

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université Constantine I
Faculté des Sciences Exactes
Département de Physique

N° d'ordre :

Série :

Mémoire de Magister

présenté par :

LEGHRIB ILHEM

Pour obtenir le Diplôme de Magister en Physique

Spécialité : Physique Théorique

Option : Physique Quantique

Sujet :

**INTEGRALE DE CHEMIN EN MECANIQUE
QUANTIQUE**

soutenu le : 20/03/2013

devant le jury composé de :

Président	L. Guechi	Prof. Univ Constantine I
Rapporteur	B. Bentag	Prof. Univ Constantine I
Examineur	F. Benamira	Prof. Univ Constantine I
Examineur	N. Belaloui	Prof. Univ Constantine I

Remerciements

Ce présent travail a été réalisé au laboratoire de physique théorique de l'université Constantine-I sous la direction de

Mme. B. Bentag.

J'exprime mes remerciements premièrement à mon encadreur Mme. B. Bentag, Professeur à l'université Constantine-I, qui ma proposé ce sujet et m'a aidé à rédiger ce travail.

Je remercie Mr. L.Guechi, Professeur à l'université Constantine-I, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

J'adresse également mes remerciements à Mrs. F. Benamira et N. Belaloui, professeurs à l'université Constantine-I, d'avoir accepté d'examiner ce Mémoire .

Mes remerciements vont aussi à tous les amis et les collègues et plus particulièrement

Mr. M. Guenouche et Mme. L. Boubertekh.

Dédicace

Je dédie ce travail à :

Mes chers parents

*avec ma profonde gratitude pour la patience qu'ils ont
montré tout au long de mes études*

Mes chères sœurs : Djamila, Samia (Zina).

*Mes chers frères : Ahcen, Djamel, Zoher, Nabil, Salim et
Karim*

A toutes mes belles sœurs.

A mes chers tantes et oncles.

A tous mes cousines et cousins.

A mes petits: Lamies, Balkais et Haroun.

*A mes meilleures amies : Leila, Fatima, Radja, Nora, Hafida
et Louisa.*

Table des matières

1	Introduction	3
1.1	La théorie des quanta (Bohr-Sommerfeld, 1915)	4
1.2	La théorie des matrices (Heisenberg, 1926)	5
1.3	La mécanique ondulatoire (Schrödinger, 1927)	6
1.4	L'intégrale de chemin (Feynman, 1948)	7
2	Particule libre sur un cône	18
2.1	Le propagateur	19
2.2	Fonction de Green	22
2.3	Conclusion	30
3	Traitement du mouvement d'une particule sur un cône et soumise à un potentiel quadratique inverse	31
3.1	Le propagateur	33
3.2	Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés	42
3.3	Cas particuliers	47
3.4	Conclusion	48
4	Résolution exacte de deux problèmes à une dimension sur un cercle	49
4.1	Présentation de la technique de la fonctionnelle delta de Dirac	50
4.2	Quantification de l'Hamiltonien classique	51
4.3	Problème de l'oscillateur singulier sur un cercle	52
4.4	Fonction de Green	62

4.5	Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés	64
4.6	Problème de Coulomb singulier sur un cercle	66
4.6.1	Cas particuliers :	68
4.7	Conclusion	70
5	Conclusion	71

Chapitre 1

Introduction

L'Intégrale de chemin est une intégrale fonctionnelle, c'est-à-dire que l'intégrand est une fonctionnelle et que la somme est prise sur des fonctions, et non sur des nombres réels (ou complexes) comme pour les intégrales ordinaires. On a donc ici affaire à une intégrale en dimension infinie. Ainsi, on distinguera soigneusement l'intégrale de chemin (intégrale fonctionnelle) d'une intégrale ordinaire calculée sur un chemin de l'espace physique, que les mathématiciens appellent intégrale curviligne.

C'est Richard Feynman qui a introduit les intégrales de chemin en physique dans sa thèse, soutenue en mai 1942, portant sur la formulation de la mécanique quantique basée sur le Lagrangien. En raison de la seconde guerre mondiale, ces résultats ne seront publiés qu'en 1948. Cet outil mathématique s'est rapidement imposé en physique théorique avec sa généralisation à la théorie quantique des champs, permettant notamment une quantification des théories de jauge non-abéliennes plus simple que la procédure de quantification canonique.

L'intégrale de chemin est un objet mathématique qui peut être considéré comme une généralisation à un nombre infini de variables, représenté par des chemins et des intégrales ordinaires. Elle partage les propriétés algébriques des intégrales ordinaires, mais présente des propriétés nouvelles du point de vue de l'analyse. L'intégrale de chemin c'est un outil puissant pour l'étude de la mécanique quantique, car elle met en correspondance de façon très explicite les deux mécaniques classique et quantique. Les quantités physiques s'obtiennent en moyennant sur tous les chemins possibles, mais dans la limite semi-classique $\hbar \rightarrow 0$, les chemins dominant l'intégrale se trouvent dans un voisinage du chemin classique.

Ainsi, l'intégrale de chemin permet une compréhension intuitive et un calcul simple des effets semi-classiques tant du point de vue de la diffusion que des propriétés spectrales ou de l'effet tunnel. De plus la formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin, si elle peut paraître plus compliquée du point de vue mathématique, puisqu'elle se substitue à un formalisme d'équations aux dérivées partielles, est bien adaptée à l'étude de systèmes à un grand nombre de degrés de liberté où un formalisme de type équation de Schrödinger est beaucoup moins utile.

En 1948, Richard Feynman a initié une véritable révolution, même si elle n'a pas été soudaine et est encore en marche, en proposant une nouvelle formulation de la mécanique quantique. l'idée de départ, due à Dirac, est la recherche d'une formulation de la mécanique quantique directement en termes du lagrangien. La formulation Hamiltonienne n'est en effet pas complètement satisfaisante pour au moins deux raisons :

- Elle suppose l'existence d'un moment conjugué $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ pour chaque variable, ce qui n'est pas le cas le plus général (les difficultés de cette méthode pour le champ électromagnétique).
- Elle n'est pas manifestement covariante par une transformation de Lorentz.

Pour mieux comprendre les motivations de Dirac et Feynman, il est utile de faire un bref rappel des différentes formulations de la mécanique quantique [1] (cours du Professeur Frédéric Mila EPFL (2004)).

1.1 La théorie des quanta (Bohr-Sommerfeld, 1915)

La première théorie de la quantification des niveaux d'énergie dans les atomes due à Bohr et sommerfeld (1915) est basée de façon tout à fait essentielle sur la formulation Hamiltonienne de la mécanique classique. Les étapes sont les suivantes :

- Déterminer le Lagrangien $L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N)$ (supposé indépendant du temps).
- Dédire le hamiltonien par une transformation de Legendre :

$$H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q_1, \dots, q_N, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_N), \quad (1.1)$$

où les \dot{q}_i sont des fonctions de $(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ données par $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$.

- Résoudre l'équation de Hamilton-Jacobi

$$H(q_1, \dots, q_N, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial q_N}) = E, \quad (1.2)$$

et en déduire une transformation canonique vers les variables action-angle I_i, ω_i , telles que

$$\begin{cases} \frac{dI_i}{dt} = 0 \\ \frac{d\omega_i}{dt} = \omega_i. \end{cases} \quad (1.3)$$

Les règles de quantification sont alors données par : $I_i = \hbar n_i$ avec $n_i = 0, 1, \dots$. Pour un système ayant un degré de liberté, l'expression de I est donnée par

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint pdq = n\hbar, \quad (1.4)$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (h est la constante de Planck) = quantum d'action.

Cette théorie, considérée par Sommerfelde comme "la voie royale vers la quantification", s'est en fait rapidement révélée insuffisante. Sa limitation majeure est de reposer sur une solution complète de l'équation de Hamilton-Jacobi. Cela suppose que le système est séparable. Or les systèmes séparables constituent l'exception : l'immense majorité des systèmes mécaniques ne sont pas séparables, et il s'est avéré impossible de généraliser cette formulation sans introduire de nouveaux concepts.

1.2 La théorie des matrices (Heisenberg, 1926)

En 1926, Heisenberg a démontré que les mêmes règles de quantification pouvaient être obtenues pour un système séparable si les énergies étaient définies comme les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien H :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad \text{pour une particule,} \quad (1.5)$$

où x et p doivent être considérés comme des opérateurs satisfaisant les règles de commutation

$$[x, p] = i\hbar. \quad (1.6)$$

Mais cette formulation, qui peut être étendue automatiquement à n'importe quel système comportant plusieurs particules en introduisant le hamiltonien

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(x_1, \dots, x_N) \quad (1.7)$$

et les règles de commutation

$$[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (1.8)$$

ne nécessite pas que le système soit intégrable. Heisenberg l'a donc proposée comme une théorie générale de la quantification. C'est effectivement la première théorie de la mécanique quantique. L'idée d'introduire des opérateurs qui ne commutent pas était basée sur les propriétés des matrices, et Heisenberg a utilisé cette représentation pour déterminer les valeurs propres du hamiltonien.

Cette façon de quantifier le mouvement, connue sous le nom de “quantification canonique”, repose toujours de façon essentielle sur la formulation hamiltonienne du problème de mécanique classique correspondant. En particulier, l'évolution temporelle des opérateurs est régie par l'équation

$$i\hbar \frac{d\hat{O}}{dt} = [\hat{O}, H]. \quad (1.9)$$

1.3 La mécanique ondulatoire (Schrödinger, 1927)

Indépendamment de Heisenberg, et en se basant sur les propriétés d'onde des électrons révélées dans les expériences de diffraction, Schrödinger a formulé une autre approche basée sur le concept de fonction d'onde.

Dans cette approche, l'état d'un système est repéré par une fonction d'onde dont l'évolution temporelle est régie par l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) \quad (1.10)$$

(pour une particule non relativiste).

Les niveaux d'énergie d'un atome correspondent aux états stationnaires

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = E \Psi(x, t). \quad (1.11)$$

Dans cette formulation, le hamiltonien n'apparaît pas explicitement. Cependant, il est possible de faire le lien avec la formulation de Heisenberg en remarquant que l'équation peut se récrire

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi, \quad (1.12)$$

avec

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad \text{et} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (1.13)$$

En effet, les opérateurs \hat{x} et \hat{p} définis par

$$\hat{x} : \phi \longrightarrow x\phi, \quad \hat{p} : \phi \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (1.14)$$

satisfont $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Le lien entre les deux représentations en termes de bases de l'espace de Hilbert a été établi par Dirac.

1.4 L'intégrale de chemin (Feynman, 1948)

L'évolution temporelle de la fonction d'onde peut se décrire à l'aide de l'opérateur d'évolution :

$$\Psi(t) = U(t, t_0) \Psi(t_0) \quad (1.15)$$

où $U(t, t_0)$ est un opérateur qui satisfait l'équation

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU. \quad (1.16)$$

L'opérateur d'évolution peut être aussi défini par ses éléments de matrice dans une base de

l'espace de Hilbert des fonctions d'onde. Deux bases sont particulièrement utiles : $|x\rangle$ et $|p\rangle$.

- $|p\rangle$ sont définis comme les vecteurs propres de l'opérateur \hat{p} de valeurs propres p comme

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.17)$$

La fonction d'onde $\phi_p(x)$ associée à p satisfait donc :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi_p = p \phi_p. \quad (1.18)$$

Cette équation est manifestement satisfaite par $\exp(ipx/\hbar)$. La seule subtilité réside dans la normalisation. Comme $\exp(ipx/\hbar)$ n'est pas de carré sommable, on ne peut pas la normaliser à

1. La convention de normalisation est fixée par la relation de fermeture

$$\int dp |p\rangle \langle p| = 1 \quad (1.19)$$

Posons

$$|p\rangle = \left| \frac{1}{N} \exp(ipx/\hbar) \right\rangle \quad (1.20)$$

$$\begin{aligned} \int dp |p\rangle \langle p| \phi(x) &= \frac{1}{N^2} \int dp \int dx' (\exp ipx/\hbar) (\exp -ipx'/\hbar) \phi(x'), \\ &= \frac{1}{N^2} \int dp (\exp ipx/\hbar) \int dx' (\exp -ipx'/\hbar) \phi(x'). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Or, la transformée de Fourier de $\phi(x)$ est définie par

$$\phi'(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx (\exp -ikx) \phi(x), \quad (1.22)$$

et la transformation inverse est donnée par :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk (\exp ikx) \phi'(k). \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned}
\int dp |p\rangle \langle p| \phi(x) &= \frac{1}{N^2} \int dp (\exp ipx/\hbar) \sqrt{2\pi} \phi' \left(\frac{p}{\hbar} \right), & \left(k = \frac{p}{\hbar} \right) \\
&= \frac{\hbar \sqrt{2\pi}}{N^2} \int dk (\exp ikx) \phi'(k) = \frac{2\pi\hbar}{N^2} \phi(x) \\
\implies N &= \sqrt{2\pi\hbar}.
\end{aligned} \tag{1.24}$$

- $|x\rangle$ sont les vecteurs propres de \hat{x} . Or, par définition de l'opérateur \hat{x} , on a :

$$\hat{x}\phi(x) = x\phi(x) \tag{1.25}$$

Une fonction propre ϕ_{x_0} de l'opérateur \hat{x} de valeur propre x_0 satisfait par ailleurs :

$$\hat{x}\phi_{x_0}(x) = x_0\phi_{x_0}(x). \tag{1.26}$$

ϕ_{x_0} doit donc satisfaire l'équation :

$$x\phi_{x_0}(x) = x_0\phi_{x_0}(x) \tag{1.27}$$

pour tout x .

On en déduit que $\phi_{x_0}(x) = 0$ si $x \neq x_0$ et que $\phi_{x_0}(x_0)$ peut prendre n'importe quelle valeur. Mais pour que cette fonction n'ait pas une intégrale nulle, il faut qu'elle soit proportionnelle à la fonction δ de Dirac $\delta(x - x_0)$ définie par :

$$\int \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0) \quad \text{pour toute fonction } f.$$

Pour la normalisation, on va encore imposer une relation de fermeture. Or, le choix

$$|x_0\rangle = |\delta(x - x_0)\rangle \tag{1.28}$$

conduit à la relation de fermeture

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1. \tag{1.29}$$

En effet, $\langle \phi | x \rangle = \phi^*(x)$ et $\langle x | \phi \rangle = \phi(x)$. Ainsi,

$$\langle \phi | x \rangle \langle x | \phi' \rangle = \phi^*(x) \phi'(x) \quad (1.30)$$

$$\implies \int dx \langle \phi | x \rangle \langle x | \phi' \rangle = \int dx \phi^*(x) \phi'(x) = \langle \phi | \phi' \rangle. \quad (1.31)$$

Par ailleurs, la transformée de Fourier de la fonction $\delta(x - x_0)$ est une onde plane :

$$\int \delta(x - x_0) \exp(-ipx/\hbar) dx = \exp(-ipx_0/\hbar). \quad (1.32)$$

La transformation inverse conduit à la relation suivante

$$\int \exp(ipx/\hbar) \exp(-ipx_0/\hbar) dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \delta(x - x_0) \quad (1.33)$$

Le propagateur (ou fonction de Green) est défini par

$$G(x, t; x_0, t_0) = \langle x | U(t, t_0) | x_0 \rangle. \quad (1.34)$$

Si l'on connaît le propagateur pour tout x et tout x_0 , on connaît l'opérateur d'évolution, i.e. la solution de l'équation de Schrödinger.

L'objectif de Feynman était de relier le propagateur au Lagrangien du système classique correspondant. Or, la solution de l'équation de mouvement pour l'opérateur d'évolution s'écrit :

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i(t - t_0)}{\hbar} H\right), \quad (1.35)$$

une expression qui fait intervenir le hamiltonien et non pas le lagrangien.

L'idée de base vient de la remarque suivante : L'hamiltonien H est la somme de deux termes $H = T + V$.

- $V(\hat{x})$ a pour états propres $|x\rangle$: $V(\hat{x})|x\rangle = V(x)|x\rangle$
- $T = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ a pour états propres $|p\rangle$: $T|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle$.

D'autre part, une valeur moyenne de type $\langle x | e^{-\lambda T} e^{-\lambda V} | x_0 \rangle$ est facile à calculer. Il suffit

d'insérer la relation de fermeture $1 = \int dp |p\rangle \langle p|$ (on a posé $\lambda = \frac{i(t-t_0)}{\hbar}$)

$$\begin{aligned} \implies \langle x | e^{-\lambda T} e^{-\lambda V} | x_0 \rangle &= \int dp \langle x | e^{-\lambda T} | p \rangle \langle p | e^{-\lambda V} | x_0 \rangle \\ &= \int dp \langle x | p \rangle e^{-\lambda \frac{p^2}{2m}} \langle p | x_0 \rangle e^{-\lambda V(x_0)}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Malheureusement, comme T et V ne commutent pas ,

$$e^{-\lambda(T+V)} \neq e^{-\lambda T} e^{-\lambda V}. \quad (1.37)$$

Comment faire ?

L'idée de Feynman consiste à utiliser ce qu'on appelle la formule de Trotter qui stipule que

$$\langle x | e^{-\lambda(T+V)} | x_0 \rangle = \lim_{N \rightarrow +\infty} \langle x | e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} \dots e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} | x_0 \rangle. \quad (1.38)$$

La démonstration procède en 3 étapes :

$$\begin{aligned} \bullet e^{-\lambda(T+V)} &= (e^{-\frac{\lambda(T+V)}{N}})^N \\ \bullet e^{-\frac{\lambda(T+V)}{N}} &= e^{-\frac{\lambda T}{N}} e^{-\frac{\lambda V}{N}} + 0 \left(\frac{1}{N^2} \right). \end{aligned} \quad (1.39)$$

En effet,

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon(A+B)} &= I + \varepsilon(A+B) + \frac{\varepsilon^2}{2}(A+B)^2 + \dots \\ \text{et } e^{\varepsilon A} e^{\varepsilon B} &= (I + \varepsilon A + \varepsilon^2 \frac{A^2}{2} + \dots)(I + \varepsilon B + \varepsilon^2 \frac{B^2}{2} + \dots) \\ &= I + \varepsilon A + \varepsilon B + 0(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (1.40)$$

donc

$$e^{\varepsilon(A+B)} = e^{\varepsilon A} e^{\varepsilon B} + 0(\varepsilon^2) \quad (1.41)$$

$$\bullet \left[\left(e^{-\frac{\lambda T}{N}} e^{-\frac{\lambda V}{N}} \right)^N - \left(e^{-\frac{\lambda(T+V)}{N}} \right)^N \right] = 0 \left(\frac{1}{N} \right). \quad (1.42)$$

Pour cela, on remarque d'abord que l'identité

$$x^N - y^N = (x - y) (x^{N-1} + x^{N-2}y + \dots + y^{N-1}) \quad (1.43)$$

pour $x, y \in \mathbb{R}$ doit être réarrangée pour deux opérateurs qui ne commutent pas :

$$x^N - y^N = x^{N-1} (x - y) + x^{N-2} (x - y) y + \dots (x - y) y^{N-1}. \quad (1.44)$$

Dans le membre de droite de cette égalité, tous les termes sont de la forme $x^p y^q$, et ils s'annulent 2 à 2, comme dans l'identité habituelle, sauf x^N et y^N .

Ainsi, $(e^{-\frac{\lambda T}{N}} e^{-\frac{\lambda V}{N}})^N - (e^{-\frac{\lambda(T+V)}{N}})^N$ est la somme de N termes qui contiennent tous $e^{-\frac{\lambda T}{N}} e^{-\frac{\lambda V}{N}} - e^{-\frac{\lambda(T+V)}{N}}$. Comme ce facteur est $0 \left(\frac{1}{N^2} \right)$, la somme est d'ordre $\left(\frac{1}{N} \right)$.

Revenons à l'expression du propagateur :

$$G(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \langle x | e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} \dots e^{-\lambda T/N} e^{-\lambda V/N} | x_0 \rangle \quad (1.45)$$

et insérons des relations de fermeture du type $\int dp |p\rangle \langle p|$ entre $e^{-\lambda T/N}$ et $e^{-\lambda V/N}$, et du type $\int dx |x\rangle \langle x|$ entre $e^{-\lambda V/N}$ et $e^{-\lambda T/N}$. Il vient :

$$\begin{aligned} G(x, t; x_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dp_N e^{-\frac{\lambda p_N^2}{2mN}} \langle x | p_N \rangle \int dx_{N-1} e^{-\frac{\lambda V(x_{N-1})}{N}} \langle p_N | x_{N-1} \rangle \times \\ &\times \int dp_{N-1} e^{-\frac{\lambda p_{N-1}^2}{2mN}} \langle x_{N-1} | p_{N-1} \rangle \int dx_{N-2} e^{-\frac{\lambda V(x_{N-2})}{N}} \langle p_{N-1} | x_{N-2} \rangle \times \\ &\times \dots \int dp_1 e^{-\frac{\lambda p_1^2}{2mN}} \langle x_1 | p_1 \rangle e^{-\frac{\lambda V(x_0)}{N}} \langle p_1 | x_0 \rangle \end{aligned} \quad (1.46)$$

L'expression devient donc l'intégrale du produit de facteurs de la forme

$$\int dp \langle x | e^{-\lambda T/N} | p \rangle \langle p | e^{-\lambda V/N} | y \rangle = \int dp e^{-\frac{\lambda p^2}{2mN}} \langle x | p \rangle e^{-\frac{\lambda V(y)}{N}} \langle p | y \rangle. \quad (1.47)$$

Mais $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$. L'intégrale devient

$$\frac{e^{-\frac{\lambda V(y)}{N}}}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{-\lambda p^2}{2mN}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(x-y)\right). \quad (1.48)$$

C'est une intégrale gaussienne.

Or

$$\begin{aligned} z(j) &= \int dx e^{\frac{-1}{2}Ax^2+jx} = \sqrt{\frac{2\pi}{A}} e^{\frac{j^2}{2A}} \\ A &\Leftrightarrow \frac{\lambda}{mN}, \quad j \Leftrightarrow \frac{i}{\hbar}(x-y) \\ &\Rightarrow \frac{e^{-\frac{\lambda V(y)}{N}}}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{-\lambda p^2}{2mN}} e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} = \frac{e^{-\frac{\lambda V(y)}{N}}}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi mN}{\lambda}} e^{-\frac{(x-y)^2 mN}{2\lambda\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Cette expression reste valable si λ est imaginaire pur à condition d'interpréter \sqrt{i} comme $\exp(i\pi/4)$. On en déduit l'expression suivante pour G :

$$\begin{aligned} G(x, t; x_0, t_0) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{mN}{2\pi\lambda\hbar^2}\right)^{\frac{N}{2}} \times \\ &\times \prod_{j=0}^{N-1} \exp\left[\frac{-m(x_{j+1} - x_j)^2 N}{2\lambda\hbar^2} - \frac{\lambda V(x_j)}{N}\right], \end{aligned} \quad (1.50)$$

avec $x_N \equiv x$.

Posons

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{(t-t_0)}{N} = \frac{\lambda\hbar}{iN} \implies \lambda = \frac{iN\varepsilon}{\hbar}. \quad \text{On a :} \\ \frac{-N}{\lambda\hbar^2} &= \frac{-N\hbar}{\hbar^2 iN\varepsilon} = \frac{i}{\hbar\varepsilon} \\ -\frac{\lambda}{N} &= -\frac{i\varepsilon}{\hbar} \end{aligned} \quad (1.51)$$

Le propagateur peut donc être réécrit :

$$G(x, t, x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \times \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_j) \right] \right\}. \quad (1.52)$$

L'expression $\varepsilon \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} \right)^2 - V(x_j) \right]$ rappelle une somme de Riemann. En effet, $\varepsilon = \frac{(t-t_0)}{N}$. Considérons une fonction dérivable $x(s)$ définie entre t_0 et t , et exprimons l'intégrale

$$\int_{t_0}^t ds \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{ds} \right)^2 - V(x(s)) \right] \quad (1.53)$$

sous forme d'une somme de Riemann :

$$\int_{t_0}^t ds \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] = \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{t-t_0}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x_j).$$

Mais

$$\begin{aligned} \dot{x}_j &\approx \frac{x_{j+1} - x_j}{(t-t_0)/N}, \\ \Rightarrow \int_{t_0}^t ds \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] &= \\ \lim_{N \rightarrow +\infty} \left(\frac{t-t_0}{N} \right) \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{(t-t_0)/N} \right)^2 - V(x_j) \right]. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Or, $\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x)$ n'est rien d'autre que le Lagrangien, et $\int_{t_0}^t ds L(x, \dot{x}, s)$ est l'action le long de la trajectoire $x(s)$.

Ceci suggère d'écrire le propagateur sous la forme

$$G(x, t; x_0, t_0) = \int Dx e^{\frac{i}{\hbar} S[x]} \quad (1.55)$$

où le symbole $\int Dx$ désigne la somme sur tous les chemins possibles, modulo une mesure qui reste à définir. Le propagateur apparaît donc comme la somme de $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x]\right)$ sur tous les chemins

possibles du système (voir Appendice ; Figure1). Cet objet s'appelle une intégrale fonctionnelle. Cette écriture est très suggestive, mais elle est purement formelle, et pour lui donner un sens, autrement dit pour définir la mesure $\int Dx$, il faut impérativement revenir à la forme explicite. C'est d'autant plus vrai que le chemin typique n'est pas différentiable : comme x_j et x_{j+1} prennent toutes les valeurs entre $-\infty$ et $+\infty$, $\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}$, ne tend pas vers une constante mais diverge quand $N \rightarrow +\infty$.

Ceci étant dit, cette formulation répond à la question que s'était posée Feynman (et avant lui Dirac) sur la possibilité de formuler la mécanique quantique à l'aide du Lagrangien. Avec la définition de l'intégrale fonctionnelle donnée par la correspondance entre les deux expressions précédentes du propagateur, la mécanique quantique peut être basée sur cette définition du propagateur. En d'autres termes, on peut faire l'économie de la quantification canonique et prendre cette expression du propagateur pour quantifier le mouvement d'une particule dans un potentiel.

La difficulté essentielle de cette méthode, c'est qu'elle ne fournit pas de façon interne la définition de l'intégrale fonctionnelle. Il faut par exemple rajouter une prescription pour obtenir une expression qui redonne l'équation de Schrödinger en présence d'un champ magnétique . De même, en théorie quantique des champs, le sens qu'il faut donner à l'intégrale se réfère à la quantification canonique.

Notons que la généralisation à N degrés de liberté est sans problème : les intégrales intermédiaires sont des intégrales de volume à N dimensions : $dx_i \rightarrow d^N x_i$.

ex :particule libre ($V = 0$)

Dans ce cas, le propagateur se calcule facilement :

$$\begin{aligned}
 \langle x | e^{-\lambda T} | x_0 \rangle &= \int dp \langle x | e^{-\lambda T} | p \rangle \langle p | x_0 \rangle = \int dp e^{\frac{-\lambda p^2}{2m}} \frac{e^{ipx/\hbar} e^{-ipx_0/\hbar}}{2\pi\hbar} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{-\lambda p^2}{2m}} e^{ip(x-x_0)/\hbar} \\
 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m}{\lambda}} \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2 m}{\hbar^2 2\lambda} \right] \\
 &\quad \left(A = \frac{\lambda}{m}, \quad j = \frac{i(x-x_0)}{\hbar} \right)
 \end{aligned} \tag{1.56}$$

soit :

$$\langle x | e^{-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} \frac{p^2}{2m}} | x_0 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar (t-t_0)} (x-x_0)^2 \right]. \quad (1.57)$$

Or, pour une particule libre, l'action se calcule aisément. La trajectoire classique est donnée par :

$$\begin{aligned} x(\tau) &= x_0 + \frac{\tau-t_0}{t-t_0} (x-x_0) \\ \implies S_{cl} &= \int_{t_0}^t d\tau L(x, \dot{x}) = \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 \\ &= \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{2} m \left(\frac{x-x_0}{t-t_0} \right)^2 = \frac{1}{2} m \frac{(x-x_0)^2}{t-t_0} \\ \implies G(x, t; x_0, t_0) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t-t_0)}} \exp \left(\frac{iS_{cl}}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (1.58)$$

L'objet de ce travail est de solutionner quelques problèmes par l'approche des intégrales de chemins en se servant de la technique des transformations spatio-temporelles ainsi que des outils mathématiques indispensables pour les résoudre le plus simplement possible. Toutes les fois que cela est possible, les fonctions d'onde et les spectres correspondant sont comparés à ceux obtenus dans le cadre de la mécanique classique et de la mécanique quantique.

Le premier chapitre constitue un rappel historique des formulations habituelles de la mécanique quantique (principe d'action, mécanique des matrices de Heisenberg, la mécanique ondulatoire de Schrödinger) avec les succès réalisés mais aussi les difficultés rencontrées. L'intégrale de chemin est présentée comme une nouvelle formulation qui offre un point de vue alternatif à la mécanique quantique et qui s'est révélée un formalisme mathématique très fécond pour l'étude de toutes les disciplines de la physique théorique [Cours du Professeur Frédéric Mila, EPFL (Mécanique quantique avancée II : Introduction à l'intégrale de chemin)].

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude du mouvement d'une particule libre mais astreinte à se déplacer sur la surface d'un cône au moyen d'une contrainte représentant l'équation du cône [11]. Grâce à des transformations successivement spatiale et temporelle convenablement choisies, les variables ont été séparées, le spectre continu de l'énergie et les fonctions d'onde ont

été exactement déduits.

Dans le troisième chapitre nous avons reconsidéré le problème traité précédemment. Cette même particule subie maintenant l'action d'un oscillateur quadratique inverse [12]. Comme le potentiel présente une singularité à l'origine, il a paru nécessaire de rejeter cette singularité à l'infini par l'utilisation d'une transformation spatiale suivie d'une transformation temporelle. La fonction de Green de ce système est ramenée à celle associée à un potentiel de type Morse dont la solution est connue depuis longtemps. Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde des états liés ont été obtenus.

Le quatrième chapitre concerne l'étude, par l'approche de l'intégrale de chemin dans l'espace des phases, de deux problèmes sur un cercle en l'occurrence le problème de l'oscillateur singulier et le problème de Coulomb singulier. La technique utilisée est basée essentiellement sur la fonctionnelle delta de Dirac et le formalisme Hamiltonien. L'expression du propagateur de l'oscillateur singulier a été développée avec un maximum de détails et de clarté. Le spectre discret de l'énergie est exact et concorde parfaitement avec celui de la littérature [17] par contre les fonctions d'onde n'ont pas été convenablement déduites. Grâce à une transformation-dualité, nous avons établi une relation entre le système de Coulomb singulier et celui de l'oscillateur singulier. Ce lien est à l'origine de la similitude de la forme des deux propagateurs. Pour les deux problèmes, le propagateur a été ramené à celui du problème bien connu de Pöschl-Teller abordé auparavant dans le cadre de la formulation de Schrödinger et celle de l'intégrale de chemin dans l'espace de configurations. Autrement dit, la transformation -dualité nous a permis de déduire de manière fructueuse et élégante les solutions du problème de Coulomb singulier à partir de celles du problème de l'oscillateur singulier.

Chapitre 2

Particule libre sur un cône

Ce chapitre est consacré à l'étude du mouvement d'une particule se déplaçant sur la surface d'un cône. Nous commençons cette étude par le cas simple d'une particule libre astreinte à se déplacer sur la topologie du cône via une contrainte bien définie. Nous allons voir que l'effet de la contrainte liée à la topologie du cône se traduit par l'apparition d'un potentiel effectif d'ordre quantique. Pour ce faire, nous construisons tout d'abord le propagateur relatif au problème dans le formalisme des intégrales de chemins, puis nous déduisons le spectre des énergies relatif à la particule libre et leurs fonctions d'ondes associées.

Considérons une particule non relativiste de masse m astreinte à se mouvoir sur un cône via la contrainte

$$z = \sqrt{(\alpha^{-2} - 1)r}, \quad 0 < \alpha \leq 1. \quad (2.1)$$

Le Lagrangien régissant l'évolution de la particule est obtenu en soustrayant l'énergie potentiel V de l'énergie cinétique T ,

$$L = T - V = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V. \quad (2.2)$$

Comme le potentiel est nul, le Lagrangien précédent exprimé dans les coordonnées cylindriques pourrait, en vertu de la contrainte (2.1), s'exprimer dans les coordonnées polaires (r, θ) comme

$$L = \frac{m}{2\alpha^2} (\dot{r}^2 + \alpha^2 r^2 \dot{\theta}^2). \quad (2.3)$$

Faisons le changement de variable ($\theta \rightarrow \phi$) : $\phi = \alpha\theta$ d'où $0 \leq \phi \leq 2\pi\alpha$ et pour étendre l'intégrale à tout le domaine i.e. de zéro à 2π , on introduit un potentiel $V(\phi)$ défini par

$$V(\phi) = \begin{cases} 0 & 0 \leq \phi \leq 2\pi\alpha \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}. \quad (2.4)$$

Par conséquent, en passant au système (r, ϕ) , le Lagrangien (2.5) prend la forme

$$L = \frac{M}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \right) - V(\phi). \quad (2.5)$$

avec $M = m\alpha^{-2}$.

Il peut être remarqué que l'introduction du potentiel $V(\phi)$ limite le mouvement libre de la particule à l'intérieur du secteur d'ouverture angulaire $\phi = 2\pi\alpha$ ($0 < \alpha \leq 1$).

2.1 Le propagateur

Le propagateur associé à une particule de masse m , soumise à un potentiel bidimensionnel $V(x, y)$, s'écrit formellement dans les coordonnées cartésiennes comme

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \int \mathcal{D}x(t) \int \mathcal{D}y(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - V(x, y) \right] dt \right\}, \quad (2.6)$$

ou sous une forme discrète comme

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j dy_j \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right), \quad (2.7)$$

où $S(j, j-1)$ est l'action isométrique sur la distance infinitésimale ϵ durant un laps de temps $[t_{j-1}, t_j]$,

$$S(j, j-1) = \frac{M}{2\epsilon} (\Delta x_j^2 + \Delta y_j^2) - \epsilon V(\tilde{x}_j, \tilde{y}_j), \quad (2.8)$$

avec la notation standard

$$\begin{aligned}
\epsilon &= t_j - t_{j-1}, & T &= t_f - t_i = \epsilon N, \\
\Delta u_j &= u_j - u_{j-1}, & \tilde{u}_j &= \frac{u_j + u_{j-1}}{2}, \\
u_j &= u(t_j), & u_i &= u(t_i), & u_f &= u(t_f), \\
\mathbf{r}_i &= (x_i, y_i) & \mathbf{r}_f &= (x_f, y_f).
\end{aligned} \tag{2.9}$$

En se plaçant dans le système des coordonnées polaires (r, ϕ) associé aux coordonnées cartésiennes (x, y)

$$x_j = r_j \cos \phi_j, \quad y_j = r_j \sin \phi_j, \tag{2.10}$$

le propagateur (2.7) devient

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\phi_j \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right), \tag{2.11}$$

où

$$S(j, j-1) = \frac{M}{2\epsilon} [\Delta r_j^2 + 2r_j r_{j-1} (1 - \cos \Delta \phi_j)] - \epsilon V(\tilde{\phi}_j). \tag{2.12}$$

Notons que la mesure n'est pas symétrique. Néanmoins, nous pouvons symétriser la mesure en faisant usage de la procédure de l'expansion au voisinage du point moyen \tilde{u}_j , (2.9), et en tenant compte du fait que les extrêmes du $j^{\text{ième}}$ intervalle $[j, j-1]$ doivent jouer le même rôle dans l'expression du propagateur. Sachant que $\Delta r_j^2 \sim \epsilon$, la mesure peut se transformer en

$$\begin{aligned}
\prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\phi_j &= \frac{1}{\sqrt{r_0 r_N}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \sqrt{\tilde{r}_j^2 - \frac{\Delta r_j^2}{4}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{r_0 r_N}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \left(1 - \frac{\Delta r_j^2}{8\tilde{r}_j^2} \right),
\end{aligned} \tag{2.13}$$

et l'action en

$$\begin{aligned}
S(j, j-1) &= \frac{M}{2\epsilon} \left[\Delta r_j^2 + 2 \left(\tilde{r}_j^2 - \frac{\Delta r_j^2}{4} \right) \left(\frac{\Delta \phi_j^2}{2!} - \frac{\Delta \phi_j^4}{4!} \right) \right] - \epsilon V(\tilde{\phi}_j) \\
&= \frac{M}{2\epsilon} (\Delta r_j^2 + \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^2) - \epsilon V(\tilde{\phi}_j) - \frac{M}{8\epsilon} \left(\Delta r_j^2 \Delta \phi_j^2 + \frac{1}{3} \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^4 \right),
\end{aligned} \tag{2.14}$$

où nous n'avons retenu que les termes $\Delta r_j^2 \Delta \phi_j^2$ et $\Delta \phi_j^4$ qui sont tous d'ordre ϵ^2 . Nous écrivons donc

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1)\right) &= \prod_{j=1}^N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(j, j-1)\right) \\ &= \prod_{j=1}^N \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{M}{8\epsilon} \left(\Delta r_j^2 \Delta \phi_j^2 + \frac{1}{3} \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^4\right)\right] \times \\ &\quad \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{M}{2\epsilon} (\Delta r_j^2 + \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^2) - \epsilon V(\tilde{\phi}_j)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

En reportant (2.13) et (2.15) dans (2.11), le propagateur peut être réécrit dans les coordonnées polaires comme

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) &= \frac{1}{\sqrt{r_i r_f}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \times \\ &\quad \times \left[1 - \frac{\Delta r_j^2}{8\tilde{r}_j^2} - \frac{i}{\hbar} \frac{M}{8\epsilon} \left(\Delta r_j^2 \Delta \phi_j^2 + \frac{1}{3} \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^4\right)\right] \times \\ &\quad \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\epsilon} (\Delta r_j^2 + \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^2) - \epsilon V(\tilde{\phi}_j)\right]\right\}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Appliquons maintenant la procédure de Mc Laughlin-Schulman [2]. Autrement dit, faisons usage de l'identité

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^{2n} \exp\left(-\frac{a}{2b} u^2\right) du = \frac{(2n-1)!!}{(a/b)^n} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{a}{2b} u^2\right) du. \quad (2.17)$$

Ceci nous amène à apporter au propagateur précédent les substitutions suivantes

$$\Delta \phi_j^4 \longrightarrow \frac{3}{\tilde{r}_j^4} \left(\frac{i\hbar\epsilon}{M}\right)^2, \quad \Delta r_j^2 \Delta \phi_j^2 \longrightarrow \frac{1}{\tilde{r}_j^2} \left(\frac{i\hbar\epsilon}{M}\right)^2, \quad \Delta r_j^2 \longrightarrow \frac{i\hbar\epsilon}{M}. \quad (2.18)$$

Il s'ensuit que

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \frac{1}{\sqrt{r_i r_f}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \tilde{r}_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N A(j, j-1)\right), \quad (2.19)$$

avec

$$A(j, j-1) = \frac{M}{2\varepsilon} \left(\Delta r_j^2 + \tilde{r}_j^2 \Delta \phi_j^2 \right) - \epsilon \left(V(\tilde{\phi}_j) + \Delta V_j \right), \quad \Delta V_j = -\frac{\hbar^2}{8M\tilde{r}_j^2}, \quad (2.20)$$

où nous avons utilisé le fait que l'expression $1 + \frac{i\hbar\epsilon}{8M\tilde{r}_j^2}$ peut être approximée par $\exp \frac{i\hbar\epsilon}{8M\tilde{r}_j^2}$.

Nous avons vu s'introduire un terme centrifuge supplémentaire, ΔV_j , appelé *correction quantique*, qui ne dépend pas du potentiel initial et est de l'ordre \hbar^2 .

Il s'avère que la forme du propagateur est tellement compliquée pour des calculs explicites, entre autres, la difficulté d'intégrer sur les variables radiales et angulaires r_j et ϕ_j . Nous contournerons ce problème en adoptant la transformation temporelle $t \rightarrow s$ définie par

$$\frac{dt}{ds} = r^2(s). \quad (2.21)$$

qui est équivalente à

$$T = \int_0^S ds r^2(s), \quad (2.22)$$

ou par discrétisation,

$$\epsilon = \sigma_j r_j r_{j-1} = \sigma_j \left(\tilde{r}_j^2 - \frac{\Delta r_j^2}{4} \right) = \sigma_j \tilde{r}_j^2 \left(1 - \frac{\Delta r_j^2}{4\tilde{r}_j^2} \right). \quad (2.23)$$

2.2 Fonction de Green

En introduisant la fonction de Green $G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E)$

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^\infty dT K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) \exp \left(\frac{i}{\hbar} ET \right), \quad (2.24)$$

qui est la transformée de Fourier du propagateur $K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T)$, et en utilisant la contrainte (2.22) nous obtenons

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \sqrt{r_i r_f} \int_0^\infty dS P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S), \quad (2.25)$$

où le promoteur $P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S)$ est donné par

$$\begin{aligned}
P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right) \frac{1}{\tilde{r}_j} \left(1 + \frac{\Delta r_j^2}{4\tilde{r}_j^2} \right) \times \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\sigma_j} \left(1 + \frac{\Delta r_j^2}{4\tilde{r}_j^2} \right) \left(\frac{\Delta r_j^2}{\tilde{r}_j^2} + \Delta\phi_j^2 \right) - \right. \right. \\
&\left. \left. - \sigma_j \tilde{r}_j^2 \left(V(\tilde{\phi}_j) - E - \frac{\hbar^2}{8M\tilde{r}_j^2} \right) \right] \right\}, \tag{2.26}
\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right) \frac{1}{\tilde{r}_j} \left[1 + \frac{\Delta r_j^2}{4\tilde{r}_j^2} + \frac{i}{\hbar} \frac{M}{8\sigma_j} \left(\frac{\Delta r_j^4}{\tilde{r}_j^4} + \frac{\Delta r_j^2 \Delta\phi_j^2}{\tilde{r}_j^2} \right) \right] \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\sigma_j} \left(\frac{\Delta r_j^2}{\tilde{r}_j^2} + \Delta\phi_j^2 \right) - \sigma_j \tilde{r}_j^2 \left(V(\tilde{\phi}_j) - E - \frac{\hbar^2}{8M\tilde{r}_j^2} \right) \right] \right\}, \tag{2.27}
\end{aligned}$$

où nous avons remplacé ϵ par son expression (2.23). En faisant maintenant intervenir les changements (toujours par application de la procédure de Mc Laughlin-Schulman, (2.17))

$$\Delta r_j^2 \longrightarrow \tilde{r}_j^2 \frac{i\hbar\sigma_j}{M}, \quad \Delta r_j^4 \longrightarrow 3\tilde{r}_j^4 \left(\frac{i\hbar\sigma_j}{M} \right)^2, \quad \Delta r_j^2 \Delta\phi_j^2 \longrightarrow \tilde{r}_j^2 \left(\frac{i\hbar\sigma_j}{M} \right)^2, \tag{2.28}$$

le promoteur s'écrit de manière plus commode comme

$$\begin{aligned}
P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j d\phi_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right) \frac{1}{\tilde{r}_j} \times \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\sigma_j} \left(\frac{\Delta r_j^2}{\tilde{r}_j^2} + \Delta\phi_j^2 \right) - \sigma_j \tilde{r}_j^2 \left(V(\tilde{\phi}_j) - E + \frac{\hbar^2}{8M\tilde{r}_j^2} \right) \right] \right\}, \tag{2.29}
\end{aligned}$$

où nous avons tenu compte du fait que l'expression $1 - \frac{i\hbar\epsilon}{4M\tilde{r}_j^2}$ est approximée par $\exp(-\frac{i\hbar\epsilon}{4M\tilde{r}_j^2})$.

Le promoteur peut être réécrit sous une forme plus formelle comme

$$P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = \frac{1}{\alpha} \int \frac{1}{r(s)} \mathcal{D}r(s) \mathcal{D}\theta(s) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^S L(r, \dot{r}, \theta, \dot{\theta}) ds \right), \quad (2.30)$$

où nous avons, pour simplifier les notations, revenu à la variable θ ($\theta = \phi/\alpha$) avec

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}r(s)}{r(s)} &\equiv \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \frac{1}{\tilde{r}_j}, \\ \mathcal{D}\theta(s) &\equiv \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

$L(r, \dot{r}, \theta, \dot{\theta})$ est le pseudo-Lagrangien

$$L(r, \dot{r}, \theta, \dot{\theta}) = \frac{M}{2} \left(\frac{\dot{r}^2}{r^2} + \alpha^2 \dot{\theta}^2 \right) - r^2 \left(V(\tilde{\theta}_j) - E \right) - \frac{\hbar^2}{8M}. \quad (2.32)$$

La correction quantique $-\hbar^2/8M$ joue le rôle d'une pseudo-énergie, canoniquement associée au pseudo-temps s . Il est important de noter que la forme particulière du potentiel $V(\theta)$ (2.4) va nous permettre d'intégrer sur la variable θ .

Nous allons dans ce qui suit effectuer le calcul par l'intermédiaire de la formule de sommation de Poisson [3],

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} f(l) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\mu) \exp(2\pi i \mu n). \quad (2.33)$$

Posons d'abord

$$I = \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2\sigma_j} \Delta\theta_j^2 \right) \right], \quad (2.34)$$

Nous pouvons écrire

$$I = \prod_{j=1}^N \sum_{n_j=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2\sigma_j} (\Delta\theta_j + 2\pi n_j)^2 \right) \right], \quad (2.35)$$

où nous avons, pour permettre l'application de la formule de sommation de Poisson, d'abord

introduit l'indice de sommation $\sum_{n_j=-\infty}^{\infty}$ via la condition de périodicité sous la transformation $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$

$$f(\theta) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(\theta + 2\pi l). \quad (2.36)$$

Il vient que

$$I = \prod_{j=1}^N \sum_{n_j=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \exp \left[\sum_{j=1}^N \left(\frac{iM\alpha^2}{2\hbar\sigma_j} (\Delta\theta_j + 2\pi\mu)^2 - 2i\pi n_j \mu \right) \right]. \quad (2.37)$$

En utilisant l'intégrale de Gauss,

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-a\lambda^2 + b\lambda + c) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right), \quad (2.38)$$

l'expression (2.37) peut être linéarisée comme

$$I = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^N \prod_{j=1}^N \sum_{n_j=-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\hbar n_j \Delta\theta_j - \frac{\hbar^2 n_j^2 \sigma_j}{2M\alpha^2} \right) \right]. \quad (2.39)$$

D'autre part, nous pouvons aisément effectuer la décomposition suivante

$$\prod_{j=1}^N \exp[i n_j \Delta\theta_j] = \exp[i(n_N \theta_N - n_1 \theta_0)] \prod_{j=1}^{N-1} \exp[i(n_j - n_{j+1}) \theta_j]. \quad (2.40)$$

Alors, l'intégration sur la variable θ est devenue immédiate. Compte tenu du résultat (2.40), l'expression (2.39) se transforme finalement, après avoir intégré sur la variable θ , en

$$I = \frac{1}{2\pi} \prod_{j=1}^N \sum_{n_j=-\infty}^{\infty} \exp[i(n_N \theta_N - n_1 \theta_0)] \prod_{j=1}^{N-1} \delta_{n_j, n_{j+1}} \prod_{j=1}^N \exp\left(-\frac{i \hbar^2 n_j^2 \sigma_j}{\hbar 2M\alpha^2}\right), \quad (2.41)$$

ou encore

$$I = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[in(\theta_f - \theta_i)] \prod_{j=1}^N \exp\left(-\frac{i \hbar^2 n^2 \sigma_j}{\hbar 2M\alpha^2}\right), \quad (2.42)$$

où les indices n_j sont rendus tous égaux à n grâce au delta de Kronecker,

$$\delta_{n_j, n_{j+1}} = \begin{cases} 1 & n_j = n_{j+1} \\ 0 & n_j \neq n_{j+1} \end{cases}.$$

Il est à noter que le delta de Kronecker est obtenu lors de l'intégration sur la variable θ , à savoir

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\theta_j \exp[i(n_j - n_{j+1})\theta_j] &= \begin{cases} 2\pi & n_j = n_{j+1} \\ \frac{\exp[2\pi i(n_j - n_{j+1})] - 1}{i(n_j - n_{j+1})} = 0 & n_j \neq n_{j+1} \end{cases} \\ &= 2\pi \delta_{n_j, n_{j+1}}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Comme le potentiel V est nul pour θ appartenant à l'intervalle $[0, 2\pi]$ (2.4), le promoteur (2.30) et la fonction de Green (2.25) s'écrivent, compte tenu du résultat (2.42), respectivement

$$\begin{aligned} P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\alpha} \exp[in(\theta_f - \theta_i)] \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \frac{1}{\tilde{r}_j} \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\sigma_j} \frac{\Delta r_j^2}{\tilde{r}_j^2} + \sigma_j \tilde{r}_j^2 E - \frac{\hbar^2 \sigma_j}{2M} \left(\frac{n^2}{\alpha^2} + \frac{1}{4} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) &= \sqrt{r_i r_f} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\alpha} \exp[in(\theta_f - \theta_i)] \int_0^\infty dS \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \frac{1}{\tilde{r}_j} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\sigma_j} \frac{\Delta r_j^2}{\tilde{r}_j^2} + \sigma_j \tilde{r}_j^2 E - \frac{\hbar^2 \sigma_j}{2M} \left(\frac{n^2}{\alpha^2} + \frac{1}{4} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

ou de manière concise

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \frac{\sqrt{r_i r_f}}{2\pi\alpha} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[in(\theta_f - \theta_i)] \int_0^\infty dS \int \frac{\mathcal{D}r(s)}{r(s)} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^S L'(r, \dot{r}) ds \right), \quad (2.46)$$

où

$$L'(r, \dot{r}) = \frac{M}{2} \frac{\dot{r}^2}{r^2} + r^2 E - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{n^2}{\alpha^2} + \frac{1}{4} \right) \quad (2.47)$$

est le nouveau pseudo-Lagrangien.

Il est bon de remarquer que la transformation temporelle $s \rightarrow t$ se traduit par les changements

$$-\frac{\hbar^2}{8Mr^2} \longrightarrow \frac{\hbar^2}{8Mr^2}, \quad \sqrt{r_i r_f} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{r_i r_f}}, \quad (2.48)$$

comme nous le voyons directement dans les expressions (2.19) et (2.25). Donc, pour revenir maintenant à l'ancienne variable temporelle t , par le biais de l'équation (2.21), il suffit de procéder aux changements inverses des expressions mentionnées ci-dessus. La fonction de Green devient alors

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \frac{1}{2\pi\alpha\sqrt{r_i r_f}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[in(\theta_f - \theta_i)] \int_0^{\infty} dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) \times \\ \times \int \mathcal{D}r(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{M}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \left(\frac{n^2}{\alpha^2} - \frac{1}{4}\right)\right] dt\right\}. \quad (2.49)$$

Il est à remarquer que l'intégrale de chemin sur la variable r coïncide exactement, dans le cas d'une fréquence nulle, $\omega = 0$, avec celle de l'oscillateur quadratique inverse avec un moment orbital n/α , dont la solution est donnée comme suit [4]

$$\int \mathcal{D}r(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{M}{2} \dot{r}^2 - \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \left(\frac{n^2}{\alpha^2} - \frac{1}{4}\right)\right] dt\right\} = \sqrt{r_i r_f} \frac{M}{i\hbar T} \exp\left[\frac{iM}{2\hbar T} (r_i^2 + r_f^2)\right] \times \\ \times I_{|\frac{n}{\alpha}|} \left(\frac{M}{i\hbar T} r_i r_f\right).$$

Maintenant, en vue d'obtenir les énergies et leurs fonctions d'onde associées, faisons usage de la formule suivante [8], pour séparer r_i , r_f et T

$$\int_0^{\infty} dx \exp(-\omega x) J_{\nu}(2\beta\sqrt{x}) J_{\nu}(2\gamma\sqrt{x}) = \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\beta^2 + \gamma^2}{\omega}\right) I_{\nu}\left(\frac{2\beta\gamma}{\omega}\right), \quad (2.50)$$

valable pour $\text{Re } \nu > -1$ où

$$\nu = \left|\frac{n}{\alpha}\right|, \quad \beta = \sqrt{\frac{M}{2}} \frac{r_f}{\hbar}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{M}{2}} \frac{r_i}{\hbar}, \quad \omega = \frac{iT}{\hbar}, \quad (2.51)$$

$J_{\nu}(x)$ et $I_{\nu}(y)$ sont respectivement les fonctions de Bessel et les fonctions de Bessel modifiées.

Ainsi, le propagateur peut s'écrire

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) &= \frac{M}{2\pi\alpha\hbar^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[in(\theta_f - \theta_i)] \int_0^{\infty} dE \exp\left(-\frac{iT}{\hbar}E\right) \times \\
&\times J_{|\frac{n}{\alpha}|} \left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} r_f \right) J_{|\frac{n}{\alpha}|} \left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} r_i \right), \tag{2.52}
\end{aligned}$$

ce qui nous permet finalement, à partir de la décomposition spectrale, de déduire les fonctions d'onde, normalisées, à l'échelle de l'énergie

$$\psi_{E, n}(r, \theta) = \sqrt{\frac{M}{2\pi\alpha\hbar^2}} \exp(in\theta) J_{|\frac{n}{\alpha}|} \left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} r \right), \tag{2.53}$$

et un spectre continu d'énergie

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \tag{2.54}$$

Il est important de remarquer que les fonctions d'onde obtenues (2.53) ne satisfont pas les conditions de confinement du mouvement de la particule dans le secteur d'ouverture angulaire ϕ [$0 \leq \phi \leq 2\pi\alpha$; $0 < \alpha \leq 1$] d'où la reconsidération de l'intégration sur la variable angulaire θ . Pour ce faire, nous utilisons l'intégrale de chemin relative au rotateur rigide[15]

$$\begin{aligned}
&\int D\theta(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{M}{2} \alpha^2 \dot{\theta}^2 + \frac{\hbar^2(l^2 - 1/4)}{2M\alpha^2 \sin^2 \theta} \right] \right\} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(n+l+1/2)^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] (n+l+1/2) \frac{(n+2l)!}{n!} \times \\
&\times (\sin \theta_f \sin \theta_i)^{1/2} P_{n+l}^{-l}(\cos \theta_f) P_{n+l}^{-l}(\cos \theta_i), \tag{2.55}
\end{aligned}$$

$P_l^j(\cos \theta)$ sont les fonctions de Legendre.

Le terme $\frac{\hbar^2(l^2-1/4)}{2M\alpha^2 \sin^2 \theta}$ est éliminé en posant $l = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}
\int D\theta(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^S \frac{M}{2} \alpha^2 \dot{\theta}^2 ds \right] &= \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(n+1)^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] (n+1)^2 \times \\
&\times (\sin \theta_f \sin \theta_i)^{1/2} P_{n+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_f) P_{n+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_i). \tag{2.56}
\end{aligned}$$

Ensuite, en tenant compte de la relation entre les fonctions de Legendre et la fonction trigonométrique sinus [8]

$$P_{\nu-1/2}^{-1/2}(\cos \theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta}} \frac{\sin \nu \theta}{\nu} \quad \text{avec } \nu = n + 1, \quad (2.57)$$

qui conduit aux relations suivantes :

$$\begin{aligned} P_{n+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_f) &= \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta_f}} \frac{\sin(n+1)\theta_f}{(n+1)}, \\ P_{n+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_i) &= \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta_i}} \frac{\sin(n+1)\theta_i}{(n+1)}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

nous pouvons donner à l'intégrale fonctionnelle sur les chemins θ l'expression suivante

$$\begin{aligned} \int D_\theta(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^S \frac{M}{2} \alpha^2 \dot{\theta}^2 ds \right] &= \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(n+1)^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] \sin(n+1)\theta_f \sin(n+1)\theta_i \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{n^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] \sin n\theta_f \sin n\theta_i, \end{aligned} \quad (2.59)$$

où nous avons changé $(n+1)$ en n .

En substituant ce résultat dans l'expression (2.44) du promoteur, ce dernier apparaît sous la forme

$$\begin{aligned} P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{\pi \alpha} \sin n\theta_f \sin n\theta_i \int \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{1/2} \frac{1}{\tilde{r}_j} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\sigma_j} \frac{\Delta r_j^2}{\tilde{r}_j^2} + \sigma_j \tilde{r}_j^2 E - \frac{\hbar^2 \sigma_j}{2M} \left(\frac{n^2}{\alpha^2} + \frac{1}{4} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

En suivant les mêmes étapes du calcul pour l'intégrale fonctionnelle sur la variable radiale r , le propagateur du système s'écrit

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) &= \frac{2M}{\pi\alpha\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sin n\theta_f \sin n\theta_i \int_0^{\infty} dE \exp\left(-\frac{iT}{\hbar}E\right) \times \\
&\quad \times J_{\frac{n}{\alpha}}\left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}r_f\right) J_{\frac{n}{\alpha}}\left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}r_i\right).
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Ainsi, les fonctions d'onde s'expriment dans le plan de l'énergie comme

$$\psi_{E, n}(r, \theta) = \sqrt{\frac{2M}{\pi\alpha\hbar^2}} \sin n\theta J_{\frac{n}{\alpha}}\left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}r\right). \tag{2.62}$$

2.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le mouvement d'une particule libre astreinte à se déplacer sur la surface d'un cône. Pour effectuer les calculs, nous avons adopté le principe privilégié dit prescription du mid-point et utilisé une transformation spatiale adaptée qui restreint le mouvement de la particule à l'intérieur d'un secteur. Le propagateur a été évalué d'une manière claire et simple. Les fonctions d'onde et le spectre correspondant, ont été convenablement déduits. Nos résultats sont en accord avec ceux obtenus par la théorie de Schrödinger.

Chapitre 3

Traitement du mouvement d'une particule sur un cône et soumise à un potentiel quadratique inverse

Dans ce chapitre, nous considérons de nouveau le problème de la particule de masse m évoluant sur la surface d'un cône et soumise en plus à l'action d'un potentiel quadratique inverse de la forme.

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + \frac{g}{r^2}. \quad (3.1)$$

Le Lagrangien régissant l'évolution de la particule est déterminé en coordonnées cartésiennes par l'expression suivante

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) - \frac{g}{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (3.2)$$

La contrainte qui oblige la particule à rester sur le cône est définie par

$$z = (\alpha^{-2} - 1)^{1/2} \sqrt{x^2 + y^2}, \quad 0 < \alpha \leq 1. \quad (3.3)$$

Cette restriction représente l'équation du cône.

Comme le potentiel est central, les coordonnées polaires (r, θ) sont les plus adéquates pour le calcul du propagateur

$$\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \end{cases} \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi$$

Avec ces coordonnées, le Lagrangien s'écrit comme

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{m}{2} \left(\alpha^{-2} \dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) - \frac{1}{2} m \alpha^{-2} \omega^2 r^2 - \frac{g\alpha^2}{r^2} \quad (3.4)$$

avec la contrainte $z = (\alpha^{-2} - 1)^{1/2} r$.

Posons $\phi = \alpha\theta$, d'où $0 \leq \phi \leq 2\pi\alpha$ et pour étendre l'intégrale à tout le domaine c'est-à-dire de 0 à 2π , nous introduisons un potentiel $V(\phi)$ défini par

$$V(\phi) = \begin{cases} 0 & 0 \leq \phi \leq 2\pi\alpha \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} . \quad (3.5)$$

Cette définition signifie que le potentiel $V(\phi)$ remplace la contrainte indiquée ci-dessus et que la particule est astreinte à un mouvement dans un secteur d'ouverture angulaire $2\pi\alpha$ ($0 < \alpha \leq 1$).

Alors en passant au système (r, ϕ) le Lagrangien devient

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{M}{2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 \right) - \frac{M}{2} \omega^2 r^2 - \frac{g\alpha^2}{r^2} - V(\phi), \quad (3.6)$$

avec $M = m\alpha^{-2}$.

En coordonnées cartésiennes le Lagrangien se met sous la forme suivante

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{1}{2} M \omega^2 (x^2 + y^2) - \frac{C}{(x^2 + y^2)} - V(x, y), \quad (3.7)$$

avec $C = g\alpha^2$

3.1 Le propagateur

Suivant l'approche de Feynman [9], le propagateur pour ce système est donné, en coordonnées cartésiennes, par l'intégrale fonctionnelle suivante

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon} \right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j dy_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right\}, \quad (3.8)$$

$S(j, j-1)$ représente l'action élémentaire

$$S(j, j-1) = \frac{M}{2\epsilon} [\Delta x_j^2 + \Delta y_j^2] - \frac{\epsilon}{2} M \omega^2 (x_j^2 + y_j^2) - \epsilon \frac{C}{(x_j^2 + y_j^2)} - \epsilon V(x_j, y_j). \quad (3.9)$$

En suivant les mêmes étapes de calcul effectué dans le chapitre précédent, il s'ensuit que le propagateur peut être mis, en fonction des nouvelles variables (r, ϕ) , sous la forme

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon} \right) \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\phi_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\epsilon} (\Delta r_j^2 + 2r_j r_{j-1} (1 - \cos \Delta \phi_j)) - \epsilon \left(\frac{M}{2} \omega^2 r_j^2 + \frac{C}{r_j^2} + V(\phi_j) \right) \right] \right\}. \quad (3.10)$$

Il est clair que l'expression ci-dessus admet une singularité à l'origine. Il est donc nécessaire de l'éliminer afin d'obtenir une intégrale de chemin stable. Pour cela, introduisons, en premier lieu, l'énergie E au moyen de la fonction de Green, transformée de Fourier du propagateur

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^\infty dT \exp \left(\frac{i}{\hbar} ET \right) K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) \quad (3.11)$$

et ensuite utilisons la procédure de reparamétrisation des chemins de Duru et Kleinert[13] en effectuant la transformation temporelle $t \rightarrow s$ définie par

$$dt = ds f(\mathbf{r}) = ds f_L(\mathbf{r}) f_R(\mathbf{r}), \quad (3.12)$$

avec la contrainte $dT = dS f_R(\mathbf{r}_f) f_L(\mathbf{r}_i)$

ou sous forme discrète

$$\epsilon = \epsilon_s f_L(r_j) f_R(r_{j-1}), \quad \epsilon_s = s_j - s_{j-1}, \quad S = s_f - s_i = N \epsilon_s. \quad (3.13)$$

$f(\mathbf{r})$ est une fonction régulatrice qui sera judicieusement choisie.

La fonction de Green pour ce problème peut maintenant être écrite de la façon suivante

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^\infty dS P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S), \quad (3.14)$$

où

$$P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = f_R(\mathbf{r}_f) f_L(\mathbf{r}_i) \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s f_L(\mathbf{r}_j) f_R(\mathbf{r}_{j-1})} \right) \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\phi_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} A_E^N\right). \quad (3.15)$$

représente le promoteur avec la nouvelle action définie par

$$A_E^N = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{M}{2\epsilon_s f_L(\mathbf{r}_j) f_R(\mathbf{r}_{j-1})} [\Delta r_j^2 + 2r_j r_{j-1} (1 - \cos \Delta\phi_j) - \epsilon_s f_L(\mathbf{r}_j) \left[\frac{M}{2} \omega^2 r_j^2 + \frac{C}{r_j^2} + V(\phi_j) - E \right] f_R(\mathbf{r}_{j-1}) \right\}. \quad (3.16)$$

Une famille appropriée de fonctions régulatrices a été donnée par Kleinert [14] de la manière suivante

$$f(\mathbf{r}) = f_L(r_j) f_R(r_{j-1}) = f_L^{1-\lambda}(r_j) f_R^\lambda(r_{j-1}), \quad (3.17)$$

où λ est un paramètre.

Pour simplifier le calcul dans la prescription du post-point, posons $\lambda = 0$. Les fonctions régulatrices deviennent alors

$$f_L \equiv f \quad \text{et} \quad f_R \equiv 1.$$

Avec un tel choix, le promoteur (3.15) et l'action (3.16) s'écrivent respectivement

$$P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = f(\mathbf{r}_i) \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s f(\mathbf{r}_j)} \right) \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\phi_j \exp \left(\frac{i}{\hbar} A_E^N \right), \quad (3.18)$$

et

$$A_E^N = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{M}{2\epsilon_s f(\mathbf{r}_j)} [\Delta r_j^2 + 2r_j r_{j-1} (1 - \cos \Delta \phi_j)] - \epsilon_s f(\mathbf{r}_j) \left[\frac{M}{2} \omega^2 r_j^2 + \frac{C}{r_j^2} + V(\phi_j) - E \right] \right\}. \quad (3.19)$$

A ce stade, effectuons la transformation spatiale $(x, y) \rightarrow (q, \phi)$ définie par les équations suivantes :

$$r = e^q, \quad -\infty < q < +\infty \quad \text{et} \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi\alpha. \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \Delta x_n &= x_n - x_{n-1} = r_n \cos \phi_n - r_{n-1} \cos \phi_{n-1}, & \Delta y_n &= y_n - y_{n-1} = r_n \sin \phi_n - r_{n-1} \sin \phi_{n-1} \\ \Delta r_n &= e^{q_n} - e^{q_{n-1}}, & \Delta q_n &= q_n - q_{n-1}, & \Delta \phi_n &= \phi_n - \phi_{n-1}. \end{aligned}$$

et utilisons, dans la suite du calcul, l'identité

$$\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j dy_j = \int \prod_{j=2}^N d(\Delta q_j) d(\Delta \phi_j), \quad (3.21)$$

permettant d'effectuer l'intégration par rapport aux intervalles Δq_j et $\Delta \phi_j$ au lieu de l'intégration habituelle sur le post-point. Ce qui élimine tout privilège d'un point quelconque.

Le Jacobien de la transformation est

$$J = \left| \frac{\partial(\Delta x_j, \Delta y_j)}{\partial(\Delta q_j, \Delta \phi_j)} \right| = e^{2q_{j-1}}. \quad (3.22)$$

Choisissons maintenant la fonction régulatrice comme suit

$$f(r) = e^{2q}, \quad \epsilon = \epsilon_s e^{2q_j}. \quad (3.23)$$

La nouvelle expression du promoteur (3.18) est alors donnée par

$$P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = e^{2q_0} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s e^{2q_j}} \right) \prod_{j=2}^N e^{2q_{j-1}} d(\Delta q_j) d(\Delta \phi_j) \exp \left(\frac{i}{\hbar} A_E^N \right), \quad (3.24)$$

et l'action A_E^N devient

$$\begin{aligned} A_E^N &= \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{M}{2\epsilon_s e^{2q_j}} \left[(e^{q_j} - e^{q_{j-1}})^2 + 2e^{q_j} e^{q_{j-1}} (1 - \cos \Delta \phi_j) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \epsilon_s e^{2q_j} \left[\frac{M}{2} \omega^2 e^{2q_j} + \frac{C}{e^{2q_j}} + V(\phi_j) - E \right] \right\}, \\ &= \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{M}{2\epsilon_s} \left[1 + e^{-2\Delta q_j} - 2e^{-\Delta q_j} \cos \Delta \phi_j \right] - \epsilon_s \left[\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q_j} - E e^{2q_j} + V(\phi_j) e^{2q_j} + C \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Développons les quantités $e^{-\Delta q_j}$, $e^{-2\Delta q_j}$ et $\cos \Delta \phi_j$ en série de Taylor jusqu'à l'ordre 4 en Δu_j (u est une variable

quelconque), c'est-à-dire à l'ordre 2 en ϵ_s , l'action est alors

$$A_E^N = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{M}{2\epsilon_s} \left[(\Delta q_j^2 + \Delta \phi_j^2) - \epsilon_s \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q_j} - E e^{2q_j} + V(\phi_j) e^{2q_j} + C \right) \right] + \Delta A_E^N \right\} \quad (3.26)$$

où ΔA_E^N représente la correction relative à l'action regroupant les termes d'ordre 3 et 4 en Δu_j :

$$\Delta A_E^N \approx \frac{M}{2\epsilon_s} \left[-\Delta q_j^3 - \Delta q_j \Delta \phi_j^2 + \frac{7}{12} \Delta q_j^4 - \frac{1}{12} \Delta \phi_j^4 + \frac{1}{2} \Delta q_j^2 \Delta \phi_j^2 \right]. \quad (3.27)$$

En développons aussi la mesure jusqu'à l'ordre 2 en Δq_j , nous obtenons

$$\begin{aligned} &e^{2q_0} \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s e^{2q_j}} \right) \prod_{j=2}^N e^{2q_{j-1}} d(\Delta q_j) d(\Delta \phi_j) \\ &= \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right) \prod_{j=1}^N (1 + C_{mes}) \prod_{j=2}^N d(\Delta q_j) d(\Delta \phi_j), \end{aligned} \quad (3.28)$$

où

$$C_{mes} = -2\Delta q_j + 2\Delta q_j^2, \quad (3.29)$$

est la correction relative à la mesure.

En rassemblant les deux corrections provenant de l'action et de la mesure, nous obtenons l'expression de la correction totale suivante :

$$C_T \approx \frac{i}{\hbar} \Delta A_E^N - \frac{1}{2\hbar^2} (\Delta A_E^N)^2 + c_{mes} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \Delta A_E^N\right). \quad (3.30)$$

La contribution des termes d'ordre impaire étant nulle à la limite $\epsilon_s \rightarrow 0$ d'où $(\Delta A_E^N)^2$ et $c_{mes} \Delta A_E^N$ ont pour expressions :

$$(\Delta A_E^N)^2 \approx \left(\frac{M}{2\epsilon_s}\right)^2 [\Delta q_j^6 + 2\Delta q_j^4 \Delta \phi_j^2 + \Delta q_j^2 \Delta \phi_j^4], \quad (3.31)$$

$$c_{mes} \Delta A_E^N \approx 2 \left(\frac{M}{2\epsilon_s}\right) [\Delta q_j^4 + \Delta q_j^2 \Delta \phi_j^2]. \quad (3.32)$$

Remplaçons les termes d'ordre 2, 4 et 6 dans l'expression de la correction totale, en utilisant la procédure de Mc Laughlin-Schulman, qui consiste à la limite $\epsilon_s \rightarrow 0$, à effectuer les substitutions suivantes :

$$\begin{aligned} \Delta q_j^2 &\longrightarrow \frac{i\hbar\epsilon_s}{M}, \quad \Delta \phi_j^2 \longrightarrow \frac{i\hbar\epsilon_s}{M}, \quad \Delta q_j^4 \longrightarrow 3 \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{M}\right)^2, \quad \Delta \phi_j^4 \longrightarrow 3 \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{M}\right)^2, \\ \Delta q_j^2 \Delta \phi_j^2 &\longrightarrow \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{M}\right)^2, \quad \Delta q_j^2 \Delta \phi_j^4 \longrightarrow 3 \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{M}\right)^3, \quad \Delta q_j^4 \Delta \phi_j^2 \longrightarrow 3 \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{M}\right)^3, \\ \Delta q_j^6 &\longrightarrow 15 \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{M}\right)^3. \end{aligned} \quad (3.33)$$

En tenant compte de ces substitutions, la correction (3.30) conduit à un potentiel effectif nul ($C_T = 0 \rightarrow V_{eff} = 0$). Autrement dit, les transformations spatiale et temporelle définies par les relations (3.20) et (3.23) n'introduisent aucune correction quantique dans l'expression de l'action. Par conséquent, le promoteur de l'équation (3.24) s'écrit simplement ainsi

$$\begin{aligned}
P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right) \prod_{j=2}^N d(\Delta q_j) d(\Delta \phi_j) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\epsilon_s} (\Delta q_j^2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \Delta \phi_j^2) - \epsilon_s \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q_j} - E e^{2q_j} + V(\phi_j) e^{2q_j} + C \right) \right] \right\}. \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Revenons, maintenant, à la variable θ ($\theta = \frac{1}{\alpha}\phi$) et à l'identité

$$\int \prod_{j=2}^N d(\Delta q_j) d(\Delta \phi_j) = \int \prod_{j=1}^{N-1} dq_j d\phi_j,$$

P_E^N devient :

$$\begin{aligned}
P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\alpha} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \right. \\
&\quad \left. \left[\frac{M}{2\epsilon_s} (\Delta q_j^2 + \alpha^2 \Delta \theta_j^2) - \epsilon_s \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q_j} - E e^{2q_j} + V(\theta_j) e^{2q_j} + C \right) \right] \right\}. \quad (3.35)
\end{aligned}$$

Constatons d'abord que lorsque $S = \sum_{j=1}^N \epsilon_s \rightarrow 0$ nous avons :

$$\begin{aligned}
\left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{M}{2\epsilon_s} \Delta q_j^2 \right] &\xrightarrow{\epsilon_s \rightarrow 0} \delta(\Delta q_j), \\
\left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{M\alpha^2}{2\epsilon_s} \Delta \theta_j^2 \right\} &\xrightarrow{\epsilon_s \rightarrow 0} \delta(\Delta \theta_j), \quad (3.36)
\end{aligned}$$

et par conséquent

$$\begin{aligned}
P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &\xrightarrow{S \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \int \prod_{j=1}^N \delta(\Delta q_j) \delta(\Delta \theta_j) \prod_{j=1}^{N-1} dq_j d\theta_j \\
&= \frac{1}{\alpha} \delta(q_f - q_i) \delta(\theta_f - \theta_i) = \frac{1}{\alpha} \delta^{(2)}(\vec{q}_f - \vec{q}_i). \quad (3.37)
\end{aligned}$$

Alors, en raison de la normalisation p_E^N s'écrit :

$$\begin{aligned}
P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow 0} \prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right) \prod_{j=1}^{N-1} dq_j d\theta_j \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\epsilon_s} (\Delta q_j^2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \alpha^2 (\Delta\theta_j + 2l_j\pi)^2) - \epsilon_s \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q_j} - E e^{2q_j} + V(\theta_j) e^{2q_j} + C \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

La sommation \sum_{l_j} figurant dans (3.38) signifie que l'intégration sur la variable θ porte sur tous les chemins angulaires directs et indirects.

Rappelons que le mouvement de la particule est confiné dans un secteur d'ouverture angulaire ϕ , alors le promoteur $P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S)$ s'annule pour toutes les positions \mathbf{r}_i et \mathbf{r}_f à l'extérieur du secteur indiqué, et par conséquent la forme particulière du potentiel $V(\phi)$ nous permet d'effectuer l'intégration sur la variable θ . Maintenant, Nous sommes prêt à éliminer les chemins $\theta(s)$, en intégrant sur les variables angulaires θ_j à l'aide de la formule de Poisson

$$\sum_{l=-\infty}^{+\infty} f(l) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu f(\mu) \exp(-2i\pi\mu l), \quad l \text{ est entier}, \tag{3.39}$$

d'où nous pouvons écrire l'intégrale sur θ sous la forme

$$\begin{aligned}
&\prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2\epsilon_s} (\Delta\theta_j + 2l_j\pi)^2 \right) \right] \\
&= \prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \left[\frac{2im\pi^2}{\hbar\epsilon_s} \mu^2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\frac{2im\pi}{\hbar\epsilon_s} \Delta\theta_j - 2il_j\pi \right) \mu + \frac{im}{2\hbar\epsilon_s} (\Delta\theta_j)^2 \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Afin d'effectuer l'intégration sur les variables θ_j , linéarisons l'expression (3.40) suivant la formule

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\mu \exp(-a\mu^2 + b\mu + c) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right), \tag{3.41}$$

l'équation(3.40) se réduit à

$$\begin{aligned} & \prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2\epsilon_s} (\Delta\theta_j + 2l_j\pi)^2 \right) \right] \\ &= \prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^N \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{2m\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{-\hbar^2 l_j^2}{2m} \epsilon_s + \hbar l_j \Delta\theta_j \right) \right], \end{aligned} \quad (3.42)$$

et si nous tenons compte de l'écriture

$$\sum_{j=1}^N l_j \Delta\theta_j = l_N \theta_N - l_1 \theta_0 + \sum_{j=1}^{N-1} \theta_j (l_j - l_{j+1}) \quad (3.43)$$

l'intégration sur les θ_j donne

$$\begin{aligned} & \prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2\epsilon_s} (\Delta\theta_j + 2l_j\pi)^2 \right) \right] \\ &= \prod_{j=1}^N \sum_{l_j=-\infty}^{+\infty} (2\pi)^{N-1} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (l_N \theta_N - l_1 \theta_0) \right] \prod_{j=1}^N \left(\frac{i\hbar\epsilon_s}{2m\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ & \quad \times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{-\hbar^2 l_j^2}{2m} \epsilon_s \right) \right) \prod_{j=1}^{N-1} \delta_{l_j, l_{j+1}}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

En reportant ce résultat dans (3.38), le promoteur s'écrit

$$\begin{aligned} P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \exp [il(\theta_f - \theta_i)] \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \times \\ & \quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\epsilon_s} \Delta q_j^2 - \epsilon_s \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q_j} - E e^{2q_j} + C + \frac{\hbar^2 l^2}{2M\alpha^2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

En insérant l'expression (3.45) du promoteur dans l'expression (3.14) de la fonction de Green, cette dernière admet la forme compacte suivante

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i, E) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp [il(\theta_f - \theta_i)]}{2\pi} g_{q, l}(q_f, q_i; E_q), \quad (3.46)$$

où

$$g_{q, l}(q_f, q_i; E_q) = \int_0^\infty dS K_{q, l}(q_f, q_i; S), \quad (3.47)$$

et $K_{q, l}$ est un propagateur partiel décrit par l'expression suivante

$$K_{q, l}(q_f, q_i; S) = \int D_q(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{M}{2} \dot{q}^2 - \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q} - E e^{2q} + \left(C + \frac{\hbar^2 l^2}{2M\alpha^2} \right) \right) \right] \right\}, \quad (3.48)$$

avec la mesure

$$D_q(s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (3.49)$$

Le propagateur partiel $K_{q, l}$ à précisément la forme du propagateur relatif au potentiel de Morse suivant l'axe q pour une particule de masse constante M . Comme il à été démontré par [14, 10, 6], le propagateur associé au potentiel de Morse et relié au propagateur associé au potentiel de l'oscillateur radial par l'équation

$$(r_f | r_i)_{E_0} = \exp \left[\frac{1}{2} (x_f | x_i) \right] (x_f | x_i)_{E_M} \quad \text{avec } r = e^x. \quad (3.50)$$

En raison de cette relation, l'équation (3.47) est intégrable et nous déduisons, après de légers réarrangements, le résultat familier suivant

$$\begin{aligned} g_{q, l}(q_f, q_i; E_q) &= \left(\frac{M\omega}{i\hbar} \right) \int_0^\infty dS \frac{1}{\sin(\omega S)} \exp \left(\frac{i}{\hbar} E S \right) \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{M}{2} \omega (e^{2q_f} + e^{2q_i}) \cot(\omega S) \right] \right\} \\ &\times I_{|\nu|} \left[-\frac{iM\omega}{\hbar} e^{q_f} e^{q_i} \frac{1}{\sin(\omega S)} \right], \end{aligned} \quad (3.51)$$

$I_{|\nu|}(z)$ sont les fonctions de Bessel modifiées avec

$$E_q \equiv E, \quad |\nu| = \left(\frac{2MC}{\hbar^2} + \frac{l^2}{\alpha^2} \right)^{1/2}. \quad (3.52)$$

Finalement, nous pouvons dire que la fonction de Green associée au problème d'une particule se déplaçant sur la surface d'un cône et soumise à un potentiel quadratique inverse a été exactement calculée par l'approche de l'intégrale de chemin, comme nous allons le prouver à travers les résultats bien connus de certains cas particuliers. Son expression est la suivante :

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \left(\frac{M\omega}{i\hbar} \right) \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[i l(\theta_f - \theta_i)]}{2\pi} \int_0^\infty dS \frac{1}{\sin(\omega S)} \exp\left(\frac{i}{\hbar} E S\right) \times \\ \times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\frac{M}{2} \omega (r_f^2 + r_i^2) \cot(\omega S) \right] \right\} I_{|\nu|} \left[-\frac{iM\omega}{\hbar} r_f r_i \frac{1}{\sin(\omega S)} \right]. \quad (3.53)$$

3.2 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés

Afin d'obtenir, pour cette particule, les énergies des états liés et les fonctions d'onde correspondantes, nous écrivons la fonction de Green (3.53) sous la forme d'un développement spectral. Ceci est possible en utilisant la formule de Hille et Hardy [8]

$$\frac{z^{-\frac{\nu}{2}}}{1-z} \exp\left[-\frac{1}{2}(x+y)\frac{1+z}{1-z}\right] I_{|\nu|}\left(\frac{2\sqrt{xyz}}{1-z}\right) \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n n! e^{-\frac{1}{2}(x+y)}}{\Gamma(n+|\nu|+1)} (xy)^{\frac{\nu}{2}} L_n^\nu(x) L_n^\nu(y), \quad (3.54)$$

valable pour $|z| < 1$ et $L_n^\nu(u)$ sont les polynômes de Laguerre.

En tenant compte des substitutions suivantes :

$$x = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right) r_i^2, \quad y = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right) r_f^2, \quad z = \exp(-2i\omega S), \quad (3.55)$$

nous trouvons, par un simple calcul, l'expression suivante pour la fonction de Green partielle

$g_{q,l}$

$$\begin{aligned}
g_{q, l}(q_f, q_i; E_q) &= \left(\frac{2M\omega}{\hbar}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n + |\nu| + 1)} \left(\frac{M\omega}{\hbar} r_f r_i\right)^{|\nu|} \exp\left[-\frac{M\omega}{2\hbar}(r_f^2 + r_i^2)\right] \times \\
&\times L_n^{|\nu|}\left(\frac{M\omega}{\hbar} r_f^2\right) L_n^{|\nu|}\left(\frac{M\omega}{\hbar} r_i^2\right) \int_0^1 \left(\frac{-i}{2\omega}\right) z^{ip+n+\frac{1}{2}(|\nu|-1)} dz, \tag{3.56}
\end{aligned}$$

où $p = -\frac{E}{2i\hbar\omega}$.

Par conséquent, la fonction de Green (3.53) du système en considération se réécrit comme suit

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) &= \left(\frac{2M\omega}{\hbar}\right) \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\exp[i l(\theta_f - \theta_i)]}{2\pi} \frac{n!}{\Gamma(n + |\nu| + 1)} \times \\
&\times \left(\frac{M\omega}{\hbar} r_f r_i\right)^{|\nu|} \exp\left[-\frac{M\omega}{2\hbar}(r_f^2 + r_i^2)\right] \times \\
&\times L_n^{|\nu|}\left(\frac{M\omega}{\hbar} r_f^2\right) L_n^{|\nu|}\left(\frac{M\omega}{\hbar} r_i^2\right) \int_0^1 \left(\frac{-i}{2\omega}\right) z^{ip+n+\frac{1}{2}(|\nu|-1)} dz. \tag{3.57}
\end{aligned}$$

L'intégration sur la variable z donne naissance aux pôles dans le plan de l'énergie

$$\int_0^1 z^{ip+n+\frac{1}{2}(|\nu|-1)} dz = \frac{1}{ip+n+\frac{1}{2}(|\nu|-1)}. \tag{3.58}$$

Le spectre de l'énergie se déduit de l'équation :

$$ip+n+\frac{1}{2}(|\nu|-1) = 0. \tag{3.59}$$

Il est évident que cette équation nous permet de tirer les niveaux d'énergie pour ce système

$$E_{n, l}(g, \alpha) = \hbar\omega(2n+1+|\nu|), \tag{3.60}$$

ou encore

$$E_{n, l}(g, \alpha) = \hbar\omega \left(2n+1 + \left(\frac{2mg}{\hbar^2} + \frac{l^2}{\alpha^2}\right)^{1/2}\right). \tag{3.61}$$

Finalement, nous arrivons à la représentation spectrale suivante de la fonction de Green

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = i\hbar \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{E - E_{n, l}(g, \alpha)} \Psi_{n, l}(r_f, \theta_f) \Psi_{n, l}^*(r_i, \theta_i),$$

avec les fonctions d'onde des états liés, obtenues à partir des résidus correspondant aux pôles (3.61) de l'équation (3.58)

$$\Psi_{n, l}(r, \theta) = \frac{e^{il\theta}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar\alpha^2} \frac{n!}{\Gamma(n + |\nu| + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\alpha^2} r^2 \right)^{\frac{|\nu|}{2}} \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar\alpha^2} r^2\right) L_n^{|\nu|}\left(\frac{m\omega}{\hbar\alpha^2} r^2\right). \quad (3.62)$$

CALCUL ÉLABORÉ :

Faisons remarquer que les fonctions d'onde obtenues (3.62) n'explicitent pas les conditions de confinement du mouvement de la particule dans le secteur d'ouverture angulaire ϕ . En effet, il est commode de s'intéresser à une solution qui rend manifeste les conditions aux limites de ce mouvement. Pour cela, revenons à l'expression (3.35) du promoteur qui s'écrit aussi sous la forme

$$P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = \frac{1}{\alpha} \int D_q(s) D_\theta(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{M}{2} (\dot{q}^2 + \alpha^2 \dot{\theta}^2) - \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q} - E e^{2q} + e^{2q} V(\theta) + C \right) \right] \right\}, \quad (3.63)$$

les mesures $D_q(s)$ et $D_\theta(s)$ sont données par les équations

$$\begin{aligned} D_q(s) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j, \\ D_\theta(s) &= \prod_{j=1}^N \left(\frac{M\alpha^2}{2i\pi\hbar\epsilon_s} \right)^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j, \end{aligned} \quad (3.64)$$

et reconsidérons l'intégration sur la variable angulaire θ en utilisant l'intégrale de chemin relative

au rotateur rigide[15]

$$\begin{aligned}
& \int D_\theta(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{M}{2} \alpha^2 \dot{\theta}^2 + \frac{\hbar^2 (n^2 - 1/4)}{2M\alpha^2 \sin^2 \theta} \right] \right\} \\
&= \sum_{l=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(l+n+1/2)^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] (l+n+1/2) \frac{(l+2n)!}{l!} \times \\
& \quad \times (\sin \theta_f \sin \theta_i)^{1/2} P_{l+n}^{-n}(\cos \theta_f) P_{l+n}^{-n}(\cos \theta_i), \tag{3.65}
\end{aligned}$$

$P_\nu^\gamma(\cos \theta)$ sont les fonctions de Legendre.

Il est évident que le terme $\frac{\hbar^2(n^2-1/4)}{2M\alpha^2 \sin^2 \theta}$ disparaît en posant $n = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}
\int D_\theta(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^S \frac{M}{2} \alpha^2 \dot{\theta}^2 ds \right] &= \sum_{l=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(l+1)^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] (l+1)^2 \times \\
& \quad \times (\sin \theta_f \sin \theta_i)^{1/2} P_{l+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_f) P_{l+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_i). \tag{3.66}
\end{aligned}$$

Ensuite, en tenant compte de la relation entre les fonctions de Legendre et la fonction trigonométrique sinus [8]

$$P_{\nu-1/2}^{-1/2}(\cos \theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta}} \frac{\sin \nu \theta}{\nu} \quad \text{avec } \nu = l+1, \tag{3.67}$$

qui conduit aux relations suivantes :

$$\begin{aligned}
P_{l+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_f) &= \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta_f}} \frac{\sin(l+1)\theta_f}{(l+1)}, \\
P_{l+1/2}^{-1/2}(\cos \theta_i) &= \sqrt{\frac{2}{\pi \sin \theta_i}} \frac{\sin(l+1)\theta_i}{(l+1)}, \tag{3.68}
\end{aligned}$$

nous pouvons donner à l'intégrale fonctionnelle sur les chemins θ l'expression suivante

$$\begin{aligned}
\int D_\theta(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^S \frac{M}{2} \alpha^2 \dot{\theta}^2 ds \right] &= \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(l+1)^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] \sin(l+1)\theta_f \sin(l+1)\theta_i \\
&= \frac{2}{\pi} \sum_{l=1}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{l^2 \hbar^2 S}{2M\alpha^2} \right] \sin l\theta_f \sin l\theta_i,
\end{aligned} \tag{3.69}$$

où nous avons changé $(l+1)$ en l .

En substituant ce résultat dans l'expression (3.63) du promoteur, ce dernier apparaît sous la forme

$$\begin{aligned}
P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \frac{2}{\pi\alpha} \sum_{l=1}^{\infty} \sin l\theta_f \sin l\theta_i \int D_q(s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^S ds \left[\frac{M}{2} \dot{q}^2 - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \left(\frac{M}{2} \omega^2 e^{4q} - E e^{2q} + \left(C + \frac{\hbar^2 l^2}{2M\alpha^2} \right) \right) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

L'intégrale de chemin sur la variable q s'effectue de la même manière que précédemment ; ce qui nous permet d'écrire la fonction de Green comme

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) &= \left(\frac{4M\omega}{\pi\hbar\alpha} \right) \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n+|\nu|+1)} \times \sin l\theta_f \sin l\theta_i \\
&\quad \times \left(\frac{M\omega}{\hbar} r_f r_i \right)^{|\nu|} \exp \left[-\frac{M\omega}{2\hbar} (r_f^2 + r_i^2) \right] \times \\
&\quad \times L_n^{|\nu|} \left(\frac{M\omega}{\hbar} r_f^2 \right) L_n^{|\nu|} \left(\frac{M\omega}{\hbar} r_i^2 \right) \int_0^1 \left(\frac{-i}{2\omega} \right) z^{ip+n+\frac{1}{2}(|\nu|-1)} dz.
\end{aligned} \tag{3.70}$$

Les pôles de la fonction de Green s'obtiennent à partir de l'intégration sur la variable z . Sa substitution dans (3.70) donne pour la fonction de Green l'écriture suivante :

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = i\hbar \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{E - E_{n,l}(g, \alpha)} \Psi_{n,l}(r_f, \theta_f) \Psi_{n,l}^*(r_i, \theta_i). \tag{3.71}$$

Le spectre discret de l'énergie est alors donné par la relation

$$E_{n,l}(g, \alpha) = \hbar\omega \left(2n+1 + \left(\frac{2mg}{\hbar^2} + \frac{l^2}{\alpha^2} \right)^{1/2} \right). \tag{3.72}$$

Les fonctions d'onde se déduisent directement à partir des résidus correspondant à ces pôles

$$\Psi_{n, l}(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \left(\frac{8m\omega}{\hbar\alpha^2} \frac{n!}{\Gamma(n + |\nu| + 1)} \right)^{\frac{1}{2}} \sin l\theta \left(\frac{m\omega}{\hbar\alpha^2} r^2 \right)^{\frac{|\nu|}{2}} \exp \left(\frac{-m\omega}{2\hbar\alpha^2} r^2 \right) L_n^{|\nu|} \left(\frac{m\omega}{\hbar\alpha^2} r^2 \right).$$

3.3 Cas particuliers

Premier cas : $\alpha = 1$ et $g = 0$

Il s'agit dans ce cas d'un oscillateur harmonique simple bidimensionnel car lorsque $\alpha = 1$ la contrainte $z = (\alpha^{-2} - 1)^{1/2} r$ devient nulle et par conséquent le lagrangien s'écrit

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - \frac{1}{2} m\omega^2 r^2. \quad (3.73)$$

En effet, en posant $\alpha = 1$ et $g = 0$ dans l'expression (3.53), nous obtenons

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \left(\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega S)} \right) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} (r_f^2 + r_i^2) \cot(\omega S) \right] \times \\ &\times \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \exp(il\Delta\theta) I_{|l|} \left[\frac{m\omega}{i\hbar \sin(\omega S)} r_f r_i \right], \end{aligned} \quad (3.74)$$

où $\Delta\theta = \theta_f - \theta_i$

et grâce à la formule de la décomposition en séries de Fourier [8]

$$\exp(z \cos \Psi) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \exp(il\Psi) I_{|l|}(z), \quad (3.75)$$

nous aboutissons à l'expression suivante du propagateur

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = \left(\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega S)} \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2 \sin(\omega S)} [(r_f^2 + r_i^2) \cos(\omega S) - 2r_f r_i \cos \Delta\theta] \right\}, \quad (3.76)$$

d'où le propagateur relatif à l'oscillateur harmonique simple.

Deuxième cas : $\alpha = 1$ et $g \neq 0$

Dans ce cas aussi la contrainte $z = (\alpha^{-2} - 1)^{1/2} r$ est nulle ce qui donne au lagrangien

régissant le mouvement de la particule la forme suivante

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 - \frac{g}{r^2}. \quad (3.77)$$

Il s'agit alors du problème de l'oscillateur quadratique inverse bidimensionnel. Il suffit de poser $\alpha = 1$ avec $g \neq 0$ dans l'expression (3.53) du propagateur, pour déduire le résultat suivant :

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \left(\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega S)} \right) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2} (r_f^2 + r_i^2) \cot(\omega S) \right] \times \\ &\times \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \exp(il\Delta\theta) I_{|\nu|} \left[\frac{m\omega}{i\hbar \sin(\omega S)} r_f r_i \right], \end{aligned} \quad (3.78)$$

ici $|\nu| = \left(\frac{2mg}{\hbar^2} + l^2 \right)^{1/2}$.

3.4 Conclusion

Dans ce travail, nous avons calculé, en coordonnées polaires, la fonction de Green et avons déduit le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états liés dans le cas d'une particule qui se déplace sur la surface d'un cône et soumise à un potentiel quadratique inverse. La fonction de Green relative au potentiel en considération est ramenée via une transformation temporelle convenablement choisie combinée à une transformation spatiale à celle associée à un potentiel de type Morse dont la solution est connue depuis longtemps. Les résultats obtenus sont les niveaux d'énergie du spectre discret ainsi que les fonctions d'onde des états liés.

Chapitre 4

Résolution exacte de deux problèmes à une dimension sur un cercle

La résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour un potentiel arbitraire peut se révéler délicate techniquement. Néanmoins, il est souhaitable de connaître tous les potentiels pour lesquels nous pouvons résoudre l'équation de Schrödinger et exprimer ses solutions en termes de celles des équations différentielles que nous pouvons actuellement résoudre car il est essentiel pour la physique d'avoir des solutions analytiques exactes afin d'expliquer avec certitude certaines expériences. Les potentiels exactement solubles sont des exceptions dans la théorie quantique. Seules certaines classes de potentiels admettent des solutions exactes (on dit alors que le problème est intégrable). Nous trouvons en effet parmi ceux-ci des potentiels solubles d'intérêt certain, pensons en particulier aux potentiels unidimensionnels harmoniques, de Pöschl-Teller et de Morse. Une des raisons d'une telle popularité est que leurs études modélisent la situation très fréquente où le système est au voisinage de l'équilibre. Les résultats obtenus pour ces potentiels pourront s'appliquer à l'étude des vibrations d'une molécule diatomique, des vibrations de molécules plus complexes ou même des solides. Dans l'approche de Feynman, l'évaluation du propagateur a joué un rôle central dans un grand nombre de problèmes de la physique quantique non relativiste ; citons le cas des potentiels singuliers à l'origine pour lesquels des solutions analytiques sont hautement désirables et cela quelle que soit leur forme fonctionnelle. Les transformations sur l'espace et sur le temps étaient l'outil mathématique

puissant permettant de Contourner beaucoup de difficultés rencontrées en utilisant le formalisme de Schrödinger. Depuis, les résultats obtenus dans cette voie sont spectaculaires et sont parfaitement identiques à ceux trouvés par la résolution de l'équation de Schrödinger.

Ce chapitre est consacré à l'étude, par l'intégrale de chemin formulée dans l'espace des phases, de deux problèmes unidimensionnels sur un cercle en l'occurrence l'oscillateur singulier et le potentiels Coulombien singulier. Le comportement de la particule ($m = \hbar \equiv 1$) est analysé sous l'angle d'une approche qui utilise la fonctionnelle delta de Dirac. Cette approche s'inspire des critiques formulées par Katz concernant les méthodes de calcul jugées trop laborieuses et contenant trop de détails inutiles. Cette méthode a été par la suite développée par Arlem Anderson et Scott B. Anderson. Le propagateur associé au potentiel de l'oscillateur singulier a été explicitement construit. Cependant, grâce à des transformations judicieusement choisies, un lien a été établi entre le problème de l'oscillateur singulier et celui du Coulombien singulier. Ce lien est à l'origine de la similitude de la forme des deux propagateurs. Dans les deux cas, le problème a été reconverti à celui du potentiel de Pöschl-Teller. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états liés du problème de Coulomb singulier ont été alors directement déduits de ceux relatif à l'oscillateur singulier et sont conformes à ceux existants dans la littérature.

4.1 Présentation de la technique de la fonctionnelle delta de Dirac

L'approche de la fonctionnelle delta de Dirac est un outil puissant pour l'évaluation des intégrales de chemin pour des systèmes quantiques possédant un hamiltonien linéaire par rapport à la variable $q(t)$ qui caractérise la position de la particule au temps t , car elle met en œuvre des techniques de calcul simples. Pour les hamiltoniens plus généraux, la stratégie générale pour appliquer cette approche est de faire des transformations canoniques et autres qui permettent de donner à l'action une forme linéaire. A ce niveau, l'intégrale sur les variables de la position est directe et fait apparaître une fonction delta dont l'argument est l'équation différentielle du mouvement de la variable d'impulsion $p(t)$. Par conséquent, l'intégrale sur les moments conjugués est facile à manipuler et se réduit à une intégrale ordinaire sur une variable impulsion p_0 qui représente la condition initiale de la solution de l'équation du mouvement correspondant

à un temps initial convenablement choisi. Notons que l'intégration sur les moments conjugués donne naissance à un facteur appelé facteur de composition dépendant des temps initial et final et de la dernière variable d'intégration p_0 .

4.2 Quantification de l'Hamiltonien classique

Le propagateur est l'amplitude de transition pour une particule repérée par le point initial φ_i à l'instant t_i et le point final φ_f à l'instant t_f . Son expression pour un intervalle de temps infinitésimal s'écrit

$$K(\varphi_j, \varphi_{j-1}; \epsilon) = [g(\varphi_j)g(\varphi_{j-1})]^{-\frac{1}{4}} \int \frac{d^n p_j}{(2\pi)^n} \exp \{ i [p_j(\varphi_j - \varphi_{j-1}) - \epsilon H_{eff}(\bar{\varphi}_j, p_j)] \}, \quad (4.1)$$

avec $g(\varphi)$ est le déterminant du tenseur métrique g_{ab} , $\bar{\varphi}_j = (\varphi_j + \varphi_{j-1})/2$ et H_{eff} est l'Hamiltonien effectif évalué au point moyen $\bar{\varphi}_j$

$$\begin{aligned} H_{eff} &= H + \Delta V \\ &= \frac{1}{2} g^{cd} p_c p_d + V + \Delta V, \end{aligned} \quad (4.2)$$

où g^{cd} est l'inverse de la matrice g_{cd} .

H_{eff} est une fonction des variables φ_c et p_c et s'identifie à l'Hamiltonien classique à la différence d'un terme supplémentaire dépendant de la constante de Planck (ΔV). ΔV représente la correction quantique donnée par

$$\begin{aligned} \Delta V &= \frac{\hbar^2}{8m} \left(R + g^{ab} \Gamma_{ad}^c \Gamma_{bc}^d \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{8m} \left(g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + 2 \left(g^{ab} \Gamma_a \right)_{,j} + g^{ab}{}_{,ab} \right). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Cette correction est proportionnelle à \hbar^2 et disparaît à la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$).

R représente la courbure scalaire de l'espace et Γ_{ab}^c est la connection affine ou le symbole de

Christoffel de deuxième espèce défini par

$$\Gamma_{ab}^c = \frac{1}{2} g^{cd} (\partial_a g_{bd} + \partial_b g_{ad} - \partial_d g_{ab}). \quad (4.4)$$

Suivant la procédure standard de dérivation d'une intégrale de chemin basée sur la formule du produit de Kato-Trotter, le propagateur intégral s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} K(\varphi_f, \varphi_i; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} [g(\varphi_f)g(\varphi_i)]^{-\frac{1}{4}} \int \prod_{j=1}^{N-1} d\varphi_j \times \\ &\times \prod_{j=1}^N \int \frac{dp_j}{(2\pi)^N} \exp \left(i\epsilon \sum_{j=1}^N \left[p_j \frac{(\varphi_j - \varphi_{j-1})}{\epsilon} - H_{eff}(\bar{\varphi}_j, p_j) \right] \right), \end{aligned} \quad (4.5)$$

L'expression (4.5) est la représentation de l'intégrale de chemin dans l'espace des phases. Elle peut être écrite sous forme compacte comme

$$K(\varphi_f, \varphi_i; T) = [g(\varphi_f)g(\varphi_i)]^{-\frac{1}{4}} \int D[q(t)] D[p(t)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [p \dot{q} - H_{eff}] \right). \quad (4.6)$$

4.3 Problème de l'oscillateur singulier sur un cercle

En suivant la prescription de l'ordre de Weyl, le propagateur relatif à une particule se déplaçant sur un cercle ($S_1 : s_0^2 + s_1^2 = R^2$) et soumise à l'action du potentiel de l'oscillateur singulier

$$\begin{aligned} V^{OS}(\vec{s}) &= \frac{\omega^2 R^2 s_1^2}{2 s_0^2} + \frac{1}{2} \frac{k_1^2 - 1/4}{s_1^2} \\ &= \frac{\omega^2 R^2 \sin^2 \varphi}{2 \cos^2 \varphi} + \frac{k_1^2 - 1/4}{2R^2 \sin^2 \varphi}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

k_1 est un paramètre réel et $s_0 = R \cos \varphi$, $s_1 = R \sin \varphi$ ($\varphi \in [-\pi, \pi]$) sont les coordonnées polaires dont la métrique

$$g_{ab} = \text{diag}(1, R^2), \quad (4.8)$$

avec

$$g = \sqrt{\det g_{ab}} = R, \quad (4.9)$$

et un élément de ligne

$$ds^2 = dR^2 + R^2 d\varphi^2, \quad (4.10)$$

est donné comme suit

$$K_{OS}(\varphi_N, \varphi_0; T) = \frac{1}{\sqrt{R}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi i \epsilon} \right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} d\varphi_j \prod_{j=1}^N \int \frac{dp_j}{(2\pi)^N} \exp \left[i \sum_{j=1}^N A(j, j-1) \right], \quad (4.11)$$

avec l'action élémentaire

$$A(j, j-1) = p_j(\varphi_j - \varphi_{j-1}) - \epsilon H_{eff}(\bar{\varphi}_j, p_j). \quad (4.12)$$

$H_{eff}(\bar{\varphi}_j, p_j)$ est l'Hamiltonien effectif

$$H_{eff} = \frac{1}{2} g^{ab} p_a p_b + V + \Delta V, \text{ où } \Delta V = 0 \text{ car :} \quad (4.13)$$

$$(a = b = c = d = 1) \implies \Gamma_{11}^1 = 0, \quad (4.13)$$

$$(a = b = c = d = 2) \implies \Gamma_{22}^2 = \frac{1}{R}, \quad (4.14)$$

$$(a \neq b \neq c \neq d) \implies \Gamma_{ab}^c = 0, \quad (4.15)$$

alors :

$$A(j, j-1) = \left[p_j \Delta \varphi_j - \epsilon \left(\frac{p_j^2}{2R^2} - \frac{\omega^2 R^2}{2} + \frac{1}{2R^2} \left\{ \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \bar{\varphi}_j} + \frac{k_1^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \bar{\varphi}_j} \right\} \right) \right], \quad (4.16)$$

donc le propagateur s'écrit :

$$K_{OS}(\varphi_f, \varphi_i, T) = \frac{1}{\sqrt{R}} \int \left[\frac{dp_\varphi d\varphi}{2\pi} \right] \exp \left[i \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2R^2} \right] \times \\ \times \exp \left[i \int_0^T dt \left\{ p_\varphi \dot{\varphi} - \frac{p^2}{2R^2} - \frac{1}{2R^2} \left\{ \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \bar{\varphi}_j} + \frac{k_1^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \bar{\varphi}_j} \right\} \right\} \right], \quad (4.17)$$

avec la notation standard suivante $\epsilon = \frac{T}{N}$, $\varphi_0 = \varphi(t_i = 0) = s_i = a$, $\varphi_N = \varphi(t_f = T) = s_f = b$

$$\text{et } k_0^2 = \omega^2 R^4 + \frac{1}{4}.$$

L'équation ci-dessus est l'expression du propagateur associé au système de l'oscillateur singulier qui a été traité dans le cadre de la mécanique de Schrödinger [17].

Suivant l'approche de la fonctionnelle delta de Dirac, commençons par linéariser l'Hamiltonien en $\varphi(t)$. Pour cela effectuons, en premier lieu, la transformation canonique définie par

$$Q = \cos 2\varphi$$

Il s'en suit que la mesure $d\varphi$ se transforme en $f'(Q)dQ$. En tenant compte du changement $(\varphi, p) \longrightarrow (Q, P)$

$$\varphi = \frac{1}{2} \arccos Q = f(Q), \quad p = \frac{P}{f'(Q)}, \quad g^{\frac{1}{2}}(Q) = f'(Q) = -\frac{1}{2\sqrt{1-Q^2}}, \quad (4.18)$$

où P est le moment conjugué à Q .

Un préfacteur métrique apparaît dans la nouvelle expression de l'intégrale de chemin relative aux nouvelles variables (Q, P)

$$[g(B)g(A)]^{\frac{-1}{4}} = 2 [(1-B^2)(1-A^2)]^{\frac{1}{4}} \quad (4.19)$$

où $B = \cos 2b$ et $A = \cos 2a$.

Ce changement conduit à un potentiel effectif V_e donné par la relation suivante :

$$\begin{aligned}
V_e(Q) &= \frac{9g'^2}{32g^3} - \frac{g''}{8g^2} \\
&= \frac{1}{2(1-Q^2)} - \frac{3}{2}.
\end{aligned} \tag{4.20}$$

En Substituant ces résultats dans l'expression du propagateur , alors il s'écrit en fonction des nouvelles variables (P, Q) comme suit :

$$\begin{aligned}
K_{OS}(B, T; A, 0) &= D \exp \left[i \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2R^2} T \right] \int \left[\frac{dP dQ}{2\pi} \right] \exp \left\{ i \int_0^T dt \left(P \dot{Q} - \frac{2}{R^2} (1 - Q^2) P^2 - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{R^2} \left[\frac{\alpha^2 + \frac{1}{4}}{1+Q} + \frac{\gamma^2 + \frac{1}{4}}{1-Q} + \frac{3}{2} \right] \right) \right\},
\end{aligned} \tag{4.21}$$

où

$$\begin{aligned}
D &= \frac{1}{\sqrt{R}} [g(B)g(A)]^{-\frac{1}{4}}, \quad \alpha^2 = k_0^2 - \frac{1}{4}, \quad \gamma^2 = k_1^2 - \frac{1}{4}, \\
\alpha_e^2 &= \frac{k_0^2}{R^2} \quad \text{et} \quad \gamma_e^2 = \frac{k_1^2}{R^2}.
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Les termes $\frac{1}{1+Q}$ et $\frac{1}{1-Q}$ peuvent être éliminés en changeant le moment $P \longrightarrow \bar{P}$ de sorte que [16]

$$P = \bar{P} - i \frac{R}{2} \frac{\alpha_e}{1+Q} - i \frac{R}{2} \frac{\gamma_e}{1-Q}. \tag{4.23}$$

Le propagateur se met alors sous la forme :

$$\begin{aligned}
K_{0S}(B, T; A, 0) = & D \exp \left[i \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2} T \right] \int \left[\frac{dP dQ}{2\pi} \right] \exp \left\{ \int_0^T \left(\bar{P} \dot{Q} - iR \frac{\alpha_e}{2} \frac{\dot{Q}}{1+Q} \right. \right. \\
& - iR \frac{\gamma_e}{2} \frac{\dot{Q}}{1-Q} - \frac{2}{R^2} (1-Q^2) \bar{P}^2 + 2i \frac{\bar{P}}{R} (\alpha_e + \gamma_e) - \\
& \left. \left. - 2i \frac{\bar{P}}{R} (\alpha_e - \gamma_e) - \frac{1}{2} (\alpha_e - \gamma_e)^2 + \frac{3}{2R^2} \right) dt \right\}. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

L'intégration du 2^{ème} et du 3^{ème} termes est directe et donne les résultats suivants :

$$\begin{aligned}
\int_0^T R \frac{\alpha_e}{2} \frac{\dot{Q}}{1+Q} dt &= \left[\log \left(\frac{1+B}{1+A} \right)^{R \frac{\alpha_e}{2}} \right], \\
\int_0^T R \frac{\gamma_e}{2} \frac{\dot{Q}}{1-Q} dt &= \left[\log \left(\frac{1-B}{1-A} \right)^{-R \frac{\gamma_e}{2}} \right].
\end{aligned}$$

L'expression (4.24) du propagateur devient

$$\begin{aligned}
k_{OS}(B, T; A, 0) = & D' \exp \left(i \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2R^2} T \right) \int \left[\frac{d\bar{P} dQ}{2\pi} \right] \exp \left\{ i \int_0^T \left(\bar{P} \dot{Q} - \frac{2}{R^2} (1-Q^2) \bar{P}^2 + \right. \right. \\
& \left. \left. + 2i \frac{\bar{P}}{R} (\alpha_e + \gamma_e) - 2i \frac{\bar{P}}{R} (\alpha_e - \gamma_e) - \frac{1}{2} (\alpha_e - \gamma_e)^2 + \frac{3}{2R^2} \right) dt \right\}, \tag{4.25}
\end{aligned}$$

où

$$D' = D \left(\frac{1+B}{1+A} \right)^{R \frac{\alpha_e}{2}} \left(\frac{1-B}{1-A} \right)^{-R \frac{\gamma_e}{2}}. \tag{4.26}$$

A ce niveau, nous remarquons que l'action n'est pas encore linéaire en $Q(t)$. Pour cela, insérons, en deuxième lieu, l'identité suivante

$$\int_{+\infty}^{-\infty} d\bar{b} \int [dx]^{\bar{b}} \exp \left(-i \int_0^T \frac{\dot{x}^2}{2} dt \right) = 1. \tag{4.27}$$

Cette identité représente l'intégrale sur toutes les positions possibles du point final du propagateur d'une particule libre.

Maintenant, nous faisons le changement suivant :

$$x \longrightarrow \dot{x} + \frac{2}{R}\bar{P}Q + i(\alpha_e - \gamma_e), \quad (4.28)$$

qui conduit à un potentiel effectif

$$\tilde{V}_e = -\frac{3}{2R^2}, \quad (4.29)$$

et remplaçons le résultat dans (4.25). Le propagateur devient

$$\begin{aligned} K_{OS}(B, T; A, 0) = & D' \exp\left(i\frac{k_0^2 - \frac{1}{4}T}{2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \int [dx]_0^{\bar{b}} \int \left[\frac{d\bar{P}dQ}{2\pi}\right] \exp\left\{i \int_0^T \left(-\frac{\dot{x}^2}{2} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2\bar{P}^2}{R^2} + 2i\frac{\bar{p}}{R}(\alpha_e + \gamma_e) + \bar{P}\dot{Q} - 2\dot{x}\frac{\bar{p}}{R}Q - i(\alpha_e - \gamma_e)\dot{x}\right) dt\right\}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Intégrons les termes suivants de l'action :

$$\int_0^T \bar{P}\dot{Q} dt = [\bar{P}(T)B - \bar{P}(0)A] - \int_0^T \dot{\bar{P}}Q dt \quad (4.31)$$

$$\int_0^T -i(\alpha_e - \gamma_e)\dot{x} dt = -i(\alpha_e - \gamma_e)\bar{b}, \quad (4.32)$$

ainsi, l'expression (4.30) prend la forme :

$$\begin{aligned} K_{OS}(B, T; A, 0) = & D' \exp\left(i\frac{k_0^2 - \frac{1}{4}T}{2R^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp[(\alpha_e - \gamma_e)\bar{b}] \int [dx]_0^{\bar{b}} \times \\ & \times \int \left[\frac{d\bar{P}}{2\pi}\right] \exp\left[i[\bar{P}(T)B - \bar{P}(0)A]\right] \exp\left\{i \int_0^T \left(-\frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{2}{R^2}\bar{P}^2 + \right. \right. \\ & \left. \left. + 2i\frac{\bar{p}}{R}(\alpha_e + \gamma_e)\right) dt\right\} \int [dQ] \exp\left[i \int_0^T \left(-\dot{\bar{p}} - \frac{2}{R}\dot{x}\bar{P}\right) Q dt\right]. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Il est évident que l'intégration sur les $Q(t)$ s'effectue directement et produit une fonction

$\delta\left(\dot{\bar{p}} + \frac{2}{R}\bar{P}\dot{x}\right)$ de Dirac. Sa substitution dans l'équation (4.33) donne pour le propagateur l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
K_{OS}(B, T; A, 0) &= \frac{D'}{2\pi} \exp\left(i\frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2R^2}T\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp[(\alpha_e - \gamma_e)\bar{b}] \int [dx]_0^{\bar{b}} \\
&\times \int [d\bar{P}] \exp[i[\bar{P}(T)B - \bar{P}(0)A]] \exp\left\{i\int_0^T \left[-\frac{1}{2}\dot{x}^2 - \frac{2}{R^2}\bar{P}^2 + \right. \right. \\
&\left. \left. + 2i\frac{\bar{P}}{R}(\alpha_e + \gamma_e)\right] dt\right\} \delta\left(\dot{\bar{P}} + \frac{2}{R}\bar{P}\dot{x}\right) \quad (4.34)
\end{aligned}$$

Suivant la méthode en question, l'intégrale fonctionnelle sur les moments $\bar{P}(t)$ se réduit à une intégrale ordinaire sur la variable \bar{P}_0 , il suffit de remplacer la variable $\bar{P}(t)$ par la solution de l'équation différentielle du mouvement $\dot{\bar{P}} + \frac{2}{R}\bar{P}\dot{x} = 0$ dont la solution est

$$\bar{P}(t) = \bar{P}_0 \exp\left(-\frac{2}{R}x\right), \quad (4.35)$$

pour la condition initiale $\bar{P}(t=0) = \bar{P}_0 \equiv P_0$ avec $x(t=0) = 0$ et $x(T) = \bar{b}$.

Dans ces conditions, le facteur de composition est donné par

$$\left[\frac{d\bar{P}(t)}{dP_0} \frac{d\bar{P}(0)}{dP_0}\right]^{\frac{1}{2}} = \exp\left(-\frac{\bar{b}}{R}\right). \quad (4.36)$$

D'après ce résultat, le propagateur s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
K_{OS}(B, T; A, 0) &= \frac{D'}{2\pi} \exp\left(i\frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2R^2}T\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp[(\alpha_e - \gamma_e)\bar{b}] \exp\left(-\frac{\bar{b}}{R}\right) \times \\
&\times \int_{-\infty}^{+\infty} dP_0 \exp\left[iP_0\left(Be^{-\frac{2}{R}\bar{b}} - A\right)\right] \int [dx]_0^{\bar{b}} \exp\left\{-i\int_0^T dt \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + \right. \right. \\
&\left. \left. + \frac{2}{R^2}P_0 e^{-\frac{4}{R}x} - 2i\frac{P_0}{R}(\alpha_e + \gamma_e)e^{-\frac{2}{R}x}\right)\right\}. \quad (4.37)
\end{aligned}$$

Il est clair que l'intégrale fonctionnelle sur la variable $x(t)$ s'identifie au complexe conjugué du propagateur décrivant le mouvement d'une particule ($m = 1$) sous l'action d'un potentiel de Morse inversé à une dimension ;

$$V(x) = V_0 \left(e^{-2qx} - 2\lambda e^{-qx}\right) \text{ où } V_0 = \frac{-2}{R}P_0^2 \text{ et } 2\lambda V_0 = \frac{2i}{R}(\alpha_e + \gamma_e)P_0.$$

Comme le potentiel de Morse inversé ne possède pas d'états liés en dessous du demi-plan supérieur. Nous pouvons contourner cette difficulté en modifiant le contour d'intégration sur P_0 par rotation dans le plan complexe de la variable P_0 . Ainsi le contour modifié est formé d'un quart d'un cercle décrit dans le sens direct, centré en 0 et compris entre l'axe réel positif et l'axe imaginaire positif. Il n'existe pas de pôles P_0 situés à l'intérieur du contour fermé et l'intégrale sur l'arc tend vers 0 quand le rayon de cet arc tend vers ∞ . D'où, la rotation opérée sur le contour d'intégration change le potentiel de Morse inversé au potentiel de Morse standard. L'intégration sur les valeurs négatives P_0 est écartée car sa contribution est nulle (il n'existe pas d'états liés pour $P_0 < 0$).

Autrement dit

$$\oint_C f(P_0) dP_0 = \int_0^R f(P_0) dP_0 + \int_c f(P_0) dP_0 + \int_{iR}^0 f(P_0) dP_0 . \quad (4.38)$$

Comme aucun pôle P_0 n'est inclu dans C , l'intégration sur le contour fermé est nulle de plus l'intégration sur l'arc est nulle quand l'arc tend vers ∞ ; il résulte

$$\int_0^\infty f(P_0) dP_0 = - \int_{i\infty}^0 f(P_0) dP_0 = \int_0^\infty f(iP_0) idP_0 . \quad (4.39)$$

L'expression du propagateur (4.37) devient

$$\begin{aligned} K_{OS}(B, T; A, 0) &= \frac{D'}{2\pi} \exp\left(i \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}T}{2R^2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp\left[\left(\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}\right)\bar{b}\right] \times \\ &\times \int_0^{+\infty} idP_0 \exp\left[-P_0 \left(Be^{-q\bar{b}} - A\right)\right] \times \\ &\times \int [dx]_0^{\bar{b}} \exp\left\{-i \int_0^T dt \left(\frac{\dot{x}^2}{2} - V_0(e^{-2qx} - 2\lambda e^{-qx})\right)\right\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

avec

$$V_0 = \frac{2}{R^2} P_0^2, \quad q = \frac{2}{R} \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{\alpha_e + \gamma_e}{2P_0} R. \quad (4.41)$$

Elle peut être aussi écrite sous la forme

$$\begin{aligned}
K_{OS}(B, T, A, 0) &= \frac{D'}{2\pi} \exp\left(i \frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{2R^2} T\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp\left[\left(\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}\right) \bar{b}\right] \\
&\times \int_0^{+\infty} idP_0 \exp\left[-P_0 \left(Be^{-q\bar{b}} - A\right)\right] K_M^*(\bar{b}, T; 0, 0), \quad (4.42)
\end{aligned}$$

où $K_M^*(\bar{b}, T; 0, 0)$ représente le complexe conjugué du propagateur associé au potentiel de Morse standard. Le calcul de ce propagateur a été donné dans la référence [6]

$$\begin{aligned}
K_M^*(\bar{b}, T; 0, 0) &= \frac{2}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{i(E+\eta)T} \int_0^{+\infty} \frac{idS}{\sin(S)} e^{-iR(\alpha_e + \gamma_e)S} \times \\
&\times \exp\left[-iP_0 \cot(S) \left(e^{-2\frac{\bar{b}}{R}} + 1\right)\right] I_{2\nu} \left(\frac{2iP_0 e^{-\frac{\bar{b}}{R}}}{\sin(S)}\right), \quad (4.43)
\end{aligned}$$

où $2\nu = (-8(E + \eta)q^{-2})^{\frac{1}{2}}$ et $\eta = \frac{1}{2R^2} (k_0^2 - \frac{1}{4})$. $I_{2\nu}$ sont les fonctions de Bessel modifiées ($\text{Re } 2\nu > -1$).

Dans le but de séparer les variables $p_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}}$, p_0 et S , nous utilisons la formule de Hille-Hardy écrite ci-dessous. Cela consiste à faire les changements suivants dans l'expression de $K_M^*(\bar{b}, T; 0, 0)$:

$$\begin{aligned}
z &= e^{-2iS}, \quad y = -2p_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}} \quad \text{et} \quad x = -2p_0 \\
\sin(S) &= \frac{z^{-\frac{1}{2}}(1-z)}{2i}, \quad \cos(s) = \frac{z^{-\frac{1}{2}}(1+z)}{2}. \quad (4.44)
\end{aligned}$$

nous obtenons alors

$$\begin{aligned}
K_M^*(\bar{b}, T; 0, 0) &= \frac{2}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{i(E+\eta)T} \int_0^{+\infty} -2dS e^{iS} e^{-iR(\alpha_e + \gamma_e)S} \times \\
&\times \left\{ \frac{1}{1-z} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{1+z}{1-z}\right) (x+y)\right) \right\} I_{2\nu} \left(\frac{2\sqrt{xyz}}{1-z}\right). \quad (4.45)
\end{aligned}$$

A l'aide de la formule de Hille- Hardy [8]

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{1-z} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{1+z}{1-z} \right) (x+y) \right\} I_\gamma \left(\frac{2\sqrt{xyz}}{1-z} \right) \\
= & \sum_{n=0}^{\infty} z^n n! \frac{\exp \left[-\frac{1}{2}(x+y) \right]}{\Gamma(\gamma+n+1)} (xyz)^{\frac{\gamma}{2}} L_n^\gamma(x) L_n^\gamma(y), \tag{4.46}
\end{aligned}$$

valable pour $|z| < 1$, où $L_n^\gamma(x)$ sont les polynômes de Laguerre, le propagateur $K_M^*(\bar{b}, T; 0, 0)$ s'écrit maintenant comme :

$$\begin{aligned}
K_M^*(\bar{b}, T, 0, 0) = & \frac{2}{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-2dE}{2\pi} e^{i(E+\eta)T} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} n! \frac{\exp \left(-\frac{1}{2}(-2P_0 e^{-q\bar{b}} - 2P_0) \right)}{\Gamma(2\nu+n+1)} \times \right. \\
& \left. \times (-2P_0)^\nu (-2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}})^\nu L_n^{2\nu}(-2P_0) L_n^{2\nu}(-2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}}) \times C(E+\eta) \right\}, \tag{4.47}
\end{aligned}$$

où les variables x , y et z ont été séparées, avec

$$C(E+\eta) = \int_0^{+\infty} dS e^{-i(2n+1+2\nu+R(\alpha_e+\gamma_e))S}. \tag{4.48}$$

En substituant le résultat obtenu dans l'expression (4.42), le propagateur relatif au potentiel de l'oscillateur singulier s'écrit,

$$\begin{aligned}
K_{OS}(B, T; A, 0) = & \frac{2D'}{\pi q} \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{dE}{2\pi} e^{i(E+\eta)T} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp \left[\left(\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R} \right) \bar{b} \right] \times \\
& \times \int_0^{+\infty} idP_0 \exp \left[-P_0 \left(B e^{-q\bar{b}} - A \right) \right] \times \\
& \times \sum_{n=0}^{\infty} n! \frac{\exp \left(P_0 e^{-q\bar{b}} + P_0 \right)}{\Gamma(2\nu+n+1)} \times \\
& \times (-2P_0)^\nu (-2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}})^\nu L_n^{2\nu}(-2P_0) L_n^{2\nu}(-2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}}) \times C(E+\eta) \Big\}, \tag{4.49}
\end{aligned}$$

Pour effectuer l'intégration sur la variable P_0 , nous choisissons comme contour d'intégration

le demi cercle dans le demi plan supérieur c'est-à-dire

$$\int_0^{+\infty} f(P_0) dP_0 = - \int_0^{+\infty} f(-P_0) dP_0, \quad (4.50)$$

et en changeant $(E + \eta)$ par $-(E + \eta)$, le propagateur (4.49) prend la forme

$$\begin{aligned} K_{OS}(B, T, A, 0) &= -\frac{2D'}{\pi q} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi i} e^{-i(E+\eta)T} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp \left[\left(\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R} \right) \bar{b} \right] \times \\ &\times \int_0^{+\infty} dP_0 \exp \left[P_0 \left(B e^{-q\bar{b}} - A \right) \right] \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} n! \frac{\exp \left(-P_0 e^{-q\bar{b}} - P_0 \right)}{\Gamma(2\nu' + n + 1)} \times \right. \\ &\times \left. (2P_0)^{\nu'} (2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}})^{\nu'} L_n^{2\nu'}(2P_0) L_n^{2\nu'}(2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}}) \times C(-(E + \eta)) \right\}, \end{aligned} \quad (4.51)$$

où 2ν et $2\nu'$ sont données par les quantités suivantes

$$2\nu = \left(-2(E + \eta)R^2 \right)^{\frac{1}{2}} \longrightarrow 2\nu' = \left(2(E + \eta)R^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (4.52)$$

4.4 Fonction de Green

La forme de l'équation(4.51) indique que le propagateur admet l'écriture suivante

$$K_{OS}(B, T; A, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE}{2\pi i} e^{-i(E+\eta)T} G_{OS}(B, A; E) \quad (4.53)$$

où $G_{OS}(B, A; E)$ est la fonction de Green associée au potentiel de l'oscillateur singulier transformée de Fourier du propagateur

$$\begin{aligned} G_{OS}(B, A; E) &= \frac{-2D'}{\pi q} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp \left[\left(\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R} \right) \bar{b} \right] \times \\ &\times \int_0^{+\infty} dP_0 \exp \left[P_0 \left(B e^{-q\bar{b}} - A \right) \right] \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} n! \frac{\exp \left(-P_0 e^{-q\bar{b}} - P_0 \right)}{\Gamma(2\nu' + n + 1)} \times \right. \\ &\times \left. (2P_0)^{\nu'} (2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}})^{\nu'} L_n^{2\nu'}(2P_0) L_n^{2\nu'}(2P_0 e^{-2\frac{\bar{b}}{R}}) C(-(E + \eta)) \right\}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

L'intégration sur la variable \bar{b} est possible en faisant le changement de variable $z = 2p_0 e^{-q\bar{b}}$ et en utilisant la formule suivante

[8]

$$\int_0^{+\infty} dt e^{-St} t^\beta L_n^\delta(t) = \frac{\Gamma(\beta+1)\Gamma(\delta+n+1)}{n!\Gamma(\delta+1)} S^{-\beta-1} F(-n, \beta+1, \delta+1; S^{-1}) \quad (4.55)$$

valable pour $[\operatorname{Re} \beta > -1, \operatorname{Re}(s) > 0]$, l'intégration donne le résultat suivant

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{b} \exp\left(\left(\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}\right)\bar{b}\right) \exp(P_0 B e^{-q\bar{b}}) \exp(-P_0 e^{-q\bar{b}}) (2P_0 e^{-q\bar{b}})^{\nu'} L_n^{2\nu'}(2P_0 e^{-q\bar{b}}) \\ &= \frac{(2P_0)^{\frac{\alpha_e + \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}} \Gamma\left(\nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}\right) \Gamma(2\nu' + n + 1)}{q n! \Gamma(2\nu' + 1)} \left(\frac{1}{2} - \frac{B}{2}\right)^{-\nu' - \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}} \times \\ & \times F\left(-n, \nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}, 2\nu' + 1; \left(\frac{1}{2} - \frac{B}{2}\right)^{-1}\right), \end{aligned} \quad (4.56)$$

où nous avons posé

$$t = 2P_0 e^{-q\bar{b}}, \quad S = \frac{1}{2}(1 - B), \quad \beta = \nu' - 1 + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}, \quad \delta = 2\nu'. \quad (4.57)$$

De même, l'intégration sur la variable P_0 s'effectue en utilisant la relation (4.55) après avoir changer $-2p_0$ en y

$$\begin{aligned} & \frac{1}{q} \int_0^{+\infty} dP_0 (2P_0)^{\frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}} \exp(-P_0 A) \exp(-P_0) (2P_0)^{\nu'} L_n^{2\nu'}(2P_0) \\ &= \frac{1}{2q} \frac{\Gamma\left(\nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q} + 1\right) \Gamma(2\nu' + n + 1)}{n! \Gamma(2\nu' + 1)} \left(\frac{1}{2} + \frac{A}{2}\right)^{-1 - \nu' - \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}} \times \\ & \times F\left(-n, \nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q} + 1, 2\nu' + 1; \left(\frac{1}{2} + \frac{A}{2}\right)^{-1}\right), \end{aligned} \quad (4.58)$$

ici, nous avons posé

$$t = 2p_0, \quad S = \frac{1}{2}(1 + A), \quad \beta = \nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q}, \quad \delta = 2\nu'. \quad (4.59)$$

Pour donner à la fonction de Green la forme la plus symétrique possible, nous utilisons les deux propriétés suivantes relatives à la fonction spéciale gamma et à la fonction hypergéométrique successivement

$$\Gamma(2z) = \frac{2^{2z-1}\Gamma(z)\Gamma(z+\frac{1}{2})}{\sqrt{\pi}}, \quad (4.60)$$

$$F(\alpha, \beta, 2\beta; z) = \left(1 - \frac{z}{2}\right)^{-\alpha} F\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2}, \beta + \frac{1}{2}; \left(\frac{z}{2-z}\right)^2\right). \quad (4.61)$$

Nous arrivons alors à l'expression de la fonction de Green exprimée en fonction des anciennes variables a et b :

$$\begin{aligned} G_{OS}(b, a; E) &= \frac{D'}{\pi q^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{2^{2n}} \frac{(\nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q})\Gamma^2(\nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q})}{n!\Gamma^2(2\nu' + 1)} \times \\ &\times (\cos 2b \cos 2a)^n (\sin^2 b \cos^2 a)^{k_1+1} \cos^{-2} a \times \\ &\times F\left(-\frac{n}{2}, \frac{-n}{2} + \frac{1}{2}, \nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q} + \frac{1}{2}, 2\nu' + 1; \cos^{-2} 2b\right) \times \\ &\times F\left(-\frac{n}{2}, \frac{-n}{2} + \frac{1}{2}, \nu' + \frac{\alpha_e - \gamma_e - \frac{1}{R}}{q} + \frac{3}{2}, 2\nu' + 1; \cos^{-2} 2a\right) \times \\ &\times C(-(E + \eta)). \end{aligned} \quad (4.62)$$

4.5 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés

Afin d'obtenir, pour cette particule, les énergies des états liés et les fonctions d'onde correspondantes, nous considérons la fonction de Green donnée par l'expression (4.62) et intégrons sur la variable S

$$C(-(E + \eta)) = \int_0^\infty dS e^{-i(2n+1+2\nu'+R(\alpha_e+\gamma_e))S} = \frac{1}{-i(2n+1+2\nu'+R(\alpha_e+\gamma_e))}, \quad (4.63)$$

les niveaux d'énergie du spectre discret sont alors les solutions de l'équation

$$2n+1+2\nu'+R(\alpha_e+\gamma_e) = 0, \quad (4.64)$$

c'est-à-dire

$$E_n = \frac{1}{2R^2} [2n+1+R(\alpha_e+\gamma_e)]^2 - \eta. \quad (4.65)$$

En remplaçant α_e, γ_e et η par leurs expressions, nous obtenons les valeurs de l'énergie suivantes :

$$E_n(R) = \frac{1}{2R^2} \left[\left(2n+k_1+\frac{1}{2} \right)^2 + (2k_0+1)(2n+k_1+1) \right], \quad n=0,1,2\dots \quad (4.66)$$

Les fonctions d'onde se déduisent directement à partir des résidus correspondant aux pôles autrement dit

$$\Psi_n(b)\Psi_n^*(a) = \lim_{E \rightarrow E_n} \frac{E - E_n}{i} G_{OS}(b, a; E). \quad (4.67)$$

Nous aurons finalement

$$\begin{aligned} \Psi_n(b)\Psi_n^*(a) &= (-1)^n \frac{R^2 D'(-n-k_1-1)\Gamma^2(-n-k_1-1)\Gamma(-n-k_0-k_1)}{4\pi n!\Gamma^2(-2n-k_0-k_1)} \\ &\quad (\cos 2b \cos 2a)^n (\sin^2 b \cos^2 a)^{k_1+1} \cos^{-2} a \\ &\quad F\left(-\frac{n}{2}, \frac{-n}{2} + \frac{1}{2}, -n-k_1 - \frac{1}{2}; \cos^{-2} 2b\right) \\ &\quad F\left(-\frac{n}{2}, \frac{-n}{2} + \frac{1}{2}, -n-k_1 + \frac{1}{2}; \cos^{-2} 2b\right). \end{aligned} \quad (4.68)$$

4.6 Problème de Coulomb singulier sur un cercle

Dans cette partie, nous analysons le comportement de cette même particule évoluant sur un cercle sous l'action du potentiel de Coulomb singulier. Ce potentiel est défini par

$$V^{CS}(\vec{s}) = -\frac{\mu}{R} \frac{s_0}{|s_1|} - \frac{1}{2} \frac{p^2 - \frac{1}{4}}{s_1^2}, \quad (4.69)$$

ou encore

$$V^{CS}(\varphi) = -\frac{\mu}{R} \cot |\varphi| - \frac{1}{2} \frac{p^2 - \frac{1}{4}}{R^2 \sin^2 \varphi}, \quad (4.70)$$

μ est la constante de couplage et p est un paramètre réel.

En suivant le même procédé de calcul utilisé dans le paragraphe précédent, nous parvenons à la construction des intégrales de chemin dans l'espace des phases pour ce système suivant la prescription de l'ordre de Weyl

$$\begin{aligned} K_{CS}(b, T; a, 0) &= \frac{1}{\sqrt{R}} \int \left[\frac{dp_\varphi d\varphi}{2\pi} \right] \exp \left\{ i \int_0^\infty dt \left[p_\varphi \dot{\varphi} - \frac{1}{2R^2} p_\varphi^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{2R^2} \left(2\mu R \cot |\bar{\varphi}| + \frac{p^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \bar{\varphi}} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.71)$$

où $a = \varphi_0$, $b = \varphi_N$ et $\varphi \in [-\pi, \pi]$.

Notre objectif est de ramener le système de Coulomb singulier à un système familier notamment celui correspondant au potentiel de Pöschl-Teller. Pour atteindre ce but, nous limitons, en premier lieu, notre étude à la région $\varphi \in [0, \pi]$ et effectuons, en deuxième lieu, les transformations suivantes :

- une transformation spatiale $\varphi \longrightarrow \theta$ ($\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$) définie par

$$e^{i\varphi} = \cos \theta, \quad (4.72)$$

cette transformation est possible si nous prolongeons la variable φ au domaine complexe : $\text{Re } \varphi = 0$, $0 \leq \text{Im } \varphi < \infty$ (voir Appendice ; Figure 2).

- nous rendons également la constante de couplage μ complexe en mettant $k = i\mu$ de

telle sorte que

$$\mu \cot \varphi = k (1 - 2(\sin^2 \theta)^{-1}). \quad (4.73)$$

Suite à ce prolongement, la partie cinétique ainsi que la mesure se transforment, en utilisant la relation $\sin^2 \varphi = -\frac{\sin^4 \theta}{4 \cos^2 \theta}$, comme suit :

$$\frac{1}{2R^2} p_\varphi^2 = -\frac{1}{2R^2} \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} p_\theta^2. \quad (4.74)$$

$$dp_\varphi d\varphi = dp_\theta d\theta. \quad (4.75)$$

En insérant ces changements dans l'équation (4.71), nous obtenons la nouvelle expression du propagateur exprimée en fonction de la variable θ et paramètre k

$$\begin{aligned} K_{CS}(b, T; a, 0) &= \frac{1}{\sqrt{R}} \int \left[\frac{dp_\theta d\theta}{2\pi} \right] \exp \left\{ i \int_0^T dt \left[p_\theta \dot{\theta} + \frac{1}{2R^2} p_\theta^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{k}{R} - \frac{2k}{R \sin^2 \theta} - \frac{4 \cos^2 \theta}{2R^2} \left(\frac{p^2 - \frac{1}{4}}{\sin^4 \theta} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Pour écrire le terme cinétique sous la forme standard, effectuons, en deuxième lieu, la transformation temporelle ($t \rightarrow s$) suivante [18]

$$\frac{dt}{ds} = -\frac{\sin^2 \theta}{\cos^2 \theta}. \quad (4.77)$$

Finalement, le propagateur associé au potentiel de Coulomb singulier devient

$$\begin{aligned} K_{CS}(b, S; a, 0) &= \frac{1}{\sqrt{R}} \int \left[\frac{dp_\theta d\theta}{2\pi} \right] \exp \left[i \frac{2Rk}{2R^2} S \right] \exp \left\{ i \int_0^S ds \left[p_\theta \dot{\theta} - \frac{1}{2R^2} p_\theta^2 - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2R^2} \left(\frac{-2Rk}{\cos^2 \theta} + \frac{-4(p^2 - \frac{1}{4})}{\sin^2 \theta} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.78)$$

avec

$$\varepsilon = 2Rk + \frac{1}{4}, \quad k_0^2 = -2Rk + \frac{1}{4} \quad \text{et} \quad k_1^2 = -4 \left[\left(p^2 - \frac{1}{4} \right) - \frac{1}{4} \right]. \quad (4.79)$$

La représentation discrète du propagateur peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned}
K_{CS}(b, S; a, 0) &= \frac{1}{\sqrt{R}} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=0}^{N-1} dp_n \prod_{n=1}^{N-1} d\theta_n (2\pi)^{-N} \exp \left[i \frac{\varepsilon - \frac{1}{4}}{2R^2} S \right] \times \\
&\times \exp \left\{ i \sum_{n=0}^{N-1} \left[p_n (\theta_{n+1} - \theta_n) - \frac{1}{2R^2} p_n^2 \epsilon_s + 2 \left(\frac{k_0^2 - \frac{1}{4}}{\cos^2 \theta_n} - \frac{k_1^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta_n} \right) \epsilon_s \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{4.80}$$

D'après l'équation (4.78) et suite aux transformations utilisées, nous voyons que l'intégrale de chemin à une dimension pour le problème de Coulomb singulier (avec la restriction $0 < p^2 \leq \frac{1}{2}$) coïncide avec l'intégrale de chemin à une dimension pour le problème de l'oscillateur singulier et se ramènent à celle du système bien connu de Pöschl-Teller. Par conséquent elles admettent les mêmes solutions :

- Le remplacement des paramètres k_0 et k_1 par ceux relatifs au problème de Coulomb singulier donne naissance à des énergies exprimées dans le domaine complexe par

$$E_n(R) = \frac{1}{2R^2} \left[[2n + 1 + k_0 + k_1]^2 - 2i\mu R \right]. \tag{4.81}$$

- Le problème de Coulomb singulier admet les mêmes fonctions d'onde que le problème de l'oscillateur singulier. Elles sont données par

$$\Psi_{n,R,\mu}^{CS}(\varphi) = C_n(R, \mu) \Psi_{n,R}^{OS}(\varphi), \tag{4.82}$$

où $C_n(R, \mu)$ est une constante de normalisation.

Il est évident que les valeurs de l'énergie sont exprimées dans le domaine complexe et par conséquent ce résultat n'est pas acceptable physiquement. Néanmoins, nous pouvons obtenir des résultats intéressants si nous considérons les cas importants suivants :

4.6.1 Cas particuliers :

Premier cas : lorsque $p^2 = \frac{1}{4} \rightarrow k_1^2 = 1$

la transformation-dualité établit la connection entre le problème de Coulomb pure et celui

de l'oscillateur singulier avec $k_1^2 = 1$. Alors en comparons les équations

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 2Rk + \frac{1}{4}, & k_0^2 &= -2Rk + \frac{1}{4}, & k_1^2 &= -4 \left[\left(p^2 - \frac{1}{4} \right) - \frac{1}{4} \right] \\ \varepsilon - k_0^2 &= 4Rk, \end{aligned} \tag{4.83}$$

et

$$\varepsilon = (2n + 1 + k_0 + k_1)^2, \tag{4.84}$$

et en écrivant cette dernière sous la forme

$$\varepsilon - k_0^2 = (2n + 1 + k_1)^2 + (2n + 1 + k_1)(2k_0), \tag{4.85}$$

comme les deux systèmes admettent les mêmes solutions, nous pouvons écrire l'égalité suivante

$$(2n + 1 + k_1)^2 + (2n + 1 + k_1)(2k_0) = 4Rk. \tag{4.86}$$

Ceci nous permet d'écrire

$$k_0 = -(n + 1) + i \frac{\mu R}{n + 1}, \tag{4.87}$$

et finalement nous obtenons le spectre d'énergie

$$E_n(R) = \frac{(n + 1)^2}{2R^2} - \frac{\mu^2}{2(n + 1)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{4.88}$$

Deuxième cas : l'orsque $k_1^2 = \frac{1}{4} \rightarrow p^2 + \frac{1}{4} = \frac{3}{16}$

la transformation-dualité établit la connection entre le système de Coulomb singulier et le système de l'oscillateur pure.

Par analogie

$$\begin{aligned} \left(2n + \frac{3}{2}\right)^2 + \left(2n + \frac{3}{2}\right)(2k_0) &= 4Rk \\ \Rightarrow k_0 &= -\left(n + \frac{3}{4}\right) + \frac{i\mu R}{n + \frac{3}{4}}, \end{aligned} \quad (4.89)$$

il est facile d'arriver au spectre d'énergie suivant

$$E_n(R) = \frac{\left(n + \frac{3}{4}\right)^2}{2R^2} - \frac{\mu^2}{2\left(n + \frac{3}{4}\right)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.90)$$

4.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons réussi à calculer explicitement et exactement le propagateur pour le problème de l'oscillateur singulier sur un cercle en utilisant la technique de la fonctionnelle delta de Dirac. Par ailleurs, au moyen d'une transformation spatiale, nous avons pu établir un lien entre le problème de l'oscillateur singulier et celui de Coulomb singulier sur un cercle. Dans les deux cas, le propagateur a été transformé à celui associé au potentiel de Pöschl-Teller. Grâce à ce lien, nous avons déduit les solutions du problème de Coulomb singulier à partir de celles du problème de l'oscillateur singulier. Les spectres d'énergie obtenus sont conformes à ceux existants dans la littérature.

Chapitre 5

Conclusion

Dans ce travail, nous avons utilisé le formalisme de l'intégrale de chemin dans les espaces de configuration et de phases pour résoudre, avec une démarche claire et simple, quelques problèmes de la mécanique quantique non relativiste. Aussi, nous avons utilisé la procédure de développement autour du mid-point et du post-point. Toutes les fois que cela est possible, les résultats obtenus sont comparés à ceux calculés dans le cadre de la mécanique classique et de la mécanique quantique standard.

Nous avons étudié, dans le deuxième chapitre, le mouvement d'une particule libre mais astreinte à se déplacer sur la surface d'un cône au moyen d'une contrainte représentant l'équation du cône. Grâce à des transformations successivement spatiale et temporelle appropriées, les variables ont été séparées, le spectre continu de l'énergie et les fonctions d'onde ont été exactement déduits.

Dans le troisième chapitre, nous avons reconsidéré le problème traité précédemment. Cette même particule subie maintenant l'action d'un oscillateur quadratique inverse. Comme le potentiel présente une singularité à l'origine, il a paru nécessaire de rejeter cette singularité à l'infini par l'utilisation d'une transformation spatiale suivie d'une transformation temporelle. La fonction de Green de ce système est ramenée à celle associée à un potentiel de type Morse dont la solution est connue depuis longtemps. Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde des états liés ont été convenablement obtenus.

Le quatrième chapitre concerne l'étude, par l'approche de l'intégrale de chemin dans l'espace des phases, de deux problèmes sur un cercle en l'occurrence le problème de l'oscillateur singulier

et le problème de Coulomb singulier. La technique utilisée est basée essentiellement sur la fonctionnelle delta de Dirac et le formalisme Hamiltonien. L'expression du propagateur de l'oscillateur singulier a été développée avec un maximum de détails et de clarté. Le spectre discret de l'énergie est exact et concorde parfaitement avec celui de la littérature par contre les fonctions d'onde n'ont pas été convenablement déduites. Grâce à une transformation-dualité, nous avons établi une relation entre le système de Coulomb singulier et celui de l'oscillateur singulier. Ce lien est à l'origine de la similitude de la forme des deux propagateurs. Pour les deux problèmes, le propagateur a été ramené à celui du problème bien connu de Pöschl-Teller abordé auparavant dans le cadre de la formulation de Schrödinger et celle de l'intégrale de chemin dans l'espace de configurations. Autrement dit, la transformation -dualité nous a permis de déduire de manière fructueuse et élégante les solutions du problème de Coulomb singulier à partir de celles du problème de l'oscillateur singulier.

Bibliographie

- [1] F. Mila (Mécanique quantique avancée II : Introduction à l'intégrale de chemin) EPFL (2004).
- [2] D. C. Mc Laughlin and L. S. Schulman, *J. Math. Phys.*, **12** (1971) 2520.
- [3] H. Kleinert, "Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets", (World Scientific, Singapore 1990).
- [4] W. Langguth and A. Inomata, *J. Math. Phys.*, **20** (1979) 499.
- [5] L. Chetouani, A. Chouchaoui and T. F. Hammann, *phys. Lett. A* **161** (1991).
- [6] A. Anderson and S. B. Anderson, Phase Space Path Integration of Integrable Quantum Systems, *Annals of Physics*, **199** (1990) 155-186.
- [7] I. H. Duru, *Phys. Rev. A*, **30** (1984) 1629.
- [8] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products ; Academic Press, New York, (1965).
- [9] R. P. Feynman and A. R. Hibbs "Quantum Mechanics and path integrals" (Mc Graw-Hill, New York) (1965).
- [10] C. Grosche and F. Steiner "Handbook of Feynman path Integrals", Springer tracts in Modern Physics (1998).
- [11] B. Bentag , Thèse de Magister (Solutions exactes de quelques problèmes quantiques par l'approche path-integral) (1993)
- [12] M. Bentaiba, M. Benkaddour, L. Chetouani and T. F. Hammann, *J. Phys. I France* **4** (1994) 7-27.
- [13] I. H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett. B*, **84** (1979) 185 ; *Fortschr. Phys.*, **30** (1982) 401

- [14] H. Kleinert : path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and polymer physics (World Scientific, Singapore) (1990).
- [15] D. Peak and A. Inomata, *J. Math. Phys.*, **10** (1969) 1422 ; L. Chetouani and T. F. Hammann, *J. Math. Phys.*, **27** (1986) 2944.
- [16] M. S. Allel, Mémoire de Magister (Etude de systèmes quantiques par l'intégrale de chemin) (2010).
- [17] L. G. Mardoyan, G. S. Pogosyan and A. N. Sissakian ; arxiv : quant-ph/0303016v1 4 Mars 2003.
- [18] I. H. Duru (Path Integral representation of the symmetric Rosen-Morse Potential) Miramare-Trieste September (1983).

ANNEXE

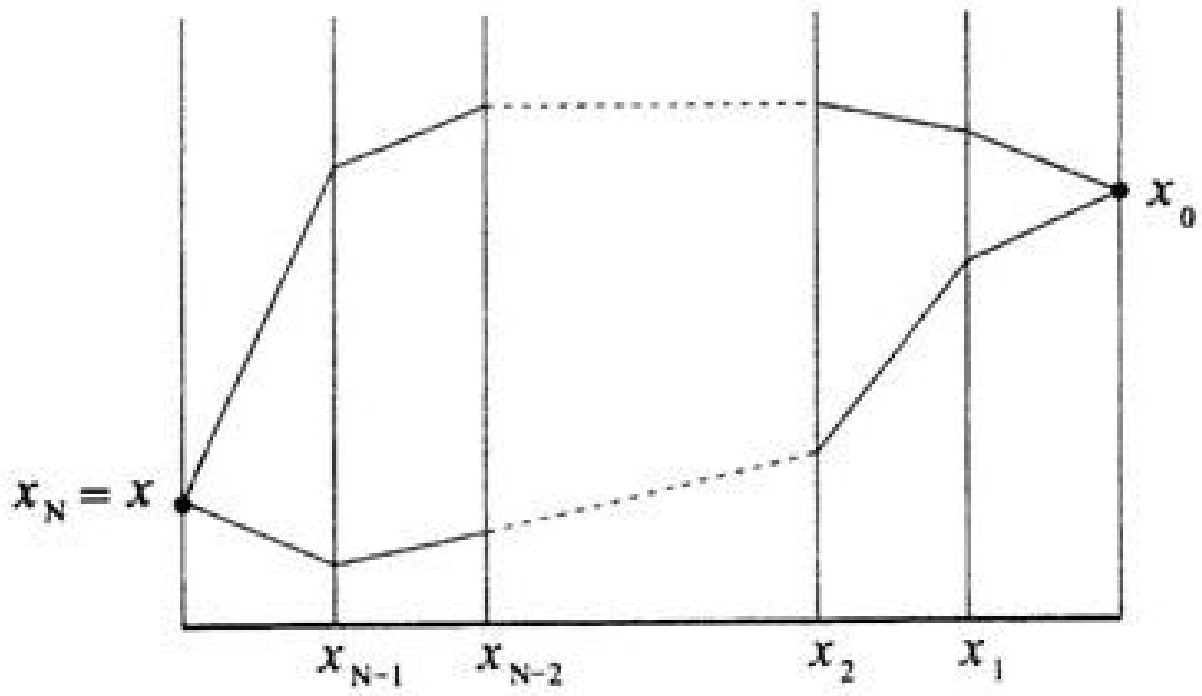


Fig. 1: Exemples de trajectoires qui interviennent dans la somme sur les chemins.

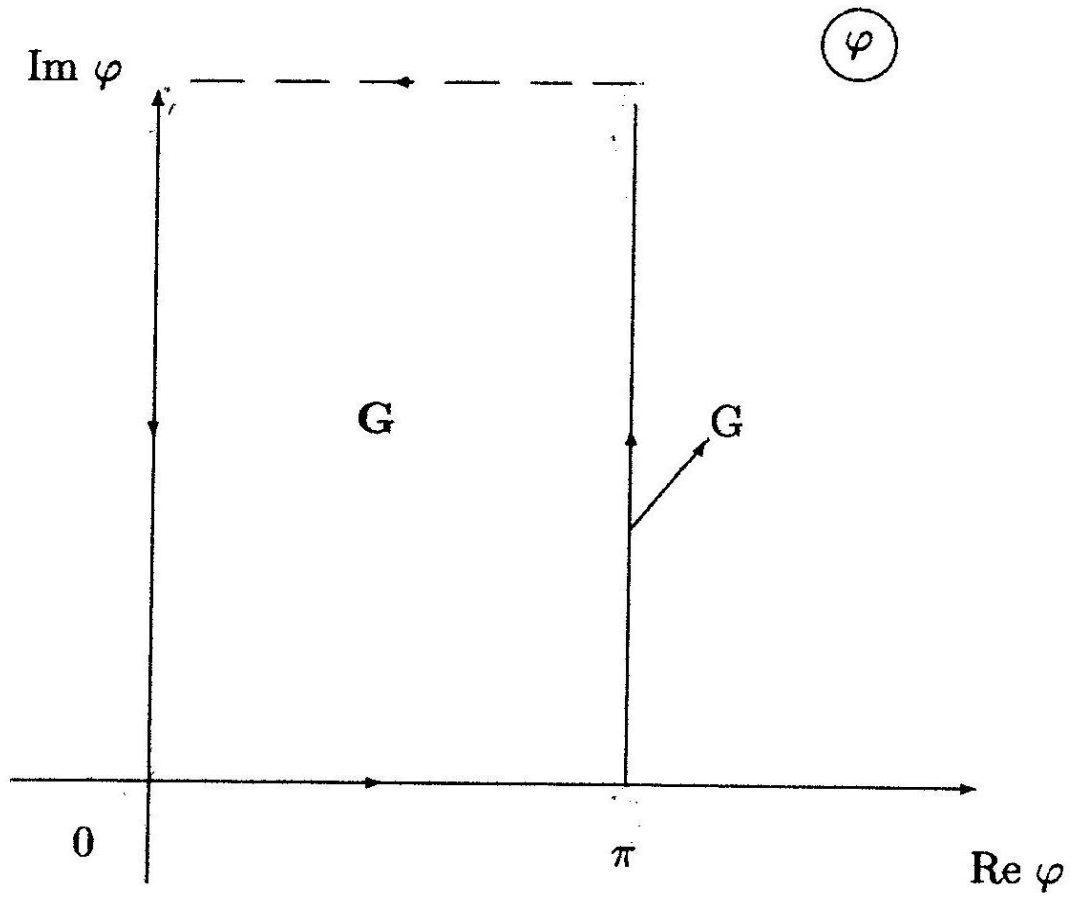


Fig. 2 : Domaine $G = \{0 \leq \text{Re } \varphi \leq \pi; 0 \leq \text{Im } \varphi < \infty\}$ dans le plan complexe de φ .

ملخص

الهدف من هذا العمل هو دراسة بعض مسائل ميكانيك الكم الغير نسبي في إطار نظرية تكامل مسالك Feynman، حيث عولجت أربع مسائل باستخدام تقنية التحويلات الفضائية و الزمنية بالإضافة إلى بعض العلاقات الرياضية اللازمة لغرض حلها بطرق بسيطة.

في الفصل الثاني، درست حركة جسيم حر لكنه مجبر بواسطة عقبة على البقاء فوق سطح مخروط. هذه العقبة تمثل معادلة المخروط. لإجراء الحساب في نظام الإحداثيات القطبية، أعتمدت وصفة نقطة المنتصف (mid-point) و بفضل تحويلين فضائي و زمني مناسبين تم فصل متغيرات دالة Green مما سمح باستنتاج طيف الطاقة و دوال الموجة المرافقة.

في الفصل الثالث أعيدت دراسة المسألة السابقة لكن في هذه المرة الجسيمة المتحركة على سطح المخروط خاضعة لتأثير كمون الهزاز المربع المعكوس. تمت معالجة مشكلة النقطة الشاذة للكمون باستخدام تحويلين فضائي و زمني مختارين بعناية. كتبت عبارة الناشر في إطار وصفة النقطة النهائية (Post-point) على شكل جداء ناشرين. يخص الأول مسألة هزاز Morse و يمثل الثاني القسم الزاوي للمسألة المدروسة.

عولج الناشر الزاوي باستعمال تكامل المسالك المتعلق بمسألة (le rotateur rigide). النتائج المتحصل عليها تتمثل في قيم الطاقة للطيف المتقطع و دوال الموجة الخاصة بالحالات المترابطة و كذلك استنتاج حالتين خاصتين هما الهزاز التوافقي و الهزاز المربع المعكوس في الفضاء الحر.

نوقشت في الفصل الرابع مسألتين على دائرة باستخدام نظام الإحداثيات القطبية في فضاء الأطوار. تتعلق الأولى بحركة جسيمة خاضعة لكمون الهزاز الشاذ أما الثانية فتخص حركة جسيمة تحت تأثير كمون كولمب الشاذ.

عولجت مسألة الهزاز الشاذ بتفاصيل وافية باستعمال تقنية الدالة دلتا-Dirac حيث حول الناشر إلى ذلك الخاص بكمون Pöschl-Teller مما سمح بالحصول على طيف الطاقة المتقطع و دوال الموجة المنتظمة للحالات المترابطة.

بفضل ثنائية تحويل مناسبة حول الناشر الخاص بمسألة كمون كولمب الشاذ إلى ذلك الخاص بمسألة كمون Pöschl - Teller و بذلك تم الربط بين تكاملي المسالك للمسألتين المدروستين مما سمح باستنتاج حلول مسألة كولمب الشاذ من خلال حلول مسألة الهزاز الشاذ بدون إجراء أي حساب.

مفاتيح الكلمات: تكامل المسالك، الكمون، الناشر، دالة Green، طيف الطاقة، دوال الموجة، الحالات المترابطة.

Abstract

The purpose of this work is the study of some non-relativistic quantum mechanics systems in the context of Feynman path integral approach by using the coordinate time transformations technique and mathematical tools necessary to solve them as simple as possible. Whenever possible, the wave functions and the corresponding spectra are compared with those obtained in the framework of classical and quantum mechanics.

The second chapter is devoted to the study of the motion of a free particle but constrained to move on the conical surface by means of a constraint which represent the equation of the cone. We have adopted the mid-point principle and with suitable coordinate and time transformations, variables were separated, the spectrum and wave functions of bound states have been accurately deduced.

In the third chapter we have reconsidered the problem discussed above. This same particle is subjected to the action of an inverse quadratic oscillator. As the potential has a singularity at the origin, it seemed necessary to reject it at infinity by using a spatial transformation followed by a temporal one. Green's function of this problem is reduced to that associated to the Morse potential whose solution has long been known. The discrete spectrum and wave functions of bound states were obtained.

The fourth chapter deals with the study, in the phase space path integral approach, of two problems on a circle which are the singular oscillator and the singular Coulomb problems. The technique used is based mainly on the delta functional and on the Hamiltonian formalism. The expression of the propagator of the singular oscillator has been developed with maximum detail and clarity. The discrete spectrum of the energy is exact and fully consistent with the literature. Through a duality transformation, we have established a relation-ship between the singular oscillator and the singular Coulomb systems. This link is at the origin of the similarity of the two propagators expressions form. For both problems, the propagator has been reduced to that of the well-known Pöschl-Teller problem discussed earlier in the context of the Schrödinger formulation and in the configuration space path integral. In other words, the duality transformation has allowed us and without making calculations to deduce the solutions of the singular Coulomb problem from those of singular oscillator one.

Keywords: Path Integrals, propagator, Green's function, Spatial and Temporal transformations, Delta Functional, energy spectrum, wave functions, bound states.

Résumé

L'objet de ce travail est l'étude de quelques potentiels de la mécanique quantique non relativiste par l'approche des intégrales de chemins en se servant de la technique des transformations spatio-temporelles ainsi que des outils mathématiques indispensables pour les résoudre le plus simplement possible. Toutes les fois que cela est possible, les fonctions d'onde et les spectres correspondant sont comparés à ceux obtenus dans le cadre de la mécanique classique et de la mécanique quantique standard.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude du mouvement d'une particule libre mais astreinte à se déplacer sur la surface d'un cône au moyen d'une contrainte représentant l'équation de ce dernier. Nous avons adopté le principe du mid-point et grâce à une transformation spatiale adaptée et une transformation temporelle convenablement choisie, les variables ont été séparées, le spectre et les fonctions d'onde des états liés ont été exactement déduits.

Dans le troisième chapitre nous avons reconsidéré le problème traité précédemment. Cette même particule subie maintenant l'action d'un oscillateur quadratique inverse. Comme le potentiel présente une singularité à l'origine, il a paru nécessaire de la rejeter à l'infini par l'utilisation d'une transformation spatiale suivie d'une transformation temporelle. La fonction de Green relative à ce problème est ramenée à celle associée au potentiel de Morse dont la solution est connue depuis longtemps. Le spectre discret de l'énergie et les fonctions d'onde des états liés ont été obtenus.

Le quatrième chapitre concerne l'étude, par l'approche de l'intégrale de chemin dans l'espace des phases, de deux problèmes sur un cercle en l'occurrence le problème de l'oscillateur singulier et le problème de Coulomb singulier. La technique utilisée est basée essentiellement sur la fonctionnelle delta de Dirac et le formalisme Hamiltonien. L'expression du propagateur de l'oscillateur singulier a été développée avec un maximum de détails et de clarté. Le spectre discret de l'énergie est exact et concorde parfaitement avec celui de la littérature. Au moyen d'une transformation-dualité, nous avons établi une relation entre le système de Coulomb singulier et celui de l'oscillateur singulier. Ce lien est à l'origine de la similitude de la forme des deux propagateurs. Pour les deux problèmes, le propagateur a été ramené à celui du problème bien connu de Pöschl-Teller abordé auparavant dans le cadre de la formulation de Schrödinger et celle de l'intégrale de chemin dans l'espace de configurations. Autrement dit, la transformation -dualité nous a permis de déduire de manière fructueuse et élégante les solutions du problème de Coulomb singulier à partir de celles du problème de l'oscillateur singulier.

Mots clés : Intégrales de Chemin, Propagateur, Fonction de Green, Transformation Spatiale et Temporelle, Fonctionnelle delta de Dirac, Spectre d'énergie, Fonctions d'onde, Etats liés.