuliers du potentiel électrique non central qui peut être donné comme suit :

$$V(r, \theta) = V(r) + \frac{1}{r^2}V(\theta), \quad (2.1)$$

où  $V(r)$  est un potentiel radial et la partie dépendant de  $\theta$  est définie par :

$$V(\theta) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\gamma + \beta \sin^2 \theta + \alpha \sin^4 \theta}{\sin^2 \theta \cos^2 \theta}, \quad (2.2)$$

où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont des constantes réelles. Sans perte de généralité, notons que nous pouvons faire le changement de variable  $\theta \rightarrow (\theta/2)$  dans  $V(\theta)$ . Le potentiel défini par l'expression (2.1) peut être ajouté à la liste des potentiels de Smorodinsky-Winternitz admettant des solutions exactes de l'équation de Schrödinger. Comme les potentiels en forme d'anneau,  $V(r, \theta)$  joue un rôle important dans toutes les situations où la symétrie axiale est présente. Par exemple, il est d'un grand intérêt pour l'étude des états de rotation-vibration des molécules diatomiques.

Récemment, ce potentiel [49] et le potentiel en forme d'anneau de l'oscillateur harmonique à trois dimensions [50] ont été traités à travers la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cadre de la méthode de Nikiforov-Uvarov, mais les coefficients  $A$ ,  $B$  et  $L$  dans la référence [49] et  $\tilde{a}$ ,  $\tilde{b}$  et  $\Lambda$  dans la référence [50] n'ont pas été donnés correctement. Lorsque  $V(\theta) = 0$ , il est clair que leurs solutions ne sont pas valables pour tous les états, c'est à dire, pour un nombre quantique orbital  $l = 0$ , puisque selon leurs travaux, les valeurs de  $l$  sont définies comme  $l = 1 + 2\nu + |m|$ , ( $\nu, |m| \in \mathbb{N}$ ) dans la référence [49] et  $l = 1 + 2n_r + |m|$ , ( $n_r, |m| \in \mathbb{N}$ ) dans la référence [50]. Nous pensons donc qu'une étude plus rigoureuse du potentiel composé décrit par l'expression (2.1) mérite d'être entreprise

en utilisant l'approche des intégrales de chemin.

Dans le second paragraphe, nous construirons la fonction de Green pour le potentiel (2.1) avec une dépendance radiale générale  $V(r)$  par intégration des chemins. Après avoir séparé et effectué l'intégration sur les variables angulaires  $\phi_j$ , il est montré que la partie en  $(r, \theta)$  peut se décomposer en deux noyaux indépendants, l'une associée à la variable radiale et l'autre à la variable polaire grâce à la procédure de reparamétrisation des chemins. La partie angulaire est ramenée au propagateur relatif au potentiel de Pöschl-Teller étudié depuis quelques années par plusieurs auteurs [51, 52, 53]. Dans le troisième paragraphe, nous considérons le cas où le potentiel radial est celui de l'oscillateur harmonique. Le spectre d'énergie ainsi que les fonctions d'onde des états liés sont calculés. Dans le quatrième paragraphe, le cas où la dépendance radiale de (2.1) est un potentiel de Coulomb attractif sera discuté. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées sont aussi trouvés. L'oscillateur en forme d'anneau et le potentiel en forme d'anneau de Hartmann sont étudiés comme des cas particuliers dans le dernier paragraphe.

## 2.2 Fonction de Green

En coordonnées sphériques, le propagateur de Feynman associé au potentiel (2.1) s'écrit sous forme discrète :

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}'' , \vec{r}' ; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left( \frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}N} \prod_{j=1}^{N-1} r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n \\
 &\times \exp \left( \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N S(n, n-1) \right), \tag{2.3}
 \end{aligned}$$

où

$$S(n, n-1) = \frac{\mu}{2\varepsilon} [r_n^2 + r_{n-1}^2 - 2r_n r_{n-1} (\cos \theta_n \cos \theta_{n-1} + \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \cos(\Delta \phi_n))] - \varepsilon \left( V(\tilde{r}_n) + \frac{1}{\tilde{r}_n^2} V(\tilde{\theta}_n) \right) \quad (2.4)$$

représente l'action dans l'intervalle élémentaire  $[t_{n-1}, t_n]$ , avec les notations habituelles  $\varepsilon = t_n - t_{n-1}$ ,  $T = N\varepsilon = t'' - t'$ ,  $\vec{r}'' = \vec{r}(t'')$ ,  $\vec{r}' = \vec{r}(t')$ , et pour toute variable  $u$  :  $u_n = u(t_n)$ ,  $\tilde{u}_n = (u_n + u_{n-1})/2$ ,  $\Delta u_n = u_n - u_{n-1}$ .

Nous nous occupons d'abord de la séparation de la partie dépendante de la variable angulaire azimutale  $\phi$  dans l'intégrale de chemin. Pour faire cela, nous utilisons le développement de Fourier (voir Ref. [54], p. 973, Eq. (8.511.4))

$$\exp [z \cos(\Delta \phi)] = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} I_m(z) \exp [im(\Delta \phi)], \quad (2.5)$$

et le comportement asymptotique (voir Ref. [54], p. 961, Eq. (8.451)) de la fonction de Bessel modifiée, pour  $\varepsilon$  petit :

$$I_m\left(\frac{u}{\varepsilon}\right) \approx \left(\frac{\varepsilon}{2\pi v}\right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[ \frac{u}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon}{2u} \left( m^2 - \frac{1}{4} \right) \right]. \quad (2.6)$$

En effectuant le calcul des intégrales sur les variables angulaires  $\phi_n$ , le propagateur se décomposera alors en noyaux partiels ainsi :

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'; T) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp [im(\phi'' - \phi')]}{2\pi} K_m(r'', \theta'', r', \theta'; T), \quad (2.7)$$

où

$$K_m(r'', \theta'', r', \theta'; T) = \frac{1}{[r''^2 r'^2 \sin \theta'' \sin \theta']^{\frac{1}{2}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \varepsilon} \right)^N \prod_{j=1}^N (r_n r_{n-1})^{\frac{1}{2}} \times \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N A(n, n-1) \right\}, \quad (2.8)$$

avec

$$\begin{aligned}
A(n, n-1) &= \frac{\mu}{2\varepsilon} \left[ (\Delta r_n)^2 + 4r_n r_{n-1} \sin^2 \left( \frac{\Delta \theta_n}{2} \right) \right] + \varepsilon \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu \tilde{r}_n^2} - V(\tilde{r}_n) \right) \\
&\quad - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu \tilde{r}_n^2} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right). \tag{2.9}
\end{aligned}$$

Symétrisons l'expression (2.8) par rapport au point moyen de l'intervalle temporel élémentaire  $[t_{n-1}, t_n]$  et développons la mesure jusqu'à l'ordre 2 en  $\Delta r_n$ ,

$$\prod_{n=1}^N (r_n r_{n-1})^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \approx \prod_{n=1}^N \tilde{r}_n \left( 1 - \frac{(\Delta r_n)^2}{8\tilde{r}_n^2} \right) \prod_{j=1}^{N-1} dr_n d\theta_n, \tag{2.10}$$

et l'action  $A(n, n-1)$  jusqu'à l'ordre 4 in  $\Delta u_n$ ,

$$\begin{aligned}
A(n, n-1) &\approx \frac{\mu}{2\varepsilon} [(\Delta r_n)^2 + \tilde{r}_n^2 (\Delta \theta_n)^2] \\
&\quad - \frac{\mu}{8\varepsilon} \left( (\Delta r_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 + \tilde{r}_n^2 \frac{(\Delta \theta_n)^4}{3} \right) + \varepsilon \left( \frac{\hbar^2 \alpha}{2\mu \tilde{r}_n^2} - V(\tilde{r}_n) \right) \\
&\quad - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu \tilde{r}_n^2} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right). \tag{2.11}
\end{aligned}$$

Ensuite, à l'aide de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [55], introduisons une correction purement quantique en effectuant les substitutions suivantes :

$$(\Delta r_n)^2 \rightarrow \frac{i\hbar\varepsilon}{\mu}; (\Delta r_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 \rightarrow \frac{1}{\tilde{r}_n^2} \left( \frac{i\hbar\varepsilon}{\mu} \right)^2; (\Delta \theta_n)^4 \rightarrow \frac{3}{\tilde{r}_n^4} \left( \frac{i\hbar\varepsilon}{\mu} \right)^2. \tag{2.12}$$

Le noyau partiel (2.8) devient alors

$$\begin{aligned}
K_m(r'', \theta'', r', \theta'; T) &= \frac{1}{[r''^2 r'^2 \sin \theta'' \sin \theta']^{\frac{1}{2}}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \varepsilon} \right)^N \prod_{j=1}^N \tilde{r}_n \\
&\quad \times \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{A}(n, n-1) \right\}, \tag{2.13}
\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{A}(n, n-1) \approx & \frac{\mu}{2\varepsilon} [(\Delta r_n)^2 + \tilde{r}_n^2 (\Delta \theta_n)^2] + \varepsilon \left[ \frac{\hbar^2}{2\mu\tilde{r}_n^2} \left( \alpha + \frac{1}{4} \right) - V(\tilde{r}_n) \right] \\ & - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8\mu\tilde{r}_n^2} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right). \end{aligned} \quad (2.14)$$

A ce niveau, nous remarquons que les variables radiale et angulaire  $r_n$  et  $\theta_n$  ne sont pas séparées. Pour effectuer leur séparation, introduisons d'abord l'énergie  $E$  en passant à la fonction de Green (transformée de Fourier du propagateur) :

$$G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) = \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{i}{\hbar} ET \right] K(\vec{r}'', \vec{r}'; T), \quad (2.15)$$

et appliquons ensuite la technique de reparamétrisation des chemins [22, 23], en effectuant la transformation temporelle  $t \rightarrow s$  définie par :

$$\frac{dt}{ds} = r^2(s), \quad (2.16)$$

ou, sous forme discrète

$$\varepsilon = \sigma_n r_n r_{n-1} = \sigma_n \tilde{r}_n^2 \left( 1 - \frac{(\Delta r_n)^2}{4\tilde{r}_n^2} \right); \quad \sigma_n = s_n - s_{n-1}. \quad (2.17)$$

En tenant compte de la contrainte

$$T = \int_0^S r^2(s) ds, \quad (2.18)$$

la fonction de Green (2.15) se réécrit ainsi :

$$G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(im(\phi'' - \phi'))}{2\pi} \int_0^\infty dS P_E^m(r'', \theta'', r', \theta'; S), \quad (2.19)$$

où

$$\begin{aligned}
P_E^m(r'', \theta'', r', \theta'; S) &= \frac{1}{\sqrt{\sin \theta'' \sin \theta'}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \sigma_n} \right) \frac{1}{\tilde{r}_j} \left( 1 + \frac{(\Delta r_n)^2}{4\tilde{r}_n^2} \right) \prod_{n=1}^{N-1} dr_n d\theta_n \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{\mu}{2\sigma_n} \left( 1 + \frac{(\Delta r_n)^2}{4\tilde{r}_n^2} \right) \left( \frac{(\Delta r_n)^2}{\tilde{r}_n^2} + (\Delta \theta_n)^2 \right) \right. \right. \\
&+ \sigma_n \left[ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \alpha + \frac{1}{4} \right) - \tilde{r}_n^2 (V(\tilde{r}_n) - E) \right] \\
&\left. \left. - \frac{\hbar^2 \sigma_n}{8\mu} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{2.20}$$

est le nouveau noyau.

Remplaçons les termes d'ordre 2 et 4 contenus dans la mesure et dans l'action, en utilisant une nouvelle fois la procédure de Mc Laughlin et Schulman

$$(\Delta r_n)^2 \rightarrow \tilde{r}_n^2 \left( \frac{i\hbar\sigma_n}{\mu} \right); (\Delta r_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 \rightarrow \tilde{r}_n^2 \left( \frac{i\hbar\sigma_n}{\mu} \right)^2; (\Delta r_n)^4 \rightarrow 3\tilde{r}_n^4 \left( \frac{i\hbar\sigma_n}{\mu} \right)^2. \tag{2.21}$$

Ceci conduit à une correction purement quantique  $\left(-\frac{\hbar^2}{4\mu}\sigma_n\right)$ . Par conséquent, l'expression (2.20) admet une séparation des variables  $r_n$  et  $\theta_n$  et se décompose en un produit d'un noyau radial et d'un noyau angulaire

$$P_E^m(r'', \theta'', r', \theta'; S) = P_E^m(r'', r'; S) P_E^m(\theta'', \theta'; S), \tag{2.22}$$

avec

$$\begin{aligned}
P_E^m(r'', r'; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left( \frac{\mu}{2i\pi \hbar \sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\tilde{r}_n} \prod_{n=1}^{N-1} dr_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\mu}{2\sigma_n} \frac{(\Delta r_n)^2}{\tilde{r}_n^2} \right. \right. \\
&\left. \left. + \sigma_n \tilde{r}_n^2 (E - V(\tilde{r}_n)) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \alpha - \frac{1}{4} \right) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{2.23}$$

et

$$\begin{aligned}
P_E^m(\theta'', \theta'; S) &= [\sin \theta'' \sin \theta']^{-\frac{1}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \left( \frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_n \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\mu}{2\sigma_n} (\Delta\theta_n)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \sigma_n \frac{\hbar^2}{8\mu} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{2} [\sin \theta'' \sin \theta']^{-\frac{1}{2}} K^{(PT)}(\theta'', \theta'; S)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

où  $K^{(PT)}(\theta'', \theta'; S)$  peut être identifié avec le propagateur relatif à une particule de masse  $M = 4\mu$  placée dans le potentiel de Pöschl-Teller. Ce propagateur a été évalué par l'approche de l'intégration des chemins sur la variété du groupe  $SU(2)$ . Sa solution est de la forme [51, 52, 53] :

$$\begin{aligned}
K^{(PT)}(\theta'', \theta'; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_n} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} d\left(\frac{\theta_n}{2}\right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2\sigma_n} \left( \frac{\Delta\theta_n}{2} \right)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \sigma_n \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{4\gamma + m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2(\tilde{\theta}_n/2)} + \frac{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2(\tilde{\theta}_n/2)} \right) \right] \right\} \\
&= \sum_{\nu=0}^{+\infty} \exp \left[ -i \frac{\hbar}{2M} (2\nu + \kappa + \lambda + 1)^2 S \right] \Psi_\nu^{PT}(\theta'') \Psi_\nu^{PT*}(\theta'),
\end{aligned} \tag{2.25}$$

où

$$\kappa = \sqrt{4\gamma + m^2}, \quad \lambda = \sqrt{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2}, \tag{2.26}$$

et les fonctions d'onde sont données par :

$$\begin{aligned} \Psi_\nu^{PT}(\theta) &= \left[ 2(2\nu + \kappa + \lambda + 1) \frac{\nu! \Gamma((\nu + \kappa + \lambda + 1))}{\Gamma((\nu + \kappa + 1)) \Gamma((\nu + \lambda + 1))} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^{\kappa + \frac{1}{2}} \left( \frac{\theta}{2} \right) \\ &\times \cos^{\lambda + \frac{1}{2}} \left( \frac{\theta}{2} \right) P_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\cos \theta). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Ici les  $P_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\cos \theta)$  denotent des polynômes de Jacobi.

Nous insérons ensuite les équations (2.27), (2.25), (2.24), (2.23) et (2.22) dans (2.19) et nous revenons à l'ancienne variable temporelle  $t$  en utilisant la transformation inverse  $s \rightarrow t$  définie par  $ds/dt = r^{-2}(t)$ . En tenant compte de la correction purement quantique calculée suivant la procédure de Mc Laughlin et Schulman, la fonction de Green (2.19) devient alors

$$G(\vec{r}'' , \vec{r}' ; E) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \Phi_m(\phi'') \Phi_m^*(\phi') \Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\theta'') \Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)*}(\theta') G_{m, \nu}(r'', r' ; E), \quad (2.28)$$

où les fonctions d'onde  $\Phi_m(\phi)$  and  $\Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\theta)$ , convenablement normalisées, sont

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.29)$$

et

$$\begin{aligned} \Phi_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\theta) &= \left[ \left( \nu + \frac{\kappa + \lambda + 1}{2} \right) \frac{\nu! \Gamma((\nu + \kappa + \lambda + 1))}{\Gamma((\nu + \kappa + 1)) \Gamma((\nu + \lambda + 1))} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^\kappa \left( \frac{\theta}{2} \right) \\ &\times \cos^\lambda \left( \frac{\theta}{2} \right) P_\nu^{(\kappa, \lambda)}(\cos \theta), \end{aligned} \quad (2.30)$$

et

$$G_{m, \nu}(r'', r' ; E) = \frac{1}{r'' r'} \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{iET}{\hbar} \right] \int Dr(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(r, \dot{r}) dt \right\} \quad (2.31)$$

est la fonction de Green radiale avec le Lagrangien radial effectif donné par :

$$L(r, \dot{r}) = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{L}{r^2} - V(r). \quad (2.32)$$

Ici, la constante  $L$  est définie par :

$$L = \frac{1}{4} \left( 2\nu + \sqrt{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2} + \sqrt{4\gamma + m^2} + 1 \right)^2 - \alpha - \frac{1}{4}. \quad (2.33)$$

L'expression (2.31) peut être évaluée lorsque le potentiel  $V(r)$  est précisé. Notons que les fonctions d'onde normalisées données par l'équation (2.30) et les constantes (2.26) et (2.33) sont différentes de celles de la référence [49] .

## 2.3 L'oscillateur harmonique plus le potentiel $V(\theta)$

Lorsque  $V(r)$  est pris comme étant le potentiel de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2, \quad (2.34)$$

la fonction de Green radiale (2.31) prend la forme de la fonction de Green radiale de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions plus une barrière centrifuge qui a été calculée depuis longtemps [56] . Le résultat de ce calcul est

$$\begin{aligned} G_{m,\nu}(r'', r'; E) &= \frac{\mu\omega}{i\hbar\sqrt{r''r'}} \int_0^\infty dT \frac{\exp\left[\frac{iET}{\hbar}\right]}{\sin(\omega T)} I_{\sqrt{L+\frac{1}{4}}} \left( \frac{\mu\omega r''r'}{i\hbar \sin(\omega T)} \right) \\ &\times \exp\left[ \frac{i\mu\omega}{2\hbar} (r''^2 + r'^2) \cot(\omega T) \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Grâce à la formule [54] ,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty dq \frac{\exp(-2pq)}{\sinh q} \exp\left[-\frac{1}{2}(x+y)\coth q\right] I_{2\gamma}\left(\frac{\sqrt{xy}}{\sinh q}\right) \\ &= \frac{\Gamma\left(p+\gamma+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{xy}\Gamma(2\gamma+1)} M_{-p,\gamma}(x) W_{-p,\gamma}(y), \end{aligned} \quad (2.36)$$

qui est valable pour  $\text{Re}(p+\gamma+\frac{1}{2}) > 0$ ,  $\text{Re}(\gamma) > 0$  et  $y > x$ , l'expression intégrée de la fonction de Green (2.35) pour  $r'' > r'$ , prend la forme compacte suivante :

$$\begin{aligned} G_{m,\nu}(r'', r'; E) &= \frac{1}{i\omega (r''r')^{\frac{3}{2}}} \frac{\Gamma\left(p+\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\sqrt{L+\frac{1}{4}}+1\right)} \\ &\quad \times M_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right) W_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r''^2\right), \quad r'' > r' \end{aligned} \quad (2.37)$$

où  $M_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right)$  et  $W_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r''^2\right)$  sont des fonctions de Whittaker standard et  $p = -E/2\hbar\omega$ .

Le spectre d'énergie des états liés peut être déduit à partir des pôles de la fonction de Green radiale qui se produisent lorsque l'argument de la fonction  $\Gamma\left(p+\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}+\frac{1}{2}\right)$  est un nombre entier négatif ou égal à zéro, c'est à dire, lorsque  $p+\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}+\frac{1}{2} = -n_r$ , pour  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . Les niveaux d'énergie sont alors donnés par :

$$E_{n_r,\nu,m} = \hbar\omega \left(2n_r + \sqrt{L+\frac{1}{4}}+1\right). \quad (2.38)$$

Aux pôles, les fonctions de Whittaker peuvent être exprimées en termes des fonctions hypergéométriques confluentes comme suit (voir Ref. [54], p. 1059, formules (9.220.2) et (9.220.4) ) :

$$M_{-p,\frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right) = e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r'^2} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right)^{\frac{1+\sqrt{L+\frac{1}{4}}}{2}} {}_1F_1\left(-n_r, 1+\sqrt{L+\frac{1}{4}}; \frac{\mu\omega}{\hbar}r'^2\right), \quad (2.39)$$

$$W_{-p, \frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r''^2 \right) = (-1)^{n_r} \frac{\Gamma \left( n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)}{\Gamma \left( \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)} M_{-p, \frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r''^2 \right). \quad (2.40)$$

D'où, nous avons près des pôles,

$$G_{n_r, \nu, m}(r'', r'; E) \sim \frac{i\hbar}{E - E_{n_r, \nu, m}} R_{n_r, \nu, m}(r'') R_{n_r, \nu, m}(r'), \quad (2.41)$$

avec les fonctions d'onde normalisées

$$\begin{aligned} R_{n_r, \nu, m}(r) &= \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left[ \frac{2\Gamma \left( n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)}{n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma \left( \sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1 \right)} \\ &\times \exp \left( -\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2 \right) \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right)^{-\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{L+\frac{1}{4}}} {}_1F_1 \left( -n_r, 1 + \sqrt{L + \frac{1}{4}}; \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

## 2.4 Le potentiel de Coulomb plus le potentiel $V(\theta)$

Lorsque  $V(r)$  est le potentiel de Coulomb attractif d'un atome hydrogénoïde défini par :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (2.43)$$

la fonction de Green radiale (2.31) prend la forme :

$$\begin{aligned} G_{m, \nu}(r'', r'; E) &= \frac{1}{r'' r'} \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{iET}{\hbar} \right] \int Dr(t) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left( \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2 L}{2\mu r^2} + \frac{Ze^2}{r} \right) dt \right\}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

En utilisant les résultats obtenus par l'intégration des chemins dans la référence [53] et en intégrant finalement sur  $T$ , nous arrivons à

$$G_{m,\nu}(r'', r'; E) = \frac{2}{i\omega r'' r'} \frac{\Gamma\left(p + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1\right)} M_{-p, \sqrt{L + \frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r'\right) W_{-p, \sqrt{L + \frac{1}{4}}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar} r''\right), \quad (2.45)$$

où  $p = -\frac{2Ze^2}{\hbar\omega}$ ,  $\omega = 2\sqrt{-\frac{2E}{\mu}}$  et  $r'' > r'$ .

Afin de déterminer le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde radiales, convenablement normalisées, nous procédons comme dans le paragraphe précédent et nous obtenons

$$E_{n_r, \nu, m} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 \left[ n_r + \frac{1}{2} \sqrt{\left(2\nu + \sqrt{4(\alpha + \beta + \gamma) + m^2} + \sqrt{4\gamma + m^2} + 1\right)^2 - 4\alpha + \frac{1}{2}} \right]^2}, \quad (2.46)$$

$$R_{n_r, \nu, m}(r) = \frac{2}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)^2 \Gamma\left(2\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1\right)} \left[ \frac{\Gamma\left(n_r + 2\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1\right)}{a n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \exp\left(-\frac{r}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}\right) \left(\frac{2r}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}\right)^{-\frac{1}{2} + \sqrt{L + \frac{1}{4}}} \\ \times {}_1F_1\left(-n_r, 2\sqrt{L + \frac{1}{4}} + 1; \frac{2r}{a \left(n_r + \sqrt{L + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2}\right)}\right), \quad (2.47)$$

où  $a = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}$  est le rayon de Bohr.

## 2.5 Cas particuliers

Pour vérifier l'exactitude des résultats donnés ci-dessus et les comparer à ceux disponibles dans la littérature, nous considérons trois cas.

### 2.5.1 Premier cas : l'oscillateur en forme d'anneau

En posant  $\alpha = \beta = 0$ ,  $\gamma \neq 0$  et en prenant  $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$  dans la définition (2.1), nous obtenons le potentiel suivant :

$$V(r, \theta) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{2\hbar^2}{\mu} \frac{\gamma}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad 0 < \theta < \pi. \quad (2.48)$$

Ce potentiel a été traité, dans le cadre des coordonnées cylindriques circulaires, à travers la résolution de l'équation de Schrödinger [34], et via l'approche des intégrales de chemin [57].

Les paramètres (2.26) et (2.33) s'écrivent donc

$$\begin{cases} \kappa = \lambda = \sqrt{4\gamma + m^2} = \eta, \\ L = J(J + 1), \end{cases} \quad (2.49)$$

avec  $J = \nu + \eta$ .

La fonction de Green associée à l'oscillateur en forme d'anneau peut être déduite des expressions (2.37) et (2.29),

$$\begin{aligned} G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) &= \frac{1}{2\pi i \omega (r'' r')^{\frac{3}{2}}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left( J + \frac{1}{2} \right) \frac{\Gamma(J + \eta + 1) \Gamma\left(p + \frac{J}{2} + \frac{3}{4}\right)}{\Gamma(J - \eta + 1) \Gamma\left(J + \frac{3}{2}\right)} \\ &\times e^{im(\phi'' - \phi')} P_J^{-\eta}(\cos \theta'') P_J^{-\eta}(\cos \theta') \\ &\times W_{-p, \frac{1}{2}(J + \frac{1}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r''^2 \right) M_{-p, \frac{1}{2}(J + \frac{1}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r'^2 \right), \end{aligned} \quad (2.50)$$

avec  $p = -E/2\hbar\omega$ .

Le spectre discret de l'énergie peut être déduit de l'expression (2.38),

$$E_{n_r, \nu, m} = \hbar\omega \left( 2n_r + J + \frac{3}{2} \right). \quad (2.51)$$

Les fonctions d'onde normalisées sont données par (2.29) pour la partie azimutale et

peuvent être déduites à partir des expressions (2.30) et (2.42) pour les parties polaire et radiale,

$$\Phi_J^{(\eta,\eta)}(\theta) = \left[ \left( J + \frac{1}{2} \right) \frac{\Gamma(J + \eta + 1)}{\Gamma(J - \eta + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} P_J^{-\eta}(\cos \theta), \quad (2.52)$$

et

$$\begin{aligned} R_{n_r,\nu,m}(r) &= \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left[ \frac{2\Gamma(n_r + J + \frac{3}{2})}{n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(J + \frac{3}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right)^{\frac{J}{2}} \\ &\times \exp\left(-\frac{\mu\omega}{2\hbar} r^2\right) {}_1F_1\left(-n_r, J + \frac{3}{2}; \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right). \end{aligned} \quad (2.53)$$

## 2.5.2 Deuxième cas : le potentiel en forme d'anneau de Hartmann

Pour  $\alpha = \beta = 0$ ,  $\gamma \neq 0$  et  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ , le potentiel (2.1) se réduit à

$$V(r, \theta) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{2\hbar^2}{\mu} \frac{\gamma}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad 0 < \theta < \pi. \quad (2.54)$$

Ce potentiel a été proposé par Hartmann comme un modèle pour décrire la molécule de benzène [31, 32, 33].

La fonction de Green relative à ce potentiel peut être déduite à partir des expressions (2.45) et (2.28),

$$\begin{aligned} G(\vec{r}'', \vec{r}'; E) &= \frac{1}{2\pi i \omega r'' r'} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} (2J + 1) \frac{\Gamma(J + \eta + 1) \Gamma(p + J + \frac{1}{2})}{\Gamma(J - \eta + 1) \Gamma(2J + 2)} e^{im(\phi'' - \phi')} \\ &\times P_J^{-\eta}(\cos \theta'') P_J^{-\eta}(\cos \theta') W_{-p, J + \frac{1}{2}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r'' \right) M_{-p, J + \frac{1}{2}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r' \right), \end{aligned} \quad (2.55)$$

où  $p = -2Ze^2/\hbar\omega$ , et  $\omega = 2\sqrt{-2E/\mu}$ .

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde radiales peuvent être obtenus à partir des

expressions (2.46) et (2.47),

$$E_{n_r, \nu, m} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (n_r + J + 1)^2}, \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned} R_{n_r, \nu, m}(r) &= \left[ \frac{a \Gamma(n_r + 2J + 2)}{2 n_r!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(2J + 2)} \\ &\times \left( \frac{2r}{a(n_r + J + 1)} \right)^J \exp\left( -\frac{r}{a(n_r + J + 1)} \right) \\ &{}_1F_1\left( -n_r, 2J + 1; \frac{2r}{a(n_r + J + 1)} \right). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Les fonctions d'onde pour les parties azimutale et polaire sont identiques aux expressions (2.19) et (2.52).

### 2.5.3 Troisième cas : un potentiel central

Si nous éliminons le potentiel  $V(\theta)$  en posant  $\alpha = \beta = \gamma = 0$ , le potentiel (2.1) se réduit à un potentiel central  $V(r)$ . Les paramètres  $\kappa$ ,  $\lambda$  et  $L$  définis par les expressions (2.26) et (2.33) s'écrivent

$$\kappa = \lambda = \eta = |m|, \quad L = l(l + 1), \quad (2.58)$$

où  $l = \nu + |m|$  représente le nombre quantique orbital, qui prend les valeurs  $l = 0, 1, 2, \dots$ , dépend des combinaisons de  $\nu$  et  $|m|$ .

Dans le cas où  $V(r)$  est le potentiel de l'oscillateur harmonique à trois dimensions, le spectre de l'énergie (2.38) devient

$$E_{n_r, l} = \hbar\omega \left( 2n_r + l + \frac{3}{2} \right). \quad (2.59)$$

Les fonctions d'onde bien connues et complètes peuvent être déduites à partir des équations (2.29), (2.30) et (2.42),

$$\begin{aligned}
\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \left[ (l+1) \frac{\Gamma(l+|m|+1)\Gamma(n_r+l+\frac{3}{2})}{n_r!\Gamma(l-|m|+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(l+\frac{3}{2})} \left( \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2 \right)^{\frac{l}{2}} \exp\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) \\
&\times {}_1F_1\left(-n_r, l+\frac{3}{2}; \frac{\mu\omega}{\hbar} r^2\right) P_l^{-|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}. \tag{2.60}
\end{aligned}$$

Lorsque  $V(r)$  est le potentiel coulombien d'un atome hydrogénoïde, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés s'obtiennent à partir des équations (2.46), (2.29), (2.30) et (2.47),

$$E_{n_r, l} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 (n_r + l + 1)^2}, \tag{2.61}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{a(n_r + l + 1)^2} \left[ \frac{2l+1}{\pi a} \frac{\Gamma(l+|m|+1)\Gamma(n_r+2l+2)}{n_r!\Gamma(l-|m|+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \left( \frac{2r}{a(n_r + l + 1)} \right)^l \exp\left(-\frac{r}{a(n_r + l + 1)}\right) \\
&\times {}_1F_1\left(-n_r, 2l+2; \frac{2r}{a(n_r + l + 1)}\right) P_l^{-|m|}(\cos\theta) e^{im\phi}. \tag{2.62}
\end{aligned}$$

# Chapitre 3

## Etats liés d'une particule de Klein-Gordon dans un potentiel vecteur plus un potentiel scalaire du type Pöschl-Teller général déformé

### 3.1 Introduction

Il y a une littérature très abondante sur l'étude de l'équation de Klein-Gordon d'une particule en présence d'un potentiel vecteur et d'un potentiel scalaire égaux en envisageant des modèles de potentiel typiques tels que le potentiel de Hartmann et le potentiel de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions [58], le potentiel de Kratzer en forme d'anneau [59, 60], le potentiel de Rosen-Morse [61], le potentiel exponentiel à plusieurs paramètres [62], le potentiel du puits double symétrique [63], le potentiel en forme d'anneau [64], le potentiel de Makarov [65] et le potentiel trigonométrique carré [66].

Récemment, l'équation de Klein-Gordon avec un potentiel scalaire et un potentiel vecteur égaux et de type Pöschl-Teller général a été résolue approximativement pour un état de moment cinétique  $l$  par la méthode standard [67] et dans le cadre du formalisme de

la supersymétrie en mécanique quantique [68] . Durant la même année, une modification est apportée à ce potentiel de façon à lui faire épouser la forme :

$$V_q(r) = \frac{V_1 - V_2 \cosh_q(\alpha r)}{\sinh_q^2(\alpha r)}, \quad (3.1)$$

où  $V_1$  et  $V_2$  sont des constantes positives telles que  $V_1 > V_2$  et  $q$  est un paramètre de déformation qui peut prendre toute valeur positive. Ce paramètre de déformation est introduit pour créer un mur impénétrable entre le mouvement de la particule et l'origine de la coordonnée. Ce mur peut être identifié avec le centre de masse de la molécule.

Une tentative de résolution de l'équation de Dirac sous la condition de la symétrie de spin  $V_q(r) = S_q(r)$  a été effectuée pour déterminer le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états  $s$  ( $l = 0$ ) par Dong et son collaborateur [69]. Cependant, les résultats obtenus sont valables seulement pour  $q \geq 1$  et  $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < \infty$ . C'est pourquoi nous allons reprendre en détail l'étude de ce potentiel dans le cadre des intégrales de chemin en considérant une particule chargée et sans spin.

Dans le second paragraphe, nous formulons l'expression de la fonction de Green dans le cas général  $V_q(r) \neq S_q(r)$  et dans la suite, ces potentiels sont supposés égaux. Dans le troisième paragraphe, nous étudions le cas où  $q \geq 1$  et  $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < \infty$ . Nous construisons la fonction de Green radiale relative à un état de moment cinétique orbital  $l$  en adoptant une approximation appropriée du terme potentiel centrifuge. Nous en déduisons l'équation d'énergie et les fonctions d'onde des états liés. Dans le quatrième paragraphe, nous discutons le cas où  $0 < q < 1$ . Comme l'approximation utilisée précédemment ne convient pas, nous nous limitons à la construction de la fonction de Green associée aux ondes  $s$  ( $l = 0$ ) à partir de laquelle nous tirons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde. Dans le dernier paragraphe, nous considérons le cas où  $q = 0$  qui correspond au potentiel de Morse. L'équation d'énergie et les fonctions d'onde sont déduites du cas précédent en faisant tendre  $q \rightarrow 0$ .

## 3.2 Fonction de Green

Pour traiter le problème des états liés d'une particule en mouvement dans un potentiel vecteur  $V_q(r)$  et un potentiel scalaire  $S_q(r)$  à l'aide des intégrales de chemin de Feynman, considérons la fonction de Green qui obéit à l'équation de Klein-Gordon donnée par :

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

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

La construction de la solution de l'équation (3.2) peut être entamée en partant de la représentation intégrale de Schwinger [70] qui consiste à écrire la fonction de Green sous la forme [71, 72, 73, 74, 75] :

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

Comme les potentiels  $V_q(r)$  et  $S_q(r)$  possèdent la symétrie sphérique, la fonction de Green (3.3) peut être développée sur la base des ondes sphériques ainsi :

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

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

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda), \quad (3.5)$$

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

$$\begin{aligned}
P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) &= \langle r'', t'' | \exp \left\{ \frac{i}{2} [-P_r^2 + (P_0 - V_q)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S_q)^2 \right] \Lambda \rangle |r', t'\rangle \\
&= \int Dr(\tau) Dt(\tau) \int \frac{DP_r(\tau) DP_0(\tau)}{(2\pi)^2} \\
&\quad \times \exp \left\{ i \int_0^\Lambda \left[ -P_r \dot{r} + P_0 \dot{t} + \frac{1}{2} f_L(r') (-P_r^2 + (P_0 - V)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{l(l+1)}{r^2} - (M + S)^2 \right) \right] d\tau \right\}. \tag{3.6}
\end{aligned}$$

Sous forme discrète, ce noyau s'écrit :

$$\begin{aligned}
P_{ld}(r'', t'', r', t'; S') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n dt_n \right] \\
&\quad \times \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n d(P_0)_n}{(2\pi)^2} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} A_1^n \right], \tag{3.7}
\end{aligned}$$

dans lequel nous avons introduit les fonctions régulatrices  $f_L(r)$  et  $f_R(r)$  définies par Kleinert [26] ainsi :

$$f(r) = f_L(r) f_R(r) = f^{1-\lambda}(r) f^\lambda(r), \tag{3.8}$$

où  $A_1^n$  est l'action élémentaire donnée par :

$$\begin{aligned}
A_1^n &= -(P_r)_n \Delta r_n + (P_0)_n \Delta t_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ -(P_r)_n^2 + ((P_0)_n - V_q(r_n))^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{l(l+1)}{r_n^2} - (M + S_q(r_n))^2 \right], \tag{3.9}
\end{aligned}$$

avec les notations habituelles

$$\varepsilon_\tau = \frac{\Lambda}{N+1} = d\tau \quad , \quad \Delta r_n = r_n - r_{n-1}, \quad \Delta t_n = t_n - t_{n-1}. \quad (3.10)$$

Pour évaluer (3.7), nous constatons d'abord que le calcul des intégrales sur les variables  $t_n$  dans l'expression (3.7) donnent  $N$  distributions de Dirac  $\delta((P_0)_n - (P_0)_{n+1})$ . En intégrant ensuite sur les variables  $(P_0)_n$ , on trouve

$$(P_0)_1 = (P_0)_2 = \dots (P_0)_{N+1} = E. \quad (3.11)$$

Par conséquent, le propagateur  $P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda)$  peut se mettre sous la forme :

$$P_l(r'', t'', r', t'; \Lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] P_l(r'', r'; \Lambda), \quad (3.12)$$

dans laquelle le noyau  $P_l(r'', r'; \Lambda)$  est donné par :

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \int \frac{d(P_r)_n}{2\pi} \right] \exp \left[ i \sum_{n=1}^{N+1} A_2^n \right], \quad (3.13)$$

avec l'action élémentaire

$$A_2^n = -(P_r)_n \Delta r_n + \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ -(P_r)_n^2 - \frac{l(l+1)}{r_n^2} + (E - V_q(r_n))^2 - (M + S_q(r_n))^2 \right]. \quad (3.14)$$

Par substitution de l'expression du noyau (3.11) dans (3.5), nous remarquons que le terme dépendant du temps  $t$  ne contient pas la variable pseudo-temporelle  $\Lambda$ . Donc, nous pouvons récrire la fonction de Green partielle (3.5) sous la forme :

$$G_l(r'', t'', r', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'' - t')] G_l(r'', r'), \quad (3.15)$$

avec

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda P_l(r'', r'; \Lambda). \quad (3.16)$$

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

$$P_l(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{1}{2i\pi\varepsilon_\tau} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} A_3^n \right\}, \quad (3.17)$$

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

$$A_2^n = \frac{(\Delta r_n)^2}{2\varepsilon_\tau} - \frac{\varepsilon_\tau}{2} \left[ (M + S_q(r_n))^2 - (E - V_q(r_n))^2 + \frac{l(l+1)}{r_n^2} \right]. \quad (3.18)$$

Cette intégrale de chemin (3.17) ne peut être évaluée exactement à cause de la présence du terme potentiel centrifuge contenu dans l'expression de l'action lorsque nous nous intéressons à l'étude des ondes  $l$ . Toutefois, il est facile de montrer [76, 77] que l'expression  $\frac{1}{r_n^2} \approx \frac{4q\alpha^2 e^{2\alpha r_n}}{(e^{2\alpha r_n} - q)^2} + \frac{\alpha^2}{12}$  peut être utilisée comme une bonne approximation dans le terme centrifuge lorsque le paramètre  $q \geq 1$  et  $\alpha r \ll 1$ .

Nous allons aborder dans ce qui suit le calcul de la fonction de Green (3.16) en choisissant  $S_q(r) = V_q(r)$  et nous devons distinguer trois cas.

### 3.3 Premier cas : $q \geq 1$ et $\frac{1}{2\alpha} \ln q < r < +\infty$

Dans ce cas, nous allons calculer l'intégrale de chemin associée aux potentiels vecteur et scalaire identiques (3.1) seulement dans l'intervalle  $]\frac{1}{2\alpha} \ln q, +\infty[$  puisque, dans l'autre intervalle  $]0, \frac{1}{2\alpha} \ln q[$ , la solution ne peut être obtenue analytiquement et de plus, elle ne présente aucun intérêt physique notable. Afin de construire la fonction de Green radiale pour un état de moment cinétique orbital  $l$ , nous remplaçons d'abord  $\frac{1}{r^2}$  par  $\frac{4q\alpha^2 e^{2\alpha r}}{(e^{2\alpha r} - q)^2} + \frac{\alpha^2}{12}$  comme une approximation du facteur  $\frac{1}{r^2}$  contenu dans le terme potentiel centrifuge qui apparaît dans l'expression de l'action. Compte tenu de cette approximation, la fonction de Green (3.16) se réécrit

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{2i} \int_0^\infty d\Lambda \exp \left[ -\frac{i}{2} \epsilon_l^2 \Lambda \right] P_{mPT}(r'', r'; \Lambda), \quad (3.19)$$

où le noyau  $P_{mPT}(r'', r'; \Lambda)$  est le propagateur associé au potentiel de Pöschl-Teller modifié déformé

$$P_{mPT}(r'', r'; \Lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\epsilon_\tau}} \prod_{n=1}^N \left[ \int dr_n \right] \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta r_n)^2}{2\epsilon_\tau} - \frac{\epsilon_\tau}{2} \left( \frac{\eta_l^2 - \frac{1}{4}}{\sinh^2_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r_n}{2} \right)} - \frac{\nu_l^2 - \frac{1}{4}}{\cosh^2_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r_n}{2} \right)} \right) \right] \right\}, \quad (3.20)$$

avec les paramètres  $\epsilon_l$ ,  $\eta_l$  et  $\nu_l$  définis par :

$$\begin{cases} \epsilon_l = \sqrt{M^2 - E^2 + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}}, \\ \eta_l = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} - V_2 \right) + \frac{\sqrt{q}\alpha^2 l(l+1)}{4}}, \\ \nu_l = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} + V_2 \right) + \frac{\sqrt{q}\alpha^2 l(l+1)}{4}}. \end{cases} \quad (3.21)$$

En effectuant le changement de variables  $u = \frac{\alpha}{2} \left( r - \frac{1}{2\alpha} \ln q \right)$  et  $\epsilon_\sigma = \frac{\alpha^2}{4} \epsilon_\tau$ , nous pouvons mettre la fonction de Green (3.19), pour les états  $l$ , sous la forme :

$$G_l(r'', r') = \frac{1}{i\alpha} \int_0^\infty d\sigma \exp \left[ i\tilde{E}_l \sigma \right] P_{mPT}(u'', u'; \sigma), \quad (3.22)$$

avec

$$\tilde{E}_l = -2\tilde{\epsilon}_l, \quad \tilde{\epsilon}_l = \frac{1}{\alpha} \sqrt{M^2 - E^2 + \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}}, \quad (3.23)$$

et

$$\begin{aligned}
P_{mPT}(u'', u'; \sigma) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2i\pi\varepsilon_\sigma}} \prod_{n=1}^N \left[ \int du_n \right] \\
&\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[ \frac{(\Delta u_n)^2}{2\varepsilon_\sigma} - \frac{\varepsilon_\sigma}{2} \left( \frac{\tilde{\eta}_l^2 - \frac{1}{4}}{\sinh^2(u_n)} - \frac{\tilde{\nu}_l^2 - \frac{1}{4}}{\cosh^2(u_n)} \right) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.24}$$

est le propagateur associé au potentiel de Pöschl-Teller où les paramètres  $\tilde{\eta}_l$  et  $\tilde{\nu}_l$  sont donnés par :

$$\begin{cases} \tilde{\eta}_l = \sqrt{\frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} - V_2 \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}, \\ \tilde{\nu}_l = \sqrt{\frac{M+E}{2} \left( \frac{V_1}{\sqrt{q}} + V_2 \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \end{cases} \tag{3.25}$$

Comme la solution exacte de la fonction de Green pour le potentiel de Pöschl-Teller est bien connue dans la littérature, nous nous contentons donc d'écrire directement le résultat [78, 79, 80] :

$$\begin{aligned}
G_l(r'', r') &= -\frac{1}{\alpha} \frac{\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}}) \Gamma(L_{\tilde{E}} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{\cosh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r''}{2} \right) \cosh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r'}{2} \right)}{q^{\frac{1}{2}}} \right)^{M_1 - M_2} \\
&\times \left( \tanh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r''}{2} \right) \tanh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r'}{2} \right) \right)^{M_1 + M_2 + \frac{1}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{q^{\frac{1}{2}}}{\cosh_{\sqrt{q}}^2 \left( \frac{\alpha r_{\leq}}{2} \right)} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \tanh_{\sqrt{q}}^2 \left( \frac{\alpha r_{\geq}}{2} \right) \right),
\end{aligned} \tag{3.26}$$

où nous avons utilisé les notations suivantes :

$$\begin{cases} L_{\tilde{E}} = \frac{1}{2}(\tilde{\nu}_l - 1), \\ M_1 = \frac{1}{2}\tilde{\eta}_l + \tilde{\epsilon}_l, \\ M_1 = \frac{1}{2}\tilde{\eta}_l - \tilde{\epsilon}_l. \end{cases} \quad (3.27)$$

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

Les pôles de la fonction de Green correspondent aux valeurs permises de l'énergie pour les états liés de la particule. Ce sont précisément les pôles de la fonction  $\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}})$  qui s'obtiennent lorsque  $M_1 - L_{\tilde{E}} = -n_r$ , pour  $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'équation

$$\begin{aligned} M^2 - E_{n_r, l}^2 = & \alpha^2 \left[ n_r + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2(M + E_{n_r, l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} - \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2(M + E_{n_r, l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} + \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2} \right]^2 - \frac{\alpha^2 l(l+1)}{12}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

avec les fonctions d'onde données par :

$$\begin{aligned} u_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) &= r \Psi_{n_r, l}^{q \geq 1}(r) \\ &= A \left( \frac{q^{\frac{1}{4}}}{\cosh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right)} \right)^{2\tilde{\epsilon}_{n_r, l}} \left( \tanh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2} + \tilde{\eta}_{n_r, l}} \\ &\quad \times {}_2F_1 \left( -n_r, n_r + \tilde{\eta}_{n_r, l} + 2\tilde{\epsilon}_{n_r, l} + 1, 2\tilde{\eta}_{n_r, l} + 1; \tanh_{\sqrt{q}}^2 \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Compte tenu du lien entre les fonctions hypergéométriques et les polynômes de Jacobi (voir Ref. [54], p. 952, Eq. (8.406.1))

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(t) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} {}_2F_1 \left( -n, n + \alpha + \beta + 1, \alpha + 1; \frac{1-t}{2} \right), \quad (3.30)$$

les fonctions d'onde (3.29) se mettent aussi sous la forme :

$$\begin{aligned} u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) &= N_{n_r,l} \left( \frac{q^{\frac{1}{4}}}{\cosh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right)} \right)^{2\tilde{\epsilon}_{n_r,l}} \left( \tanh_{\sqrt{q}} \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2} + \tilde{\eta}_{n_r,l}} \\ &\times P_{n_r}^{(\tilde{\eta}_{n_r,l}, 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l})} \left( 1 - 2 \tanh_{\sqrt{q}}^2 \left( \frac{\alpha r}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (3.31)$$

où  $N_{n_r,l}$  est un facteur normalisant qui se calcule à l'aide de la condition de normalisation

$$\int_{\frac{1}{2\alpha} \ln q}^{\infty} \left| u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) \right|^2 dr = 1. \quad (3.32)$$

Tous calculs faits, on trouve

$$N_{n_r,l} = \left[ \frac{2\alpha q^{\frac{\tilde{\epsilon}_{n_r,l}}{2}} \tilde{\epsilon}_{n_r,l} n_r! \Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + \tilde{\eta}_{n_r,l} + 1)}{\Gamma(n_r + 2\tilde{\epsilon}_{n_r,l} + 1) \Gamma(n_r + \tilde{\eta}_{n_r,l} + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.33)$$

Il est clair que la fonction d'onde (3.31) remplit la condition à la limite

$$\lim_{r \rightarrow \frac{1}{2\alpha} \ln q} u_{n_r,l}^{q \geq 1}(r) = 0, \quad (3.34)$$

lorsque

$$\tilde{\epsilon}_{n_r,l} < 0. \quad (3.35)$$

Donc, compte tenu de (3.21) et (3.28), le nombre d'états liés est déterminé par :

$$n_{r \max} < -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} (\tilde{\nu}_{n_r,l} - \tilde{\eta}_{n_r,l}), \quad (3.36)$$

où

$$\begin{cases} \tilde{\nu}_{nr,l} = \sqrt{\frac{2(M+E_{nr,l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} - \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}, \\ \tilde{\eta}_{nr,l} = \sqrt{\frac{2(M+E_{nr,l})}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} + \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \left( l + \frac{1}{2} \right)^2}. \end{cases} \quad (3.37)$$

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

Comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas précédent est valable seulement lorsque  $q \geq 1$  (voir thèse de Zouache [76] et Réf. [77]), nous nous plaçons donc dans le cas où le terme potentiel centrifuge est nul, c'est à dire, nous nous intéressons au problème des ondes s ( $l = 0$ ). La discussion développée ci-dessus est valable, mais dans ce cas, le changement de variables  $r \rightarrow u$  précédent transforme  $r \in \mathbb{R}^+$  en  $u \in ]-\frac{1}{4} \ln q, +\infty[$ . Ceci signifie que le noyau (3.24), pour  $l = 0$ , est le propagateur qui représente le mouvement d'une particule placée dans un potentiel du type Pöschl-Teller  $q$ -déformé défini sur la demi-droite  $u > u_0 = -\frac{1}{4} \ln q$ . Comme un calcul direct du propagateur par l'intégrale de chemin n'est pas possible, pour contourner cette difficulté formelle, le problème peut se résoudre au moyen d'une astuce qui consiste à introduire un terme potentiel auxiliaire représenté par une fonction  $\delta$  de Dirac dans l'expression de l'action contenue dans l'équation (3.24) pour former un mur impénétrable [30, 81] au point  $u = u_0 = -\frac{1}{4} \ln q$ . Alors, la fonction de Green (3.22), pour  $l = 0$ , devient

$$G_0^\delta(r'', r') = \frac{1}{i\alpha} \int_0^\infty d\sigma \exp\left(i\tilde{E}_0\sigma\right) P_{mPT}^\delta(u'', u'; \sigma), \quad (3.38)$$

où

$$\tilde{E}_0 = -\frac{2}{\alpha^2} (M^2 - E^2), \quad (3.39)$$

$$P_{mPT}^\delta(u'', u'; \sigma) = \int \mathcal{D}u(\tau) \exp \left\{ i \int_0^\sigma \left[ \frac{\dot{u}^2}{2} - V^\delta(u) \right] d\tau \right\}. \quad (3.40)$$

Cette intégrale de chemin (3.40) peut être interprétée comme étant le propagateur d'une particule soumise à un potentiel de la forme :

$$V^\delta(u) = V_{mPT}^0(u) - \lambda\delta(u - u_0). \quad (3.41)$$

où

$$V_{mPT}^0(u) = \frac{1}{2} \left( \frac{\tilde{\eta}_0^2 - \frac{1}{4}}{\sinh^2 u} - \frac{\tilde{\nu}_0^2 - \frac{1}{4}}{\cosh^2 u} \right), \quad (3.42)$$

avec

$$\begin{cases} \tilde{\eta}_0 = \sqrt{\frac{2(M+E)}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} + \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \frac{1}{4}} \\ \tilde{\nu}_0 = \sqrt{\frac{2(M+E)}{\alpha^2} \left( \frac{V_1}{q} - \frac{V_2}{\sqrt{q}} \right) + \frac{1}{4}}. \end{cases} \quad (3.43)$$

Comme il est tout fait clair, vu la forme trop compliquée du potentiel (3.41), que le calcul par l'intégrale de chemin du noyau (3.40) ne peut pas être effectué directement. Dans ce cas, il est commode d'appliquer la technique des perturbations en développant  $\exp \left[ i\lambda \int_{\tau'}^{\tau''} \delta(u - u_0) d\tau \right]$  en série de puissances. Ceci donne le développement en série suivant [21, 28, 29, 30] :

$$\begin{aligned} P_{mPT}^\delta(u'', u'; \sigma) &= P_{mPT}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\lambda)^n}{n!} \prod_{j=1}^n \left[ \int_{\tau'}^{\tau_{j+1}} d\tau_j \int_{-\infty}^{+\infty} du_j \right] \\ &P_{mPT}^0(u_1, u'; \tau_1 - \tau') \delta(u_1 - u_0) P_{mPT}^0(u_2, u_1; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\times \delta(u_{n-1} - u_0) P_{mPT}^0(u_n, u_{n-1}; \tau_n - \tau_{n-1}) \delta(u_n - u_0) \\ &\times P_{mPT}^0(u'', u_n; \tau'' - \tau_n) \\ &= P_{mPT}^0(u'', u'; \sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\lambda)^n \int_{\tau'}^{\tau''} d\tau_n \int_{\tau'}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_1 \\ &P_{mPT}^0(u_0, u'; \tau_1 - \tau') P_{mPT}^0(u_0, u_0; \tau_2 - \tau_1) \times \dots \\ &\times P_{mPT}^0(u_0, u_0; \tau_n - \tau_{n-1}) P_{mPT}^0(u'', u_0; \tau'' - \tau_n), \end{aligned} \quad (3.44)$$

où nous avons ordonné le temps ainsi  $\tau' = \tau_0 < \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_n < \tau_{n+1} = \tau''$  et  $\sigma = \tau'' - \tau'$ . Pour effectuer les intégrations successives sur les variables  $\tau_j$  dans l'équation (3.44), nous insérons (3.44) dans (3.38), et en utilisant le théorème de convolution de la

transformation de Fourier, il est possible d'écrire

$$G_0^\delta(u'', u'; \tilde{E}_0) = G_{mPT}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{mPT}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{mPT}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{mPT}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) - \frac{1}{\lambda}}, \quad (3.45)$$

expression dans laquelle  $G_{mPT}^0(u'', u'; \tilde{E}_0)$  est la fonction de Green associée au potentiel de Pöschl-Teller modifié (3.42). À la limite  $\lambda \rightarrow -\infty$ , la particule est contrainte de se déplacer dans le potentiel  $V_{mPT}^0(u)$  limité par une barrière infiniment répulsive [81, 82] localisé au point  $u = u_0$ . Dans ce cas, la fonction de Green, pour  $l = 0$ , s'écrit alors

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{RM}(u'', u'; \tilde{E}_0) &= \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} G_0^\delta(r'', r') \\ &= G_{mPT}^0(u'', u'; \tilde{E}_0) - \frac{G_{mPT}^0(u'', u_0; \tilde{E}_0)G_{mPT}^0(u_0, u'; \tilde{E}_0)}{G_{mPT}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0)}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par les pôles de l'équation (3.46), c'est à dire, par l'équation  $G_{mPT}^0(u_0, u_0; \tilde{E}_0) = 0$ , ou encore par l'équation transcendante

$${}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{4q^{\frac{1}{2}}}{(1+q)^2}\right) = 0. \quad (3.47)$$

où

$$\begin{cases} \alpha = \tilde{\epsilon}_{n_r} + \frac{1}{2}(\tilde{\eta}_{n_r} - \tilde{\nu}_{n_r}) + \frac{1}{2}, \\ \beta = \tilde{\epsilon}_{n_r} + \frac{1}{2}(\tilde{\eta}_{n_r} + \tilde{\nu}_{n_r}) + \frac{1}{2}, \\ \gamma = 2\tilde{\epsilon}_{n_r} + 1. \end{cases} \quad (3.48)$$

Cette équation peut être résolue numériquement pour connaître les niveaux d'énergie discrets de la particule. Les fonctions d'onde correspondantes aux états liés sont données par :

$$\begin{aligned}
u_{n_r}^{0 < q^1}(r) &= N \left( \frac{q^{\frac{1}{4}}}{\cosh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r}{2}\right)} \right)^{2\tilde{\epsilon}_{n_r}} \left( \tanh_{\sqrt{q}}\left(\frac{\alpha r}{2}\right) \right)^{\frac{1}{2} + \tilde{\eta}_{n_r}} \\
&\times {}_2F_1 \left( \alpha, \beta, \gamma; \frac{q^{\frac{1}{2}}}{\cosh_{\sqrt{q}}^2\left(\frac{\alpha r}{2}\right)} \right), \tag{3.49}
\end{aligned}$$

où  $N$  est un facteur constant.

### 3.5 Potentiel de Morse radial

En posant  $q = 0$  dans le potentiel (3.1), nous obtenons le potentiel de Morse radial

$$V_0(r) = 4V_1e^{-2\alpha r} - 2V_2e^{-\alpha r}, \tag{3.50}$$

avec les paramètres  $V_1$  et  $V_2$  définis par  $V_1 = \frac{D_e}{4}e^{2\alpha r_e}$ ,  $V_2 = D_e e^{\alpha r_e}$  où  $D_e$  est la profondeur du puits de potentiel et  $r_e$  est la distance d'équilibre des deux noyaux de la molécule diatomique.

Dans ce cas, Il peut être vu à partir des équations (3.43) que

$$\begin{cases} \tilde{\eta}_0 \xrightarrow{q \rightarrow 0} -\frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{\alpha\sqrt{q}} \sqrt{2(M+E)V_1}, \\ \tilde{\nu}_0 \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{\alpha\sqrt{q}} \sqrt{2(M+E)V_1}. \end{cases} \tag{3.51}$$

D'autre part, en utilisant la formule [83]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1 \left( \alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta} \right) = {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \tag{3.52}$$

il est facile de montrer qu'à la limite  $q \rightarrow 0$ , la fonction d'onde (3.48) devient

$$\begin{aligned}
u_0^{q=0}(r) &= C e^{-\tilde{\epsilon}_0 r \tilde{\epsilon}_0} \exp\left(-\frac{1}{\alpha} \sqrt{2(M+E)V_1} e^{-\alpha r}\right) \\
&\times {}_1F_1\left(\tilde{\epsilon}_0 - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{2}, 2\tilde{\epsilon}_0 + 1; \frac{4}{\alpha} \sqrt{2(M+E)V_1} e^{-\alpha r}\right).
\end{aligned} \tag{3.53}$$

et la condition de quantification transcendante déterminant les niveaux d'énergie des états liés (3.47) prend la forme :

$$\begin{aligned}
&{}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{4q^{\frac{1}{2}}}{(1+q)^2}\right) \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \\
&{}_1F_1\left(\tilde{\epsilon}_0 - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{2}, 2\tilde{\epsilon}_0 + 1; \frac{4}{\alpha} \sqrt{2(M+E)V_1}\right) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Comme  $V_1$  tend vers l'infini, à partir du comportement asymptotique de la fonction hypergéométrique [84], il s'ensuit que

$$\tilde{\epsilon}_0 - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E)}{V_1}} + \frac{1}{2} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \tag{3.55}$$

et ainsi nous obtenons l'équation d'énergie :

$$M^2 - E_{n_r}^2 = \alpha^2 \left( n_r - \frac{V_2}{2\alpha} \sqrt{\frac{2(M+E_{n_r})}{V_1}} + \frac{1}{2} \right)^2. \tag{3.56}$$

# Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement rigoureux, par la méthode des intégrales de chemin de Feynman, d'un ensemble de deux systèmes dynamiques très utiles dans plusieurs branches de la physique théorique et en chimie quantique.

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons étudié un potentiel électrique à symétrie axiale dont la partie angulaire dépend de trois paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ . En utilisant le développement de Fourier de l'exponentielle du terme de l'action élémentaire dépendant de la variable azimutale  $\phi$ , le comportement asymptotique des fonctions de Bessel et une transformation temporelle, nous avons montré que les variables  $r$ ,  $\theta$  et  $\phi$  sont séparables. Ceci conduit au calcul explicite de la partie angulaire de la fonction de Green. La fonction de Green radiale est calculée dans les cas de l'oscillateur harmonique et du potentiel de Coulomb. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées sont obtenus respectivement à partir des pôles et des résidus de la fonction de Green radiale. Comme sous produits, nous avons retrouvé aisément les résultats concernant le potentiel de l'oscillateur en forme d'anneau et le potentiel de Hartmann.

Il faut souligner qu'en éliminant les paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , les spectres complets de l'oscillateur harmonique sphérique et d'un atome hydrogénoïde sont recouverts contrairement aux résultats obtenus à l'aide de la méthode de Nikiforov-Uvarov [49, 50] .

Dans le contexte relativiste, nous avons discuté le problème d'une particule sans spin, de masse  $M$  et de charge  $(-e)$  en présence d'un potentiel vecteur et un potentiel scalaire à symétrie sphérique qui sont égaux et du type Pöschl-Teller général déformé. Pour un paramètre de déformation  $q$  supérieur ou égal à l'unité, en remplaçant le potentiel

centrifuge par une expression approximative appropriée, la fonction de Green associée à l'onde  $l$  est construite sous forme compacte en utilisant simplement la méthode des transformations spatio-temporelles. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde sont extraits respectivement des pôles et des résidus de la fonction de Green. Pour  $0 < q < 1$ , comme l'approximation du terme potentiel centrifuge adoptée dans le cas précédent n'étant plus valable, nous nous sommes limités donc à l'évaluation de la fonction de Green pour les ondes  $s$  ( $l = 0$ ). Le calcul est fait à l'aide de la méthode des perturbations pour tenir compte des conditions aux limites de Dirichlet imposées à la solution du problème. Dans ce cas, la condition de quantification de l'énergie est déterminée par une équation transcendante comprenant une fonction hypergéométrique qu'il faut résoudre numériquement pour connaître les niveaux d'énergie.

# Bibliographie

- [1] A. A. Makarov, J. A. Smorodinsky, Kh. Valiev et P. Winternitz, Nuovo Cimento **A** **52** (1967) 1061.
- [2] P. W. Higgs, J. Phys. A : Math. Gen. **12** (1979) 309.
- [3] Ya. A. Granovsky, A. S. Zhedanov et I. M. Lutzenko, Theor. Math. Phys. **91** (1992) 604.
- [4] N. Kayamata, Nuovo Cimento **B** **107** (1992) 763.
- [5] H. I. Leemon, J. Phys. **A** : Math. Gen. **12** (1979) 489.
- [6] L. Infeld, Phys. Rev. **59** (1941) 737..
- [7] L. Infeld et A. Schild, Phys. Rev. **67** (1945) 121.
- [8] A. F. Stevenson, Phys. Rev. **59** (1941) 842.
- [9] E. Schrodinger, Proc. Roy. Irish Soc. **46** (1941) 9.
- [10] E. Schrodinger, Proc. Roy. Irish Soc. **46** (1941) 183.
- [11] E. Schrodinger, Proc. Roy. Irish Soc. **47** (1941) 53.
- [12] G. A. Natanzon, Theor. Math. Phys. **38** (1979) 146.
- [13] G. Pöschl et E. Teller, Z. Phys. **83** (1933) 143.
- [14] N. Rosen et P. M. Morse, Phys. Rev. **42** (1932) 201.
- [15] M. F. Manning et N. Rosen, Phys. Rev. **44** (1933) 953.
- [16] C. Eckart, Phys. Rev. **35** (1930) 1303.

- [17] A. Arai, J. Math. Anal. Appl. **158** (1991) 63; J. Phys. A : Math. Gen. **34** (2001) 4281.
- [18] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [19] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [20] W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. **33** (1925) 879; M. Born et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. **34** (1925) 858; M. Born, W. Heisenberg et P. Jordan, Zeitsch. f. Phys. **35** (1926) 557; P. M. A. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A 109** (1925) 642; P. M. A. Dirac, *The principles of quantum mechanics* (Oxford Press, London, 1958).
- [21] R. P. Feynman et A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integral* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [22] I. H. Duru et H. Kleinert, Phys. Lett. **B 84** (1979) 185.
- [23] I. H. Duru et H. Kleinert, Fortschr.Phys. **30** (1982) 401.
- [24] A. Inomata, H. Kuratsuji et C. C. Gerry, *Path integrals and coherent states of SU(2) and SU(1,1)* (World Scientific, Singapore, 1992).
- [25] D. C. Khandekar, S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, *Path integral methods and their applications* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [26] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics Polymer Physics and Financial Markets* (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).
- [27] C. Grosche et F. Steiner, *A table of Feynman path integrals* ( Springer, Berlin, 1998).
- [28] D. Bauch, Nuovo Cimento **B 85** (1985) 118.
- [29] S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Phys. Lett. **A 131** (1988) 8.
- [30] C. Grosche, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1.
- [31] H. Hartmann, Theor. Chim. Acta **24** (1972) 201
- [32] H. Hartmann, R. Schuck et J. Radtke, Theor. Chim. Acta **42** (1976) 1.

- [33] H. Hartmann et D. Schuch, *Int. J. Quantum Chem.* **18** (1980) 125.
- [34] C. Quesne, *J. Phys.* **A 21** (1988) 3093.
- [35] M. V. Carpio et A. Inomata, in : *Path integrals from meV to MeV*, eds. M. C. Gutzwiller, A. Inomata, J. Klauder, L. Streit ( World Scientific, Singapore, 1986) 261.
- [36] I. Sokmen, *Phys. Lett.* **A 115** (1986) 249.
- [37] L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Phys. Lett.* **A 125** (1987) 277.
- [38] M. Kibler et T. Negadi, *Int. J. Quantum Chem.* **26** (1984) 405.
- [39] C. C. Gerry, *Phys. Lett.* **A 118** (1986) 445.
- [40] M. Kibler et P. Winternitz, *J. Phys. A : Math. Gen.* **20**(1987) 4097.
- [41] A. Guha et S. Mukherjee, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 840.
- [42] A. N. Vaidya et H. Boschi Filho, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 1951.
- [43] L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 3410.
- [44] N. W. Evans, *Phys. Lett.* **A 147** (1990) 483.
- [45] N. W. Evans, *Phys. Rev.* **A 41** (1990) 5666.
- [46] N. W. Evans, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 600.
- [47] C. Grosche, G. S. Pogosyan et A. N. Sissakian, *Fortschr. Phys.* **43** (1995) 453.
- [48] L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **42** (2001) 4684.
- [49] C. Berkdemir, *J. Math. Chem.* **46** (2009) 139.
- [50] M. C. Zhang, G. H. Sun et S. H. Dong, *Phys. Lett.* **A 374** (2010) 704.
- [51] I. H. Duru, *Phys. Rev.* **D 30** (1984) 2121.
- [52] M. Bohm et G. Junker, *J. Math. Phys.* **28** (1987) 1978.
- [53] L. Chetouani, L. Guechi, M. Letlout et T. F. Hammann, *Nuovo Cimento* **B 105** (1990) 387.

- [54] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [55] B. S. Dewitt, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 377 (1957) ; D. W. Mc Laughlin et L. S. Schulman, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 2520.
- [56] D. Peak et A. Inomata, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1422.
- [57] M. V. Carpio-Bernido et C. C. Bernido, *Phys. Lett. A* **134** (1989) 395.
- [58] A. A. Alhaidari, H. Bahlouli et A. Al-Hasan, *Phys. Lett. A* **349** (2006) 87.
- [59] W. C. Qiang, *Chin. Phys.* **13** (2004) 575.
- [60] S. M. Ikhdair et R. Sever, *Cent. Eur. J. Phys.* **6** (2008) 141.
- [61] L. Z. Yi, L. Y. Liu et C. S. Jia, *Phys. Lett. A* **333** (2004) 212.
- [62] Y. F. Diao, L. Y. Liu et C. S. Jia, *Phys. Lett. A* **332** (2004) 157.
- [63] X. Q. Zhao, C. S. Jia et Q. B. Yang, *Phys. Lett. A* **337** (2005) 189.
- [64] S. H. Dong et M. Lozada-Cassou, *Phys. Scr.* **74** (2006) 285.
- [65] F. Yasuk, A. Durmus et I. Boztosun, *J. Math. Phys.* **47** (2006) 082302.
- [66] L. B. Castro et A. S. de Castro, *Phys. Scr.* **75** (2007) 170.
- [67] W. C. Qiang et S. H. Dong, *Phys. Lett. A* **372** (2008) 4789.
- [68] T. Chen, Y. F. Diao et C. S. Jia, *Phys. Scr.* **79** (2009) 065014.
- [69] G. F. Wei et S. H. Dong, *Phys. Lett. A* **373** (2009) 2428.
- [70] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **82** (1951) 664.
- [71] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *J. Math. Phys.* **32** (1991) 441.
- [72] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **80** (1950) 440.
- [73] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- [74] B. Bentag, L. Chetouani, L. Guechi et T. F. Hammann, *Il Nuovo Cimento B* **111** (1996) 99.

- [75] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T. F. Hammann et A. Messouber, *Physica* **A 234** (1996) 529.
- [76] A. Zouache, *Thèse de Doctorat soutenue le 22/11/2009*, Université Mentouri-Constantine.
- [77] F. Benamira, L. Guechi, S. Mameri et M. A. Sadoun, *J. Math. Phys.* **51** (2010) 032301.
- [78] C. Grosche, *Il Nuovo Cimento* **B 108** (1993) 1369.
- [79] H. Kleinert et I. Mustapic, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 643.
- [80] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38** (2005) 2947.
- [81] T. E. Clark, R. Menikoff et D. H. Sharp, *Phys.Rev.* **D 22** (1980) 3012.
- [82] M. Carreau, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 4139; M. Carreau, E. Farhi et S. Gutmann, *Phys. Rev.* **D 42** (1990) 1194.
- [83] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [84] S. Flugge, *Practical quantum mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1974).