

République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة الجيلالي بونعاما خميس مليانة
Université de Djilali Bounaama de Khemis Miliana
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière



Mémoire de fin d'étude
*En vue de l'obtention d'un diplôme de **Master** en Physique*
Spécialité Physique Théorique

Thème :

**Application de la méthode de Duru-Kleinert
sur un système physique d'un potentiel de
Deng-Fan**

Présenté par :

- CHERIEF Houria
- ALLICHE Ines

SOUTENU LE : 23/ 05/ 2017

Devant le jury composé de :

- | | | |
|----------------|-----------|--------------------------------|
| • M. Douici | Président | M. C. B Univ. Djilali Bounaama |
| • H. Boukabcha | Encadreur | M. C. B Univ. Djilali Bounaama |
| • M. Sadouki | Examineur | M. C. B Univ. Djilali Bounaama |

Année Universitaire 2016/2017

Remerciements

Ces cinq mois consacrée au partie à la réalisation de ce mémoire de fin d'étude sont passés à une allure folle mais resteront inoubliables grâce aux belles rencontres que nous avons eu la chance de faire et à l'expérience formidablement enrichissante qu'elles nous ont apportées. Nous nous sommes levées tous les matins (sauf les weekends !) Pendant ces mois avec le plaisir d'aller travailler, sincèrement ; avec l'envie d'avancer, de ne pas décevoir ceux qui nous ont fait confiance et de présenter ce travail de mémoire avec fierté.

Au terme de ce travail, Nous tenons à remercier Dieu le tout puissant de nous avoir donné le courage, la volonté et la patience pour achever ce travail.

Nous voulions également pour cela remercier du fond du cœur notre encadreur Monsieur Boukabcha Hocine pour son encadrement et ses nombreux conseils. Merci pour votre confiance que vous nous avez données et votre faculté étonnante de pouvoir remonter le moral en quelques mots. Nous vous somme sincèrement reconnaissante pour tout ce que vous nous avez apporté, votre expérience inestimable, votre façon de transmettre le savoir et espère pouvoir un jour vous rendre le pareille. Merci pour l'implication que vous nous avez donnée dans des projets passionnants, et pour les très bons moments passés en votre compagnie.

Nous remercions tous les membres du jury pour avoir accepté de juger ce travail et de participer à la soutenance de ce mémoire.

En fin, pour leur soutien sans faille, inconditionnel et permanent, Nous remercions de tous nos cœurs nos parents, les membres de notre famille et toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

*Zhemis Miliana, Mai 2017.
Sherief Houria, Alliche Ines*



Dédicace

Je dédie cet humble travail :

∞ A mes chers et respectueux *parents* vraiment aucun dédicace ne saurait exprimer mon attachement, mon affection, je vous offre ce modeste travail en témoignage de tous les sacrifices et l'immense tendresse dont m'avez toujours su mon combler.

∞ A mes *sœurs*, mes deux *frères* et mon *bon frère*, qui ont été toujours là pour moi.

∞ Sans oublier *Marwa, Lidia* et *Sofiane*.

∞ A mon *binôme*.

∞ A tous ceux qui ont contribué de près ou de loin pour cette mémoire soit possible.

Cherief Houria

Dédicace

Je dédie ce travail de fin d'étude :

A mes parents

A mes frères

A mes amies

A mon binôme

A mes proches



Alliche Ines

ملخص

تخص هذه الرسالة معالجة مسألة كمون Deng-Fan في إطار ميكانيكا الكم غير النسبية بواسطة نظرية تكامل المسالك لـ Feynman . وهذا باستخدام تقنية التحويلات الفضائية والزمنية لـ Duru-Kleinert بالإضافة الى بعض العلاقات الرياضية اللازمة لغرض حلها بطرق بسيطة. حُول الناشر الخاص بمسألة كمون Deng-Fan الى ذلك الخاص بمسألة الكمون Pöschl-Teller المبدل مما سمح لنا بالحصول على طيف الطاقة المتقطع ودوال الموجة المنتظمة للحالات المترابطة حيث قارنا هذه النتائج بنتائج أخرى موجودة سابقا.

مفاتيح الكلمات

تكامل المسارات، الناشر، طيف طاقة، دوال الموجات.

Résumé

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, nous avons traité par l'intermédiaire des intégrales de chemin le potentiel de Deng-Fan via la méthode des transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert, ainsi que des outils mathématiques indispensables pour le résoudre le plus simplement possible.

Le propagateur associé au potentiel de Deng-fan a ramené à celui de problème bien connue de Pöschl-Teller modifié, donc les fonctions d'ondes et le spectre d'énergie correspondant sont obtenues et comparées à ceux calculé dans littérature.

Mots clés

Intégrales de chemin, propagateur, potentiel de Deng-Fan, transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert, potentiel de Pöschl-Teller.

Abstrat

This work is devoted to the study of the Deng-Fan potential in the context of Feynman path integral formalism, by using the space time transformation of Duru-Kleinert, and mathematical tools necessary to solve them as simple as possible.

The propagator associated to the Deng-Fan potential has reduced to another well known propagator of the modified Pöschl-Teller potential, so the discret energy spectrum and wave functions of bound states were obtained and compared with other previous results.

Keywords :

Path Integral, propagator, Deng-Fan potential, space time transformation of Duru-Kleinert, modified Pöschl-Teller potential energy spectrum, wave functions, bound states.



Dédicace

Je dédie cet humble travail :

- ☞ A mes chers et respectueux *parents* vraiment aucun dédicace ne saurait exprimer mon attachement, mon affection, je vous offre ce modeste travail en témoignage de tous les sacrifices et l'immense tendresse dont m'avez toujours su mon combler.
- ☞ A mes *sœurs*, mes deux *frères* et mon *bon frère*, qui ont étaient toujours là pour moi.
- ☞ Sans oublier *Marwa* , *Lidia* et *Sofiane*.
- ☞ A mon *binôme*.
- ☞ A tous ceux qui ont contribué de près ou de loin pour cette mémoire soit possible.

Cherief Houria

Dédicace

Je dédie ce travail de fin d'étude :

A mes parents

A mes frères

A mes amies

A mon binôme

A mes proches



Alliee Tnes

Table des matières

Introduction	2
1 Le formalisme des intégrales de chemin	5
1.1 Introduction	5
1.2 Le propagateur de Feynman	5
1.2.1 Définition de propagateur	5
1.2.2 Idées menant à la formulation d'intégrale de chemin	6
1.3 Le propagateur de forme discrète	8
1.4 Intégrale de chemin en coordonnées sphériques	9
1.5 Le propagateur en fonction de l'énergie et la fonction d'onde	15
2 Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert	17
2.1 Introduction	17
2.2 La méthode Duru-Kleinert	18
2.2.1 Systèmes unidimensionnels	18
2.2.2 Dérivation de la correction quantique ΔV	21
3 Etude des états "l" relative au potentiel de Deng-Fan via les intégrales de chemins de Feynman.	27
3.1 Introduction	27
3.2 L'intégrale de chemin pour le potentiel de Deng-Fan	28
3.2.1 L'approximation du potentiel centrifuge	30
3.3 Transformation Spatio-temporelle	34
3.4 Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes de potentiel de Deng-Fan	38
3.4.1 Les résultats et discussions	41
Conclusion	45

Introduction

Au début de 20^{ème} siècle, la physique expérimental a amassé plusieurs phénomènes étranges non expliquées qui a démontré l'insuffisance de la physique classique. Les tentatives de découvrir des structures théoriques pour expliquer ces nouveaux phénomènes se fait clairement sentir avec la controverse sur la nature de la lumière qui se comporte tantôt comme des ondes, tantôt comme des particules. Cette incohérence est complètement résolu avec l'apparition des théories de la mécanique quantique, parmi ces théories on a [1]:

La théorie de la quantification des niveaux d'énergies due à Bohr-Sommerfeld en 1915 : elle repose essentiellement sur la formulation hamiltonienne de la mécanique classique, cette théorie a eu un succès considérable, elle a été considérée par Bohr-Sommerfeld comme " la voie royale vers la quantification".

La théorie des matrices "quantification canonique" : en 1926 Heisenberg a élaboré le 1^{ère} formalisme de la mécanique quantique qui a l'idée d'introduire des opérateurs, pour quantifier le mouvement d'un système, repose aussi sur la formulation Hamiltonienne du problème de mécanique classique correspondant.

En 1927 Schrödinger a formulé un 2^{ème} formalisme de la mécanique quantique cette approche est basée sur le concept de la fonction d'onde ou il stipule que l'état d'un système est donné par une fonction d'onde dont l'évolution en temps et que les niveaux d'énergies d'un atome correspondent aux états stationnaires.

Il existe un autre formalisme équivalent au formalisme de Schrödinger et de Heisenberg, qui appeler le formalisme de l'intégral de chemin, ce dernier évite le travail par les opérateurs et les remplacés par un produit infinie des intégrales. La mise en pied du formalisme de l'intégrale de chemin en mécanique quantique introduit par Richard Feynman [2] dans son thèse soutenue en Mai 1942 qu'est basée sur les résultats d'un travail de Dirac , en raison de la second guerre mondiale ces résultats ne seront publier qu'en 1948.

Feynman [3] s'appuie sur deux affirmations, qui doivent être perçues comme des postulats:

- L'amplitude de probabilité $U(x_b, t_b; x_a, t_a)$ est une somme des termes, chacun d'entre eux correspondant à un chemin reliant le point de départ (x_a, t_a) au point d'arrivée (x_b, t_b) .
- La contribution de chaque chemin ou bien la fonction de transformation communément connue le propagateur est analogue à $(e^{\frac{i}{\hbar}S})$ où S est l'action classique.

Feynman a inclut dans cette action le principe de moindre action pour ignorer les autres chemins qui sont très proche de chemin classique, donc il a initié une véritable révolution car il a proposé de travailler avec la formulation de Lagrangien qui a des nombreux avantages, a titre d'exemple elle se prête aisément à une généralisation relativiste puis que le raisonnement est directement inscrit dans l'espace-temps, ainsi elle a permis de traiter des cas simples comme l'oscillateur harmonique et la particule libre [4].

La formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin a buté sur le problème de l'atome d'hydrogène qu'est resté coincé durant une trentaine d'années, sur le plan mathématique ce problème est très compliquée et contient plusieurs inconvénients qui ont été contournés depuis le calcul de propagateur associé au problème de l'atome d'hydrogène en 1979 [5]. Le succès du calcul de ce propagateur est considéré comme un tournant décisif dans le développement du formalisme de l'intégrale de chemin et introduit une nouvelle transformation spatio-temporelle qu'est appelé d'après Ismail Hakki Duru et Hagen Kleinert. La méthode de Duru-Kleinert permis à l'intégrale de chemin de jeter des ponts aux domaines contigus de la physique mathématique et la physique théorique.

L'intégrale de chemin est un outil puissant pour l'étude de la mécanique quantique car elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique classique et mécanique quantique. Ce formalisme est rapidement imposé en différent domaines de la physique théorique avec sa généralisation à la théorie quantique des champs [6], mécanique quantique, physique statistique car nous pouvons en effet, calculer à partir du propagateur de Feynman, la fonction de partition, l'énergie libre, les fonctions d'onde et le spectre des énergies du système physique considéré [7]. En plus le formalisme de Feynman trouve une large application en géophysique et dans le domaine des sciences financières [8].

Beaucoup de potentiels singulières n'ont pas pu résolues par l'intégrale de Feynman, parmi ces potentiels on cite particulièrement le potentiel de Deng-Fan qui a d'abord été proposé par Deng et Fan en 1957 comme une proposition intéressante pour les systèmes moléculaires [9], ce potentiel n'admet pas des solutions analytiques exactes pour un nombre quantique arbitraire dans un régime relativiste et non relativiste [10]. Le potentiel de Deng-Fan a été utilisé pour décrire les spectres d'énergie moléculaire diatomique, et il est très

utile dans plusieurs branches telque physique chimique, spectroscopie moléculaire, physique moléculaire [11].

Notre travail s'inscrit dans le cadre de l'application des techniques basées sur les intégrales de chemins, dans la résolution des problèmes de la mécanique quantique. L'objet de ce travail est de solutionner le problème du potentiel de Deng-Fan par l'approche des intégrales de chemin en se servant de la méthode des transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert.

Ce mémoire, comporte trois chapitres :

Le premier chapitre, consiste un rappel sur l'intégrale de chemin, nous écrivons d'abord l'expression du propagateur sous une forme discrète sur des intervalles de longueur ε , et présenter la formule du propagateur en coordonnées sphériques, puis nous définissons une autre forme du propagateur en fonction de l'énergie du système et les fonctions d'ondes correspondantes.

Dans *le deuxième chapitre*, nous évoquons d'une façon détaillée la méthode des transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert, et trouver l'expression de la correction quantique ΔV .

Le troisième chapitre, concerne une traitement de l'expression du propagateur associé au potentiel de Deng-Fan et l'application de la technique de Duru-Kleinert, avec un maximam de détail et de clarté, ainsi nous déterminons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde relatifs aux états " l ", puis on compare nos résultats avec ceux donnés dans la littérature.

On termine notre travail par une conclusion.

1

Le formalisme des intégrales de chemin

1.1 Introduction

La formulation de la mécanique quantique basée sur le formalisme des intégrales de chemin peut paraître plus compliquée du point de vue mathématique, mais elle est bien adaptée à l'étude des systèmes à un grand nombre de degré de liberté, car Feynman a ramené le calcul de l'intégrale fonctionnelle à une intégrale multiple de dimension N (où $N \rightarrow \infty$).

Nous présentons dans ce chapitre les notions élémentaires concernant les intégrales de chemin. On commence par l'idée de Feynman qui utilisé pour écrire la forme générale de propagateur, puis nous faisons un changement de coordonnées pour écrire l'expression du propagateur en coordonnée sphérique. D'autre part, nous écrivons une autre formule de propagateur en fonction de l'énergie et les fonctions d'ondes correspondantes.

1.2 Le propagateur de Feynman

1.2.1 Définition de propagateur

Le propagateur de Feynman $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ est défini comme l'amplitude de probabilité pour qu'une particule part de la position x_a à l'instant initial t_a et arrive à la position x_b à l'instant final t_b . Cette définition s'écrit comme [12] :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \begin{cases} \langle x_b | U(t_b, t_a) | x_a \rangle & \text{pour } t_b > t_a \\ 0 & \text{pour } t_b < t_a \end{cases} . \quad (1.1)$$

où $U(t_b, t_a)$ est l'opérateur d'évolution entre l'instant t_a et t_b .

1.2.2 Idées menant à la formulation d'intégrale de chemin

Pour construire son formalisme [13], Feynman a imaginé un dispositif expérimental identique à celui de Young en remplaçant la source lumineuse par un faisceau d'électron, considérons une expérience à deux fentes représentée sur la figure 1.1, chacune des particules (électrons) émise par la source à gauche a une certaine probabilité $P(x)$ de passer la double fente et d'être détectée à la position x à droite. Supposons qu'on ferme la fente F_2 et en laissant la fente F_1 ouverte, la probabilité de détection est alors changée, est noté par $P_1(x)$. De même, la probabilité de détection avec la seule fente F_2 ouverte est donnée par $P_2(x)$.

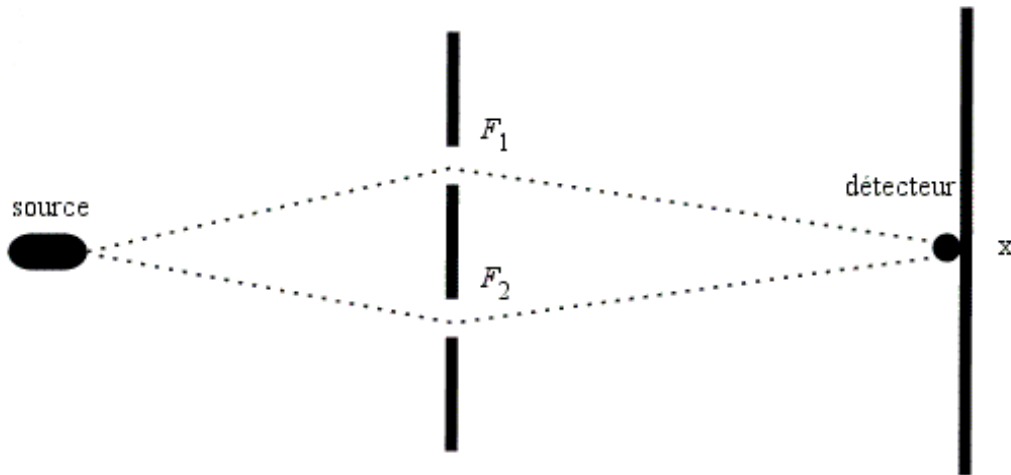


Figure 1.1 : Expérience à deux fentes F_1 et F_2 .

La mécanique quantique (expérimentalement) prédit que la probabilité de détection $P(x)$ avec les deux fentes ouvertes ne vaut pas la somme des deux probabilités avec chacune des fentes individuellement, alors cette dernière contredit les lois de probabilité classiques.

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x). \quad (1.2)$$

Nous pouvons conclure que le faisceau d'électron est comporté comme un faisceau de lumière monochromatique.

D'après la théorie classique, il existe deux moyens possibles pour que la particule atteigne le détecteur : soit elle passe par la fente F_1 , soit par la fente F_2 . Classiquement on s'attend alors à ce que la probabilité totale de détection soit égale à la somme des probabilités associés à chacune de ces voies.

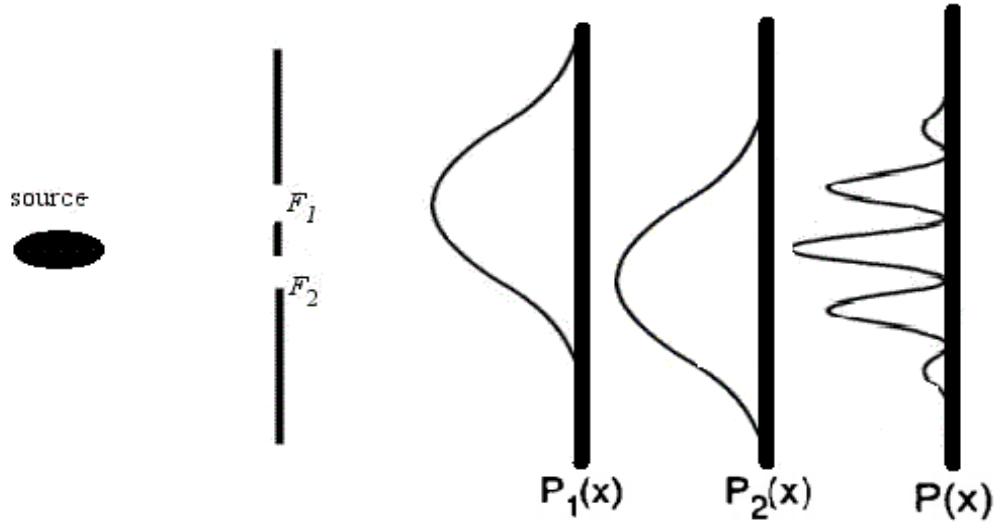


Figure 1.2 : Les probabilités $P_1(x)$, $P_2(x)$ et $P(x)$ pour qu'une particule soit détectée à la position x .

Feynman a l'idée d'associer une amplitude de probabilité à tous les chemins suivis pour donner une explication de problème précédent, tel que les probabilités se combinent en sommant leurs amplitudes.

$$P(x) = |\Psi(x)|^2, \quad (1.3)$$

où

$$\Psi(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x),$$

on

$$\begin{aligned} P(x) &= |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \\ &= |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 + 2\Psi_1(x)\Psi_2(x) \\ &= P_1(x) + P_2(x) + 2\Psi_1(x)\Psi_2(x). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Par la suite Feynman généralise ses résultats au cas d'une particule se déplace entre deux points d'espace-temps (x_a, t_a) à (x_b, t_b) . Supposons que la source des particules soit bien localisée à la position x_a et que le détecteur enregistre seulement les particules qui arrivent précisément au point x_b , avec t_a est l'instant d'émission et t_b est l'instant de détection. Donc les amplitudes de détection $\Psi(x)$, $\Psi_1(x)$ et $\Psi_2(x)$ sont des propagateurs de Feynman $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$, on obtient :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = K_1(x_b, t_b; x_a, t_a) + K_2(x_b, t_b; x_a, t_a). \quad (1.5)$$

on introduit plus d'écrans, chacun percé de plusieurs fentes, comme il est représenté dans la figure 1.3, pour chaque combinaison de fente possible il faut ajouter un terme dans la somme.

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_n K_n(x_b, t_b; x_a, t_a). \quad (1.6)$$

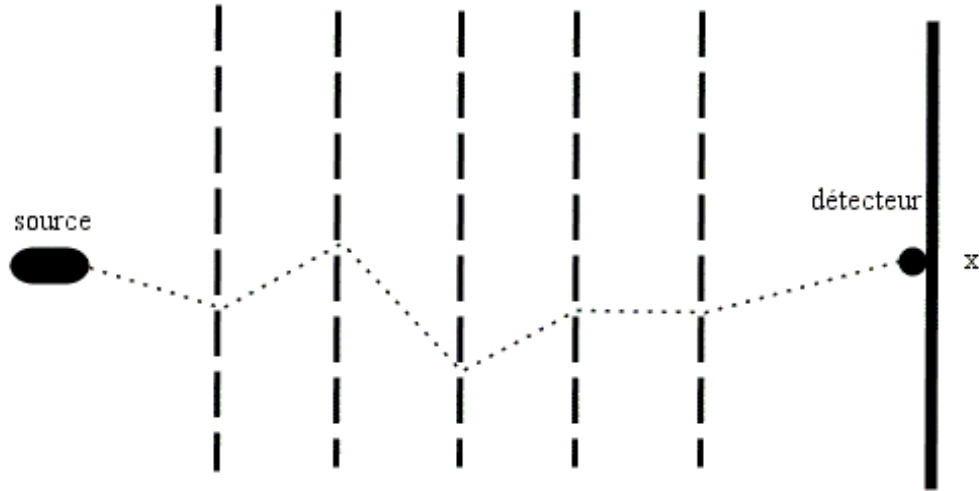


Figure 1.3 : La situation hypothétique où la source et le détecteur sont séparés par plusieurs écrans, chacun percé de plusieurs fentes.

1.3 Le propagateur de forme discrète

Le propagateur qui gouverne l'évolution d'une particule de masse M entre deux points consécutifs x_j et x_{j-1} a été défini par la formule de Feynman-Dirac, ce propagateur se met sous cette forme [8, 14] :

$$K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) = \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_j\right], \quad (1.7)$$

où

$$S_j = \int_{t_{j-1}}^{t_j} L(x_j, \dot{x}_j) dt.$$

En subdivisant l'intervalle de temps T en $(N + 1)$ intervalles élémentaires égaux. Le propagateur sous la forme générale s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle \\ &= \prod_{j=1}^N \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \right] \prod_{j=1}^{N+1} K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}), \end{aligned} \quad (1.8)$$

avec

$$\begin{aligned} x_b &= x_{N+1} \quad \text{et} \quad t_b = t_{N+1} \\ x_a &= x_0 \quad \text{et} \quad t_a = t_0 \end{aligned}$$

nous injectons l'expression de Feynman-Dirac (1.7) dans la formule générale (1.8) il vient que :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2i\pi\hbar\epsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_j \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_N \right], \quad (1.9)$$

tel que l'action total est

$$S_N = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\epsilon} (\Delta x_j)^2 - \epsilon V(x_j) \right]. \quad (1.10)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x_j = x_j - x_{j-1} \\ \epsilon = t_j - t_{j-1} = \frac{T}{N+1} \\ T = t_b - t_a \end{array} \right. .$$

1.4 Intégrale de chemin en coordonnées sphériques

Il y'a plusieurs systèmes physique qui possède une symétrie rotationnelle, dans la mécanique quantique cette propriété est importante pour trouver les fonctions d'ondes et les énergies correspondantes des systèmes. L'équation de Schrödinger d'une symétrie rotationnelle est transformée en coordonnées sphériques, donc il est séparables à une partie radiale qui contient des informations spéciales sur les systèmes dynamiques, et différentes parties angulaires qui sont universelles et leurs solutions sont connues.

Dans l'intégrale de chemin cette transformation de coordonnées est possible mais initialement les choses deviennent compliquées. L'un de ces complications est représenté lorsqu'on étudier la présence d'une barrière centrifuge qui élimine la possibilité de faire "Time sliced".

Le propagateur à trois dimensions s'écrit sous la forme suivante [8] :

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \left[\int_{\vec{r}_a}^{\vec{r}_b} D\vec{r}(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left[\frac{M}{2} (\Delta \vec{r}_j)^2 - V(r) \right] dt \right] \right] \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\prod_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}_j \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_N \right], \quad (1.11)
 \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
 t_b &= t_{N+1} ; \quad t_a = t_0 \\
 \vec{r}_b &= \vec{r}_{N+1} ; \quad \vec{r}_a = \vec{r}_0
 \end{aligned}$$

action totale est de cette forme

$$S_N = \sum_{j=1}^{N+1} S_j = \sum_{j=1}^{N+1} \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2\vec{r}_j \cdot \vec{r}_{j-1}) - \varepsilon V(r_j). \quad (1.12)$$

Nous allons aborder maintenant l'intégrale de chemin à trois dimensions en coordonnées sphériques (r, θ, φ) , où le système des coordonnées sphériques est défini par :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases}, \quad (1.13)$$

tel que l'élément de volume s'écrit en coordonnées sphérique comme suit :

$$d\vec{r}_j = r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j, \quad (1.14)$$

en substituant cette élément de volume dans l'équation (1.11) on arrive à l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\
 &\quad \times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j \right] \right], \quad (1.15)
 \end{aligned}$$

on peut exprimer l'action élémentaire comme :

$$S_j = \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} \cos \Theta_{j,j-1}) - \varepsilon V(r_j), \quad (1.16)$$

où

$$\Theta_{j,j-1} = (\vec{r}_j; \vec{r}_{j-1})$$

$$\cos \Theta_{j,j-1} = \cos \theta_j \cos \theta_{j-1} + \sin \theta_j \sin \theta_{j-1} \cos (\Delta \varphi_j). \quad (1.17)$$

et la mesure prend cette forme :

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{1}{\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{M}} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N d\vec{r}_j &= \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \\ &\times \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right]. \end{aligned} \quad (1.18)$$

L'expression de propagateur précédente n'est pas appropriée pour l'intégration en raison de la présence des termes $(-\frac{i}{\hbar} \frac{M}{\varepsilon} r_j r_{j-1} \cos \Theta_{j,j-1})$, cette dernière est séparable à une partie radiale et une partie angulaire.

Pour une évolution explicite de la partie angulaire du propagateur nous allons utiliser la formule suivante (voir Gradshteyn et Ryzhik [15], p.980, Eq. (8.534))

$$\begin{aligned} e^{im\rho \cos \varphi} &= (2)^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \sum_{k=0}^{+\infty} \left(\frac{1}{2} + k\right) \\ &\times (i)^k (m\rho)^{-\frac{1}{2}} J_{k+\frac{1}{2}}(m\rho) P_k(\cos \varphi), \end{aligned} \quad (1.19)$$

on pose

$$z = m\rho, \quad (1.20)$$

donc

$$e^{iz \cos \varphi} = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \sum_{k=0}^{+\infty} (2k+1) i^k J_{k+\frac{1}{2}}(z) P_k(\cos \varphi). \quad (1.21)$$

l'expression de la fonction de Bessel est :

$$J_n(x) = \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(-1)^p}{p!(n+p)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2p+n}, \quad (1.22)$$

si

$$x = -u, \quad (1.23)$$

alors

$$\begin{aligned} J_n(-u) &= \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(-1)^p}{p!(n+p)!} \left(\frac{-u}{2}\right)^{2p+n} \\ &= \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(-1)^p}{p!(n+p)!} \left(\frac{u}{2}\right)^{2p+n} (-1)^n. \end{aligned} \quad (1.24)$$

on a

$$J_n(ix) = i^n I_n(x), \quad (1.25)$$

on pose

$$y = iz, \quad (1.26)$$

on déduit que

$$\begin{aligned} e^{y \cos \varphi} &= \sqrt{\frac{-\pi}{2iy}} \sum_{k=0}^{+\infty} (2k+1) i^k J_{k+\frac{1}{2}}(-iy) P_k(\cos \varphi) \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2iy}} \sum_{k=0}^{+\infty} (2k+1) i^k (-1)^{k+\frac{1}{2}} \\ &\quad \times J_{k+\frac{1}{2}}(iy) P_k(\cos \varphi) \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2iy}} \sum_{k=0}^{+\infty} (2k+1) i^k (-1)^{k+\frac{1}{2}} (i)^{k+\frac{1}{2}} \\ &\quad \times I_{k+\frac{1}{2}}(y) P_k(\cos \varphi) \\ e^{y \cos \varphi} &= \sqrt{\frac{\pi}{2y}} \sum_{k=0}^{+\infty} (2k+1) I_{k+\frac{1}{2}}(y) P_k(\cos \varphi), \end{aligned} \quad (1.27)$$

$I_{k+\frac{1}{2}}(y)$ sont les fonctions de Bessel modifiée, et $P_k(\cos \varphi)$ sont les polynômes de Legendre.

On arrive à l'expression de propagateur suivante après le remplacement de la formule (1.27) :

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_b, t_b, \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\ &\quad \times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right] \\ &\quad \times \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l_1 \dots l_{N+1}=0}^{\infty} (2l_j + 1) \\ &\quad \times I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_l(\cos \Theta_{j,j-1}), \end{aligned} \quad (1.28)$$

tel que

$$l_j = l \quad \forall j = 1, \dots, N+1$$

ou encore

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \sum_{l_1 \dots l_{N+1}=0}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j^2 dr_j \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^N \left[\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_j}(\cos \Theta_{j,j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\
 &\times \left[(2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_{N+1}}(\cos \Theta_{j,j-1}) \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}} \right)^{\frac{1}{2}}, \tag{1.29}
 \end{aligned}$$

on a

$$\prod_{j=1}^N r_j = \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \prod_{j=1}^{N+1} (r_j r_{j-1})^{\frac{1}{2}}, \tag{1.30}$$

qui peut mettre aussi sous la forme :

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{4i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \left(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \right) \sum_{l_1 \dots l_{N+1}=0}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^N \left[\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_j}(\cos \Theta_{j,j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\
 &\times \left[(2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_{N+1}}(\cos \Theta_{j,j-1}) \right]. \tag{1.31}
 \end{aligned}$$

Les polynômes de Legendre peuvent décomposés vers les harmoniques sphériques :

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \times \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right] P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \tag{1.32}$$

à l'aide du théorème d'addition des harmoniques sphériques qui s'écrit comme suit :

$$P_l(\cos \theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_n, \varphi_n) Y_{l,m}^*(\theta_{n-1}, \varphi_{n-1}), \tag{1.33}$$

la formule (1.27) devient :

$$\begin{aligned}
 e^{y \cos \varphi} &= 2\pi \sqrt{\frac{2\pi}{y}} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) I_{l+\frac{1}{2}}(y) \\
 &\times \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_n, \varphi_n) Y_{l,m}^*(\theta_{n-1}, \varphi_{n-1}), \quad (1.34)
 \end{aligned}$$

En insérant cette dernière formule dans l'expression de propagateur :

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{i\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \left(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \right) \\
 &\sum_{l_1 \dots l_{N+1}=0}^{\infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^N I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \times I_{l_{N+1}+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_N r_{N-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \\
 &\sum_{m_j=-l_j}^{l_j} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{l_j, m_j}(\theta_j, \varphi_j) Y_{l_j, m_j}^*(\theta_{j-1}, \varphi_{j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \\
 &\sum_{m=-l_{N+1}}^{l_{N+1}} Y_{l_{N+1}, m}(\theta_{N+1}, \varphi_{N+1}) \\
 &\times Y_{l_{N+1}, m}^*(\theta_N, \varphi_N). \quad (1.35)
 \end{aligned}$$

en utilisant la relation d'orthogonalité des harmoniques sphériques qui est décrite par la relation suivante:

$$\int_0^{\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (1.36)$$

donc on trouve l'expression du propagateur suivante :

$$K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) P_l(\cos \Theta_{a,b}), \quad (1.37)$$

où le propagateur radial s'exprime également comme :

$$\begin{aligned}
 K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{i\hbar\varepsilon} \right)^{N+1} \left(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \times \prod_{j=1}^{N+1} I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right], \quad (1.38)
 \end{aligned}$$

En effet compte tenu du comportement asymptotique des fonctions de Bessel modifiée [14] :

$$I_\nu \left(\frac{z}{\varepsilon} \right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\varepsilon}{2\pi z} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{z}{\varepsilon} - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{z} \left(\nu^2 - \frac{1}{4} \right) \right\}, \quad (1.39)$$

$$I_{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{\left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar} \right)}{\varepsilon} \right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\varepsilon i\hbar}{2\pi Mr_j r_{j-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar \varepsilon} - \left(\frac{\varepsilon i\hbar}{2Mr_j r_{j-1}} \right) (l(l+1)) \right\}, \quad (1.40)$$

on arrive alors à la formulation du propagateur radial en coordonnées sphériques et en fonction de potentiel effective V_{eff} :

$$K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) = \left(\frac{1}{r_b r_a} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}(N+1)} \times \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty dr_j \right] \exp \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left\{ \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - \varepsilon V(r_j) - \frac{l(l+1)\hbar^2\varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}} \right\}, \quad (1.41)$$

où le potentiel effective est définie par l'expression suivante :

$$V_{eff} = V(r_j) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_j r_{j-1}}. \quad (1.42)$$

1.5 Le propagateur en fonction de l'énergie et la fonction d'onde

Dans le cas où l'état initial d'une particule n'est pas un état propre de position, le propagateur de Feynman ne s'applique pas directement. Il est possible qu'au lieu de la position initiale on connaisse plutôt l'énergie initiale de la particule. Dans ce cas il est commode d'introduire des propagateurs en fonction de l'énergie et la fonction d'onde. Cette généralisation permet également d'étudier non seulement la fonction d'onde finale de la particule, mais aussi son spectre d'énergie [16].

L'expression du propagateur en fonction de l'opérateur d'évolution s'écrit:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b, t_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a, t_a \rangle, \quad (1.43)$$

en introduisant la relation de fermeture à l'équation (1.43) :

$$\sum_{l,n}^{\infty} |l, n\rangle \langle l, n| = 1, \quad (1.44)$$

on obtient

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{l,n}^{\infty} \langle x_b, t_b | \exp(-\frac{iHT}{\hbar}) | l, n \rangle \langle l, n | x_a, t_a \rangle, \quad (1.45)$$

avec

$$\langle x, t | l, n \rangle = \psi_{n,l}(x, t), \quad (1.46)$$

l'équation (1.46) nous permet d'obtenir l'expression du propagateur suivante :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{l,n}^{\infty} \psi_{n,l}(x_b, t_b) \psi_{n,l}^*(x_a, t_a) \exp(-\frac{iE_{n,l}T}{\hbar}). \quad (1.47)$$

La fonction de Green est la transformée de Fourier du propagateur [17] :

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dT \exp(\frac{iET}{\hbar}) K(x_b, x_a; T). \quad (1.48)$$

L'évaluation du propagateur est souvent confronté au problème de singularité, ce dernier a été surmonter par l'introduction de la méthode des transformations spatio-temporelles du Duru-Kleinert.

2

Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert

2.1 Introduction

L'oscillateur harmonique et l'atome d'hydrogène sont deux problèmes d'essai bien connus en mécanique quantique. La formulation des intégrales du chemin est facilement applicable à le premier, mais pose des difficultés considérables pour l'atome d'hydrogène car son potentiel représente un problème dans l'intégrale de chemin euclidien. Duru et Kleinert ont invoqué pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stifel dans l'intégrale de chemin de potentiel de Coulomb, puis ils sont réussis à trouver un traitement pour l'atome d'hydrogène car ils sont utilisées une transformation spatiale associée par une transformation local du temps.

Il existe deux types de transformations temporelles :

- Une transformation globale : cette transformation prend le paramètre de temps t dans un nouveau paramètre de temps τ par

$$t = \rho(\tau) \quad ; \quad \tau = \rho^{-1}(t)$$

- Une transformation locale : est une transformation de temps dépendant de la position

$$d\tau = f[q(t)] dt$$

Ces deux transformations sont les plus utiles seulement lorsqu'ont les combinées avec une transformation de coordonnées appropriée [13].

Duru et Kleinert peuvent élaborer une transformation spatio-temporelle, qui appelle la transformation de Duru-Kleinert. Cette technique a permis de résoudre plusieurs problèmes non relativiste, qui sont plus compliqué et dans divers systèmes de coordonnées.

Dans ce chapitre on va mettre en place une nouvelle et plus souple formule des intégrales du chemins qui est indépendante de problème des potentiels singulières.

2.2 La méthode Duru-Kleinert

Dans cette section, on va expliquée la méthode de Duru-Kleinert pour un système unidimensionnel [8].

2.2.1 Systèmes unidimensionnels

L'opérateur de l'Hamiltonien est donné dans sa forme standard par :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (2.1)$$

Nous pouvons écrire l'opérateur de l'Hamiltonien auxiliaire comme :

$$\hat{H}_E = \hat{H} - E, \quad (2.2)$$

où E est l'énergie d'un system physique.

L'opérateur d'évolution du temps associé au l'Hamiltonien auxiliaire est défini par cette expression :

$$\hat{U}_E(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_E}, \quad (2.3)$$

L'amplitude associée à cet opérateur s'écrit comme :

$$\langle x_b | \hat{U}_E(t) | x_a \rangle = \langle x_b | e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}_E} | x_a \rangle, \quad (2.4)$$

L'intégration de l'équation (2.4) sur $t > 0$, nous donne l'expression de l'amplitude d'énergie fixe suivante :

$$(x_b | x_a)_E = \int_{t_a}^{\infty} dt_b \langle x_b | \hat{U}_E(t_b - t_a) | x_a \rangle, \quad (2.5)$$

où l'amplitude d'énergie fixe se met aussi sous cette forme :

$$(x_b | x_a)_E = \langle x_b | \hat{R} | x_a \rangle,$$

tel que \hat{R} est l'opérateur résolvante [8] :

$$\hat{R} = \frac{i\hbar}{E - \hat{H} + i\eta}. \quad (2.6)$$

avec η représente un décalage d'énergie.

L'équation (2.5) est signifié aussi à une amplitude de transition ou bien une fonction de Green, et peut reformuler comme suit :

$$\begin{aligned} G(x_b, x_a; E) &= (x_b | x_a)_E \\ &= \int_{t_a}^{\infty} dt_b \int Dx(t) \exp\left(\frac{iS_E[x]}{\hbar}\right), \end{aligned} \quad (2.7)$$

L'expression de l'action est

$$S_E[x] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{M}{2} \dot{x}^2(t) - V(x(t)) + E \right], \quad (2.8)$$

En choisissant deux fonctions arbitraires $f_l(x)$ et $f_r(x)$ multipliant à gauche et à droite respectivement. Ces fonctions sont appelées les fonctions Régulatrices, qui sont choisies d'une manière appropriées, son produit est $f(x)$.

on introduit l'opérateur de l'Hamiltonien auxiliaire modifié :

$$\hat{H}_E = f_l(x)(\hat{H} - E)f_r(x), \quad (2.9)$$

donc l'opérateur pseudo-temporel d'évolution est défini par :

$$\hat{U}_E(s) = f_r(x_b) \exp\left(\frac{-is\hat{H}_E}{\hbar}\right) f_l(x_a), \quad (2.10)$$

L'amplitude associée à cet opérateur est :

$$\langle x_b | \hat{U}_E(s) | x_a \rangle = f_r(x_b) f_l(x_a) \left\langle x_b \left| \exp\left(\frac{-is\hat{H}_E}{\hbar}\right) \right| x_a \right\rangle, \quad (2.11)$$

avec

$$dt = ds f(x). \quad (2.12)$$

Après l'intégration de l'équation (2.11) sur $s > 0$, on arrive alors à l'expression suivante:

$$\begin{aligned} (x_b | x_a)_E &= \langle x_b | \hat{R} | x_a \rangle \\ &= \int_0^{\infty} ds \langle x_b | \hat{U}_E(s) | x_a \rangle, \end{aligned} \quad (2.13)$$

sachant que l'opérateur résolvante est donné par :

$$\hat{R} = f_r(x) \frac{i\hbar}{f_l(x)(E - H + i\eta)f_r(x)} f_l(x). \quad (2.14)$$

L'équation (2.13) est appelé aussi la fonction de Green qui définit par :

$$\begin{aligned} G(x_b, x_a; E) &= \int_0^\infty K_E(x_b, x_a; s) ds \\ &= \int_0^\infty ds \left[f_r(x_b) f_l(x_a) \int Dx(s) \exp\left(\frac{iS_E^f[x]}{\hbar}\right) \right], \end{aligned} \quad (2.15)$$

l'action modifié est

$$S_E^f[x] = \int_0^S ds \left\{ \frac{M}{2f(x(s))} \dot{x}^2(s) - f(x(s)) [V(x(s)) - E] \right\}. \quad (2.16)$$

Supposons que le potentiel $V(x)$ est aussi compliqué qu'une évaluation directe de l'intégrale de chemin ne soit pas possible [14], et l'introduction de $f(x)$ a amené le terme cinétique à une forme inconvenante qui est $\left(\frac{M}{f(x)}\right)$, cette dépendance spatiale est résolue par une transformation de coordonnées suivante :

$$x = h(q), \quad (2.17)$$

et

$$dx = h'(q) dq, \quad (2.18)$$

la fonction $h(q)$ satisfait :

$$h'^2(q) = f(h(q)). \quad (2.19)$$

Alors l'action en fonction de la nouvelle coordonnée q est donné par :

$$S_E^{f,q} = \int_0^S ds \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2(s) - f(q(s)) [V(q(s)) - E] \right\}, \quad (2.20)$$

avec

$$f(q) = f(h(q)) ; V(q) = V(h(q)).$$

La fonction de Green (2.7) peut être liée à une autre fonction de Green qui est associé à l'action transformée (2.20) si cette action est étendue par une correction quantique ΔV , que nous allons la dérive par la suite.

$$\Delta V(q) = \frac{-\hbar^2}{4M} \left[\frac{h'''}{h'} - \frac{3}{2} \left(\frac{h''}{h'} \right)^2 \right]. \quad (2.21)$$

2.2.2 Dérivation de la correction quantique ΔV

Pour trouver l'expression de la correction quantique ΔV [17], on considère l'amplitude de l'opérateur d'évolution dans le pseudo temps comme suit:

$$\begin{aligned} \langle x_b | \hat{U}_E^N(\varepsilon_s(N+1)) | x_a \rangle &= \frac{f_r(x_b) f_l(x_a)}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s \hbar f_l(x_b) f_r(x_a) / M}} \\ &\times \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f(x_n) / M}} \right] \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_E^N \right], \end{aligned} \quad (2.22)$$

d'où

$$S_E^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1})} (\Delta x_n)^2 + \varepsilon_s [E - V(x_n)] f_l(x_n) f_r(x_{n-1}) \right]. \quad (2.23)$$

à partir de maintenant le potentiel $V(x)$ est omis comme étant inessentiel à la dérivation de la correction quantique ΔV .

L'équation (2.22) est composé à trois termes qui sont : le préfacteur, la mesure et l'action.

On va développer ces termes au tour du poste point, pour obtenir des corrections quantique associés à chaque terme, ces corrections sont rassemblées dans cette relation :

$$(1 + C)_T = (1 + C_{mes}) (1 + C_{act}) (1 + C_f) \quad (2.24)$$

1. *Le calcul de la correction sur la mesure C_{mes} :*

Le développement de la mesure au tour du poste point nous donne :

$$\prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f_n / M}} \right] = \prod_{n=2}^{N+1} \left[\int \frac{d(\Delta x_n)}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f_n / M}} \right], \quad (2.25)$$

sachant que

$$f_n \equiv f(x_n) = f_l(x_n) f_r(x_n).$$

avec

$$x = h(q) \Rightarrow x_n = h(q_n),$$

On développe (Δx_n) au tour du poste point, nous aurons :

$$\Delta x_n = h(\Delta q_n), \quad (2.26)$$

le développement de Taylor de $h(\Delta q_n)$ au 3^{ème} ordre nous donne :

$$\Delta x_n \approx h'(q_n) (\Delta q_n) - \frac{1}{2} h''(q_n) (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{6} h'''(q_n) (\Delta q_n)^3, \quad (2.27)$$

nous posons

$$\begin{aligned} e_1 &= h'(q_n) = f^{\frac{1}{2}}, \\ e_2 &= h''(q_n), \\ e_3 &= h'''(q_n). \end{aligned}$$

alors

$$\Delta x_n \approx e_1 (\Delta q_n) - \frac{1}{2} e_2 (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{6} e_3 (\Delta q_n)^3, \quad (2.28)$$

il existe un Jacobien dû a la transformation de coordonnées ($x \longrightarrow q$) définie par :

$$\begin{aligned} J &= \frac{\partial (\Delta x)}{\partial (\Delta q)} \approx e_1 - e_2 (\Delta q_n) + \frac{1}{2} e_3 (\Delta q_n)^2, \\ &\approx e_1 \left[1 - e_2 \bar{e} (\Delta q_n) + \frac{1}{2} e_3 \bar{e} (\Delta q_n)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

avec

$$\bar{e} = \frac{1}{e_1}.$$

Donc la correction quantique sur la mesure est définie comme suit :

$$C_{mes} = -e_2 \bar{e} (\Delta q_n) + \frac{1}{2} e_3 \bar{e} (\Delta q_n)^2. \quad (2.30)$$

2. Le calcul de la correction sur l'action C_{act} :

Le développement du terme de l'énergie cinétique au tour du poste point donne aisément:

$$\frac{M}{2\varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1})} (\Delta x_n)^2, \quad (2.31)$$

à partir de l'équation (2.28) on a :

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &\approx \left[e_1 (\Delta q_n) - \frac{1}{2} e_2 (\Delta q_n)^2 + \frac{1}{6} e_3 (\Delta q_n)^3 \right]^2 \\ &\approx e_1^2 (\Delta q_n)^2 \left[1 - \bar{e} e_2 (\Delta q_n) + \left[\frac{1}{4} (\bar{e} e_2)^2 + \frac{1}{3} \bar{e} e_3 \right] (\Delta q_n)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{36} (\bar{e} e_3)^2 (\Delta q_n)^4 - \frac{1}{6} \bar{e} e_2 e_3 (\Delta q_n)^3 \right], \end{aligned} \quad (2.32)$$

on néglige les terme qui sont supérieur à $(\Delta q_n)^2$ de l'équation (2.32) :

$$(\Delta x)^2 \approx e_1^2 (\Delta q_n)^2 \left[1 - \bar{e} e_2 (\Delta q_n) + \left[\frac{1}{4} (\bar{e} e_2)^2 + \frac{1}{3} \bar{e} e_3 \right] (\Delta q_n)^2 \right], \quad (2.33)$$

Le développement de Taylor de $f_r(x_{n-1})$ au 2^{ème} ordre, nous obtenons :

$$\begin{aligned} f_r(x_{n-1}) &\approx f_r + f'_r(\Delta q_n) + \frac{1}{2}f''_r(\Delta q_n)^2, \\ &\approx f_r \left[1 + \frac{f'_r}{f_r}(\Delta q_n) + \frac{1}{2} \frac{f''_r}{f_r}(\Delta q_n)^2 \right], \end{aligned} \quad (2.34)$$

avec

$$f'_r = \frac{df_r}{dq_n},$$

à l'aide de développement de Taylor de la forme suivante :

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + \dots,$$

on trouve

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_r(x_{n-1})} &\approx \frac{1}{f_r \left[1 + \left(\frac{f'_r}{f_r}(\Delta q_n) + \frac{1}{2} \frac{f''_r}{f_r}(\Delta q_n)^2 \right) \right]}, \\ &\approx \frac{1}{f_r} \left[1 + \frac{f'_r}{f_r}(\Delta q_n) + \left[\left(\frac{f'_r}{f_r} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{f''_r}{f_r} \right) \right] (\Delta q_n)^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Le terme de l'énergie cinétique devient :

$$\begin{aligned} \frac{M}{2\varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1})} (\Delta x_n)^2 &\approx \frac{M}{2\varepsilon_s f_l(q_n)} e_1^2 (\Delta q_n)^2 \times \\ &\quad \left\{ 1 - \bar{e}e_2(\Delta q_n) + \left[\frac{1}{4}(\bar{e}e_2)^2 + \frac{1}{3}\bar{e}e_3 \right] (\Delta q_n)^2 \right\} \\ &\quad \times \frac{1}{f_r(q_n)} \left\{ 1 + \frac{f'_r}{f_r}(\Delta q_n) \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{f'_r}{f_r} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{f''_r}{f_r} \right) \right] (\Delta q_n)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2.36)$$

donc l'équation (2.36) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{M}{2\varepsilon_s f_l(x_n) f_r(x_{n-1})} (\Delta x_n)^2 &\approx \frac{M}{2\varepsilon_s} (\Delta q_n)^2 \times \left\{ 1 - \bar{e}e_2(\Delta q_n) \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{1}{4}(\bar{e}e_2)^2 + \frac{1}{3}\bar{e}e_3 \right] (\Delta q_n)^2 \right\} \\ &\quad \times \left\{ 1 + \frac{f'_r}{f_r}(\Delta q_n) \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\frac{f'_r}{f_r} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{f''_r}{f_r} \right) \right] (\Delta q_n)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

nous considérons que :

$$f_l(x) = f^{1-\lambda}(x) \quad ; \quad f_r(x) = f^\lambda(x). \quad (2.38)$$

d'après l'équation (2.38) et après l'utilisation du développement de l'exponentielle :

$$\exp(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!},$$

on déduit que la correction quantique sur l'action s'écrit comme :

$$\begin{aligned} C_{act} &= \frac{iM}{2\hbar\varepsilon_s} (\Delta q_n)^2 \left\{ - \left(\bar{e}e_2 - \lambda \frac{f'}{f} \right) (\Delta q_n) + \right. \\ &\quad \left[\frac{1}{3}(\bar{e}e_3) + \frac{1}{4}(\bar{e}e_2)^2 + \frac{1}{2} \left(-\lambda \frac{f''}{f} + \lambda(\lambda+1) \left(\frac{f'}{f} \right)^2 \right) - \lambda \frac{f'}{f} (\bar{e}e_2) \right] (\Delta q_n)^2 \left. \right\} \\ &\quad + - \frac{M^2 (\Delta q_n)^4}{2\hbar^2 4\varepsilon_s} \left(\bar{e}e_2 - \lambda \frac{f'}{f} \right)^2 (\Delta q_n)^2 \end{aligned} \quad (2.39)$$

3. Le calcul de la correction quantique sur le préfacteur C_f :

Les termes qui correspondent le préfacteur peut se mettre sous une autre forme du poste point comme :

$$\begin{aligned} &\frac{f_r(x_b) f_l(x_a)}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s \hbar} f_l(x_b) f_r(x_a) / M} \prod_{n=1}^N \left[\int \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f(x_n) / M}} \right] \\ &= \frac{[f(x_b) f(x_a)]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s \hbar} / M} \left[\frac{f_r(x_a)}{f_r(x_b)} \right]^{-\frac{5}{4}} \left[\frac{f_l(x_a)}{f_l(x_b)} \right]^{\frac{1}{4}} \prod_{n=2}^{N+1} \left[\int \frac{d(\Delta x_n)}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f_n / M}} \right], \end{aligned} \quad (2.40)$$

d'après l'équation (2.38) et avec un simple calcul l'équation (2.40) devient :

$$\begin{aligned} &\frac{[f(x_b) f(x_a)]^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s \hbar} / M} \left[\frac{f_r(x_a)}{f_r(x_b)} \right]^{-\frac{5}{4}} \left[\frac{f_l(x_a)}{f_l(x_b)} \right]^{\frac{1}{4}} \prod_{n=2}^{N+1} \left[\int \frac{d(\Delta x_n)}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f_n / M}} \right] \\ &= \frac{f_b^{\frac{3\lambda}{2}} f_a^{\frac{1-3\lambda}{2}}}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s \hbar} / M} \prod_{n=2}^{N+1} \left[\int \frac{d(\Delta x_n)}{\sqrt{2\pi i \varepsilon_s f_n / M}} \right], \end{aligned} \quad (2.41)$$

avec

$$f_b = f(x_b) \quad ; \quad f_a = f(x_a),$$

le préfacteur doit être symétriser :

$$f_b^{\frac{3\lambda}{2}} f_a^{\frac{1-3\lambda}{2}} = [f_b f_a]^{\frac{1}{4}} \prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)} \right]^{\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda}, \quad (2.42)$$

Le développement de Taylor au tour du poste point de la fonction f_{n-1} à l'ordre deux nous donne :

$$f(x_{n-1}) \approx f(x_n) - \Delta x_n \frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n} + \frac{1}{2} (\Delta x_n)^2 \frac{\partial^2 f(x_n)}{\partial x_n^2}, \quad (2.43)$$

tel que

$$\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)} \approx 1 - \Delta x_n \frac{1}{f(x_n)} \frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n} + \frac{1}{2} (\Delta x_n)^2 \frac{1}{f_n} \frac{\partial^2 f(x_n)}{\partial x_n^2}, \quad (2.44)$$

en substituant les expressions de (Δx_n) et de $(\Delta x_n)^2$ dans (2.44), donc le rapport $\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)}$ s'écrit comme :

$$\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)} \approx 1 - \left\{ \frac{e_1}{f_n} \frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n} (\Delta q_n) + \left[\frac{1}{2} \frac{e_2}{f_n} \frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n} + \frac{1}{2} \frac{e_1^2}{f_n} \frac{\partial^2 f(x_n)}{\partial x_n^2} \right] (\Delta q_n)^2 \right\}, \quad (2.45)$$

Il reste à calculer $\frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n}$ et $\frac{\partial^2 f(x_n)}{\partial x_n^2}$ ainsi que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dq_n}{dx_n} = \bar{e}, \\ \frac{\partial f(x_n)}{\partial x_n} = \frac{1}{e_1} f', \\ \frac{\partial^2 f(x_n)}{\partial x_n^2} = -\frac{e_2}{e_1^3} f' + \frac{1}{e_1^3} f''. \end{array} \right.$$

le rapport $\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)}$ devient :

$$\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)} \approx 1 - \frac{f'}{f} (\Delta q_n) + \frac{1}{2} \frac{f''}{f} (\Delta q_n)^2, \quad (2.46)$$

En utilisant le développement de Taylor de la forme $(1+x)^n$:

$$(1+x)^n = 1 + \frac{n}{1!}x + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \dots + \frac{n(n-1)\dots(n-k+1)}{k!}x^k,$$

donc

$$\begin{aligned} \left[\frac{f(x_{n-1})}{f(x_n)} \right]^{\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda} &= 1 + \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda \right) \left(-\frac{f'}{f} (\Delta q_n) + \frac{1}{2} \frac{f''}{f} (\Delta q_n)^2 \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda \right) \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{2}\lambda \right) \left(\frac{f'}{f} \right)^2 (\Delta q_n)^2, \end{aligned} \quad (2.47)$$

La correction sur le préfacteur est donnée par :

$$\begin{aligned} C_f &= \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda \right) \left(-\frac{f'}{f} (\Delta q_n) + \frac{1}{2} \frac{f''}{f} (\Delta q_n)^2 \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda \right) \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{2}\lambda \right) \left(\frac{f'}{f} \right)^2 (\Delta q_n)^2. \end{aligned} \quad (2.48)$$

où $(1 + C)_T$ est un facteur de correction découle de la transformation du trois étapes, après quelque simplification la correction totale est :

$$\begin{aligned}
 C = & \bar{e}e_2 \left(\frac{1}{2} - \lambda \right) (\Delta q_n) \left[\frac{iM (\Delta q_n)^2}{2\hbar\varepsilon_s} - 3 \right] \\
 & + (\bar{e}e_2)^2 \left[\frac{9}{2} \left(\lambda - \frac{1}{6} \right) \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) (\Delta q_n)^2 + \frac{iM}{2\hbar\varepsilon_s} \left(4\lambda^2 - \frac{7}{2}\lambda + \frac{7}{8} \right) (\Delta q_n)^4 \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{1}{2} \right)^2 \frac{M^2}{2\hbar^2\varepsilon_s^2} (\Delta q_n)^6 \right] + \bar{e}e_3 \left[-\frac{3}{2}\lambda - \frac{1}{2} (\Delta q_n)^2 \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{1}{3} \right) \frac{iM}{2\hbar\varepsilon_s} (\Delta q_n)^4 \right] + \dots, \tag{2.49}
 \end{aligned}$$

Les valeurs moyennes se calculent en appliquant l'expression suivante [8] :

$$\langle (\Delta q_n)^{2n} \rangle = \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{M} \right)^n (2n - 1)!!, \tag{2.50}$$

avec

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

il en résulte

$$\langle \Delta q^2 \rangle = \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{M} \right) ; \quad \langle \Delta q^4 \rangle = \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{M} \right)^2 3!! = 3 \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{M} \right)^2,$$

Substituons les valeurs moyennes dans l'expression de la correction totale (2.49) , nous aurons après un simple calcul, la correction totale suivante :

$$C = -\frac{\hbar\varepsilon_s}{M} \left(\frac{1}{4} (\bar{e}e_3) - \frac{3}{8} (\bar{e}e_2)^2 \right), \tag{2.51}$$

La présence de la correction totale C donne naissance à la correction quantique ΔV tel que :

$$\Delta V = -\frac{i\hbar^2}{M} \left(\frac{1}{4} (\bar{e}e_3) - \frac{3}{8} (\bar{e}e_2)^2 \right), \tag{2.52}$$

Finalement l'expression du propagateur s'écrit sous cette forme :

$$\begin{aligned}
 K(\Delta q) &= \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon_s} (\Delta q_n)^2 + \varepsilon_s Ef(q_n) \right] \right\} (1 + C) \\
 &= \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon_s} (\Delta q_n)^2 + \varepsilon_s Ef(q_n) - \Delta V \right] \right\}. \tag{2.53}
 \end{aligned}$$

Cette formule est définie sur le nom de propagateur après une transformation spatio-temporelle. L'étape suivante sera dédié à l'application de la méthode de Duru-Kleinert, au cas du potentiel de Deng-Fan, pour déterminer le spectre d'énergie correspond au ce potentiel.

3

Etude des états " l " relative au potentiel de Deng-Fan via les intégrales de chemins de Feynman.

3.1 Introduction

L'un des problèmes intéressants de la mécanique quantique est d'étudier les spectres d'énergie et les fonctions d'onde d'un système quantique sous différents potentiels, car on peut obtenir toutes les informations nécessaires concernant le système à étudier [18].

Les solutions analytiques exactes des équations d'ondes avec certains potentiels de type exponentiel sont impossible de trouvé pour l'état " $l \neq 0$ " [19]. Des méthodes approximation doivent être utilisées pour traiter le terme centrifuge.

Ce chapitre est traité rigoureusement par l'intermédiaire de l'approche des intégrales des chemins le problème d'une particule de masse M en présence d'un potentiel de Deng-Fan $V_{D-F}(r)$, il est connu aussi sous le nom de potentiel de Morse généralisé proposé par Deng et Fan depuis cinquante ans. Ce modèle de potentiel peut être utilisé pour décrire le mouvement des nucléons dans le champ moyen produit par les interactions entre les noyaux [20].

Le but de ce chapitre est de déterminer le spectre d'énergie des états " l " et les fonctions d'onde correspondantes, avec les intégrales de chemin associée à celle du potentiel de Deng-Fan.

3.2 L'intégrale de chemin pour le potentiel de Deng-Fan

Le propagateur radial associé au potentiel de Deng-Fan est lié entre deux points spatio-temporels (r_a, t_a) et (r_b, t_b) , tel que ce propagateur est écrit en coordonnées sphériques sous la forme suivante :

$$K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) = \left(\frac{1}{r_b r_a} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}(N+1)} \times \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty dr_j \right] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_N\right), \quad (3.1)$$

avec

$$\begin{cases} t_b = t_{N+1}; t_a = t_0 \\ r_b = r_{N+1}; r_a = r_0 \end{cases}$$

et

$$S_N = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - V_{eff}(r_j) \varepsilon \right], \quad (3.2)$$

où V_{eff} est donné par :

$$V_{eff} = V_{D-F}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}. \quad (3.3)$$

Le potentiel de Deng-Fan [21] s'exprime comme :

$$V_{D-F}(r) = D_e \left[1 - \frac{b}{\exp(ar) - 1} \right]^2, \quad (3.4)$$

avec

a est le rayon de potentiel.

D_e est le paramètre de la dissociation de l'énergie.

b est un paramètre représente la position minimal de r_e , tel que :

$$b = \exp(ar_e) - 1.$$

$V_{D-F}(r)$ peut être réécrit en terme des exponentielles [22] :

$$V_{D-F}(r) = A_1 + \frac{A_2}{\exp(ar) - 1} + \frac{A_3}{(\exp(ar) - 1)^2}, \quad (3.5)$$

où

$$\begin{cases} A_1 = D_e \\ A_2 = -2D_e(\exp(ar_e) - 1) = -2D_e b \quad , \\ A_3 = D_e(\exp(ar_e) - 1)^2 = D_e b^2 \end{cases} \quad (3.6)$$

on pose que

$$a = 2\alpha, \quad (3.7)$$

on remplace (3.7) dans (3.5) on obtient :

$$V_{D-F}(r) = A_1 + \frac{A_2}{\exp(2\alpha r) - 1} + \frac{A_3}{(\exp(2\alpha r) - 1)^2}, \quad (3.8)$$

Nous effectuons le changement de variable suivant :

$$t = \frac{1}{\exp(2\alpha r) - 1}, \quad (3.9)$$

alors

$$\exp(2\alpha r) = \frac{1+t}{t}, \quad (3.10)$$

l'expression du potentiel de Deng-Fan devient :

$$V_{D-F}(r) = A_1 + A_2 t + A_3 t^2. \quad (3.11)$$

On note que

$$\coth(\alpha r) = \frac{\exp(2\alpha r) + 1}{\exp(2\alpha r) - 1}, \quad (3.12)$$

en insérant l'équation (3.10) dans (3.12) on trouve :

$$\coth(\alpha r) = 2t + 1, \quad (3.13)$$

alors

$$t = \frac{\coth(\alpha r) - 1}{2}, \quad (3.14)$$

en rapportant le relation (3.14) dans (3.11), le potentiel $V_{D-F}(r)$ devient :

$$\begin{aligned}
 V_{D-F}(r) &= A_1 + A_2 \left(\frac{\coth(\alpha r) - 1}{2} \right) + A_3 \left(\frac{\coth(\alpha r) - 1}{2} \right)^2 \\
 &= \left(A_1 - \frac{A_2}{2} + \frac{A_3}{4} \right) + \left(\frac{A_2}{2} - \frac{A_3}{2} \right) \coth(\alpha r) + \frac{A_3}{4} \coth^2(\alpha r). \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

Le calcul du spectre d'énergie de potentiel V_{eff} pour $l \neq 0$ est très compliqué car on a le terme centrifuge, donc il faut chercher à une approximation de ce terme centrifuge.

3.2.1 L'approximation du potentiel centrifuge

Dans cette section on va prendre quatre approximations du terme centrifuge pour les comparer et choisir l'approximation la plus appropriée.

On a

$$\frac{1}{r^2} \approx F_i, i = 1, 2, 3, 4. \quad (3.16)$$

Certains physiciens ont utilisé l'approximation proposée par Greene et Aldrich [23] qui donne des résultats analytiques pour les états d'ondes arbitraire, les états de diffusion de l'équation de Schrödinger et les équations d'ondes relativistes pour différentes formes de potentiel [24, 25, 26].

Le terme centrifuge est remplacé par :

$$F_1 = 4\alpha^2 \left[\frac{\exp(-2\alpha r)}{(1 - \exp(-2\alpha r))^2} \right]. \quad (3.17)$$

Cette approximation est plus pertinente quand α est plus faible, il existe autres approximations ont été proposées. Par exemple, Qiang [27] a suggéré :

$$F_2 = 4\alpha^2 \left[\frac{\exp(2\alpha) \exp(-2\alpha r)}{(1 - \exp(-2\alpha r))} + \left(\frac{\exp(-2\alpha r)}{(1 - \exp(-2\alpha r))} \right)^2 \right]. \quad (3.18)$$

Une troisième approximation prévue par Ikhdair dans [28] :

$$F_3 = 4\alpha^2 \left[C_0 + \left(\frac{\exp(-2\alpha r)}{1 - \exp(-2\alpha r)} \right) + \left(\frac{\exp(-2\alpha r)}{1 - \exp(-2\alpha r)} \right)^2 \right], \quad (3.19)$$

avec

$$C_0 = 0.082305816$$

Mustafa [22] a montré très récemment (par un test quantitatif de force brute) que :

$$F_4 = \left\{ \frac{C_0}{r_e^2} + \frac{C_1}{r_e^2} \left(\frac{\exp(-2\alpha r)}{(1 - \exp(-2\alpha r))} \right) + \frac{C_2}{r_e^2} \left(\frac{\exp(-2\alpha r)}{(1 - \exp(-2\alpha r))} \right)^2 \right\}, \quad (3.20)$$

avec

$$\begin{cases} C_0 = \left(1 - \left(\frac{1 - \exp(-2\alpha r_e)}{2\alpha r_e}\right)^2\right) \left(\frac{8\alpha r_e}{1 - \exp(-2\alpha r_e)} - 3 - 2\alpha r_e\right), \\ C_1 = 2(\exp(2\alpha r_e) - 1) \left(3 \left(\frac{1 - \exp(-2\alpha r)}{2\alpha r_e}\right) - (3 + 2\alpha r_e) \left(\frac{1 - \exp(-2\alpha r)}{2\alpha r_e}\right)^2\right), \\ C_2 = \frac{\exp(4\alpha r_e)}{4\alpha^2 r_e^2} (1 - \exp(-2\alpha r_e))^4 \left(3 + 2\alpha r_e - \frac{4\alpha r_e}{(1 - \exp(-2\alpha r))}\right). \end{cases} \quad (3.21)$$

Nous présentons dans la figure 3.1 et la figure 3.2 les graphes des quatre expressions, pour le but de comparer le degré de validité de ces approximations.

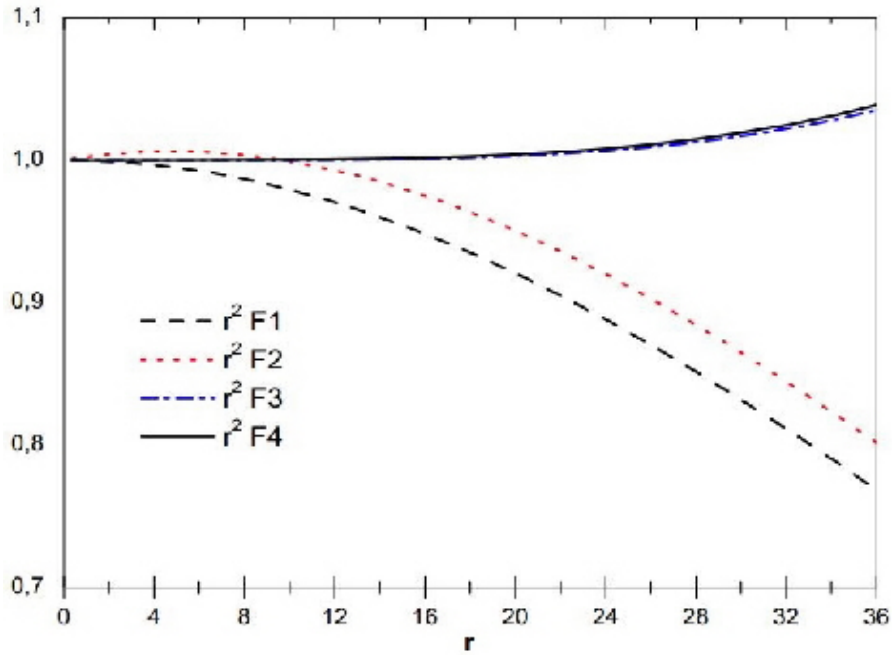


Figure 3.1 : La comparaison entre les quatres approximations avec $\alpha = 0.05$.

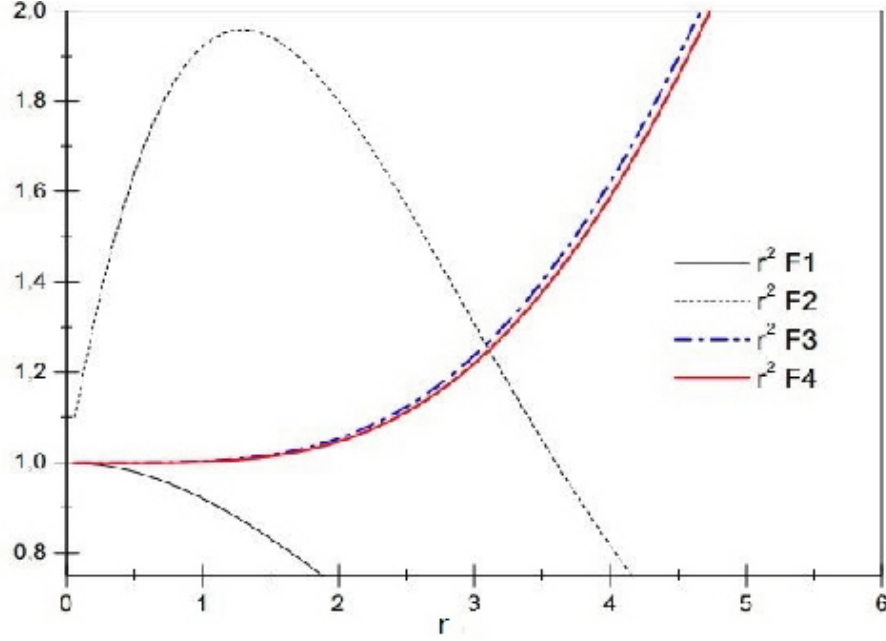


Figure 3.2 : La comparaison entre les quatres approximations
avec $\alpha = 1$

D'après ces figures, on constate que F_4 est l'approximation la plus appropriée, cette approximation devient plus pertinente quand α prend des grandes valeurs, donc on utilise F_4 .

Par ailleurs, on note que le potentiel de Deng-Fan n'est pas exactement soluble pour les états $l \neq 0$, dans le but de surmonter cette difficulté nous utilisons pour le terme centrifuge l'approximation [29]

$$\frac{r_e^2}{r^2} \approx c_0 + \frac{c_1}{\exp(2\alpha r) - 1} + \frac{c_2}{(\exp(2\alpha r) - 1)^2}, \quad (3.22)$$

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{1}{r_e^2} (c_0 + c_1 t + c_2 t^2), \quad (3.23)$$

en substituant l'équation (3.14) dans (3.23) on aura :

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} &\approx \frac{1}{r_e^2} \left\{ c_0 + c_1 \left(\frac{\coth(\alpha r) - 1}{2} \right) + c_2 \left(\frac{\coth(\alpha r) - 1}{2} \right)^2 \right\} \\ &\approx \frac{1}{r_e^2} \left\{ \left(c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4} \right) + \left(\frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{2} \right) \coth(\alpha r) + \frac{c_2}{4} \coth^2(\alpha r) \right\}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

à partir de (3.24) l'expression (3.3) devient :

$$\begin{aligned}
 V_{eff}(r) = & \left\{ \left(A_1 - \frac{A_2}{2} + \frac{A_3}{4} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4} \right) \right. \\
 & + \left[\left(\frac{A_2}{2} - \frac{A_3}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{2} \right) \right] \coth(\alpha r) \\
 & \left. + \left[\frac{A_3}{4} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \frac{c_2}{4} \right] \coth^2(\alpha r) \right\}, \tag{3.25}
 \end{aligned}$$

en utilisant la relation suivante :

$$\coth^2(\alpha r) = 1 + \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)}, \tag{3.26}$$

et on remplace (3.26) dans (3.25) en obtient :

$$\begin{aligned}
 V_{eff}(r) = & \left\{ \left(A_1 - \frac{A_2}{2} + \frac{A_3}{4} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4} \right) \right. \\
 & + \left[\left(\frac{A_2}{2} - \frac{A_3}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{2} \right) \right] \coth(\alpha r) \\
 & + \left[\frac{A_3}{4} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \frac{c_2}{4} \right] \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)} \\
 & \left. + \left[\frac{A_3}{4} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \frac{c_2}{4} \right] \right\}. \tag{3.27}
 \end{aligned}$$

D'une manière condensée :

$$V_{eff}(r) = -A \coth(\alpha r) + \frac{B}{\sinh^2(\alpha r)} + C. \tag{3.28}$$

Par identification entre (3.27) et (3.28) on trouve que :

$$\begin{cases} A = - \left\{ \left(\frac{A_2}{2} - \frac{A_3}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{2} \right) \right\}, \\ B = \left\{ \frac{A_3}{4} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \frac{c_2}{4} \right\}, \\ C = \left\{ \left(A_1 - \frac{A_2}{2} + \frac{A_3}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{2} \right) \right\}, \end{cases} \tag{3.29}$$

tel que

$$\begin{cases} A_1 = D_e \\ A_2 = -2D_e(\exp(ar_e) - 1) = -2D_e b, \\ A_3 = D_e(\exp(ar_e) - 1)^2 = D_e b^2 \end{cases} \tag{3.30}$$

on aura alors :

$$\begin{cases} A = - \left\{ \left(-Db - \frac{D}{2}b^2 \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{2} \right) \right\}, \\ B = \left\{ \frac{b^2}{4}D + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_2}{4} \right) \right\}, \\ C = \left\{ \left(D + \frac{D}{2}b^2 + Db \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{2} \right) \right\}. \end{cases} \tag{3.31}$$

L'équation (3.28) nous permet de reformulé l'expression de propagateur :

$$K(r_b, r_a; T) = \int D\vec{r} \exp \left[\int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{M}{2} \dot{r}^2 - V_{eff}(r) \right) dt \right]. \quad (3.32)$$

Nous avons transformé le problème relatif aux t du potentiel de Deng-Fan à celui des états s . On va étudier ce potentiel avec la méthode de Duru-Kleinert, l'idée est de résoudre ce problème qui basé sur une transformation spatio-temporelle, cette dernière nous permet de passer du propagateur relatif au potentiel (3.28), à celui relatif au potentiel de Pöschl-Teller modifié qui a été déjà calculé.

3.3 Transformation Spatio-temporelle

Pour que cette étude devient plus accessible, on est besoin d'utiliser une transformation de coordonnées suivie d'une transformation locale du temps. Une transformation spatio-temporelle devrait être très utile pour reformuler l'intégrale de chemin en termes de problème simple à résoudre.

Nous réalisons également le changement de coordonnées de l'espace suivant :

$$r = f(q) = \frac{1}{\alpha} \arg \coth(2 \coth^2(q) - 1), \quad (3.33)$$

la transformation locale de temps [8, 29] est donnée par :

$$t \rightarrow s \iff dt = [f'(q(s))]^2 ds, \quad (3.34)$$

ces deux transformation, nous permettent de passer d'une forme de propagateur difficile à calculer, à une forme de propagateur facile est connu.

La relation entre la fonction de Green et le propagateur K_l n'est que la transformée de Fourier [30] qui donnée par les relations suivantes :

$$K_l(r_b, r_a; T) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} G(r_b, r_a; E) \exp \left(\frac{-iET}{\hbar} \right) dE, \quad (3.35)$$

la fonction de Green prend la forme suivante :

$$G(r_b, r_a; E) = \frac{i}{\hbar} [f'(q_a) f'(q_b)]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) ds_b, \quad (3.36)$$

avec

$$\hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) = \int Dq(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s_b} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] - \Delta V(q) \right\} ds \right], \quad (3.37)$$

la correction quantique ΔV est donné par :

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8M} \left[3 \frac{f''^2}{f'^2} - 2 \frac{f'''}{f'} \right]. \quad (3.38)$$

Nous utilisons la transformation de coordonnées dans l'expression (3.35) :

$$f(q) = r = \frac{1}{\alpha} \arg \coth (2 \coth^2(q) - 1), \quad (3.39)$$

on pose

$$g(q) = 2 \coth^2(q) - 1, \quad (3.40)$$

on a

$$\arg \coth g(q) = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{g(q) + 1}{g(q) - 1} \right] \quad (3.41)$$

donc

$$f(q) = \frac{1}{2\alpha} \ln \left[\frac{g(q) + 1}{g(q) - 1} \right], \quad (3.42)$$

après la dérivation de l'équation (3.42) on obtient :

$$g'(q) = -4 \frac{\cosh(q)}{\sinh^3(q)}, \quad (3.43)$$

$$f'(q) = \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{-2g'(q)}{g^2(q) - 1} \right) \quad (3.44)$$

$$= \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\coth(q)} \right), \quad (3.45)$$

$$f''(q) = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\coth^2(q) - 1}{\coth^2(q)} \right), \quad (3.46)$$

et

$$f'''(q) = \frac{-2}{\alpha} \left(\frac{(\coth^2(q) - 1)}{\coth^3(q)} \right), \quad (3.47)$$

la correction quantique devient :

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8M} \left[\frac{1}{\cosh^2(q)} + \frac{3}{\sinh^2(q)} \right]. \quad (3.48)$$

La transformation de coordonnées (3.39) conduit à une nouvelle expression de potentiel effective :

$$V_{eff}(r) = -A \coth(\alpha r) + \frac{B}{\sinh^2(\alpha r)} + C, \quad (3.49)$$

le potentiel effective devient :

$$V_{eff}(f(q)) = -A(2 \coth^2(q) - 1) + 2B(2 \coth^2(q) - 2) \coth^2(q) + C, \quad (3.50)$$

on multiplie (3.50) par $f'^2(q)$:

tel que

$$f'^2(q) = \frac{1}{\alpha^2} \frac{1}{\coth^2(q)}, \quad (3.51)$$

on obtient

$$f'^2(q)V_{eff}(f(q)) = \frac{1}{\alpha^2} \left(\frac{-C - A}{\cosh^2(q)} \right) + \frac{1}{\alpha^2} \left(\frac{4B}{\sinh^2(q)} \right) - \frac{1}{\alpha^2} (A - C), \quad (3.52)$$

ainsi

$$f'^2(q)E = \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) E - \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) \left(\frac{E}{\cosh^2(q)} \right), \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q) &= \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A - C) + \frac{\hbar^2}{8M}}{\cosh^2(q)} \\ &+ \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} \right) 4B + \frac{3\hbar^2}{8M}}{\sinh^2(q)} \\ &- \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E + A - C), \end{aligned} \quad (3.54)$$

l'équation (3.54) devient :

$$\begin{aligned} \Rightarrow f'^2(q) [V_{eff}(f(q) - E) + \Delta V(q)] &= \frac{2M \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E - A - C) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{2M \cosh^2(q)} \\ &+ \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) 8MB + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{2M \sinh^2(q)} - \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E + A - C) \end{aligned} \quad (3.55)$$

Le propagateur radial s'exprime comme :

$$\begin{aligned} \hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) &= \int Dq(s) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \int_0^{s''} \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \left[\frac{2M \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E - A - C) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{2M \cosh^2(q)} \right] \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) 8MB + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{2M \sinh^2(q)} \right] - \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E + A - C) ds \right\}, \end{aligned} \quad (3.56)$$

où encore

$$\begin{aligned} \hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) &= \int Dq(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s_b} \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E + A - C) ds \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{s_b} \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{2M \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E - A - C) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{\hbar^2 \cosh^2(q)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) 8MB + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{\hbar^2 \sinh^2(q)} \right] ds \right\}, \end{aligned} \quad (3.57)$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) &= \int Dq(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \int_0^{s_b} \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{\eta(\eta - 1)}{\sinh^2(q)} - \frac{\nu(\nu - 1)}{\cosh^2(q)} \right] \right\} ds \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E + A - C) s_b \right], \end{aligned} \quad (3.58)$$

par identification entre (3.57) et (3.58) on trouve que :

$$\begin{aligned} \eta(\eta - 1) &= \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) 8MB + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{\hbar^2}, \\ \nu(\nu - 1) &= \frac{2M \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) (E - A - C) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{\hbar^2}, \end{aligned}$$

la résolution de ces deux équations donne :

$$\eta = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1 + \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2}\right) 8MB}{\hbar^2}}. \quad (3.59)$$

$$v = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{-2M\left(\frac{1}{\alpha^2}\right)(E - A - C)}{\hbar^2}\right)}. \quad (3.60)$$

3.4 Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes de potentiel de Deng-Fan

Pour déterminer le spectre d'énergies et les fonctions d'ondes correspondantes, considérons que la fonction de green nous donnera le spectre de l'énergie à partir de ses pôles et les fonctions d'ondes à partir des résidus aux pôles.

$$\hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}s_b(E - C + A)\left(\frac{1}{\alpha}\right)^2\right] K_l^{MPT}(q_b, q_a; s_b), \quad (3.61)$$

K_l^{MPT} est le propagateur qui correspond au potentiel de Pöshl-Teller modifiée :

$$K_l^{MPT}(q_b, q_a; s_b) = \sum_{n=0}^{N_m} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}s_b E_n\right) \chi_{l,n}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{l,n}^{*(k_1, k_2)}(q_a), \quad (3.62)$$

tel que N_m est le nombre maximal des états

$$0, 1, \dots, n \leq N_m < k_1 - k_2 - \frac{1}{2}$$

en substituant (3.62) dans (3.61), nous trouvons :

$$\hat{K}_l(q_b, q_a; s_b) = \sum_{n=0}^{N_m} \exp\left(\frac{i}{\hbar}s_b D\right) \chi_{l,n}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{l,n}^{*(k_1, k_2)}(q_a), \quad (3.63)$$

avec

$$D = (E_{n,l}^{D-F} - C + A) \left(\frac{1}{\alpha}\right)^2 - E_{n,l}^{MPT}, \quad (3.64)$$

on remplace (3.63) dans (3.36), la fonction de Green devient :

$$\begin{aligned} G(r_b, r_a; E) &= \frac{i}{\hbar} [f'(q_a) f'(q_b)]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \chi_{l,n}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{l,n}^{*(k_1, k_2)}(q_a) \int_0^{s_b} \exp\left(\frac{i}{\hbar}s_b D\right) ds_b \\ &= \frac{i}{\hbar} [f'(q_a) f'(q_b)]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \chi_{l,n}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{l,n}^{*(k_1, k_2)}(q_a) \frac{\hbar}{iD} \exp\left(\frac{i}{\hbar}s_b D\right), \end{aligned} \quad (3.65)$$

on introduit les nombres k_1, k_2 qui sont définis en fonction de C et S [31] :

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(\frac{1}{4} - 2c \right)^{\frac{1}{2}} \right], \\ k_2 &= \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(\frac{1}{4} - 2S \right)^{\frac{1}{2}} \right], \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} c &= -\frac{1}{2} [v(v-1)] \\ S &= \frac{1}{2} [\eta(\eta-1)] \end{aligned}$$

tel que

$$\hbar = M = 1,$$

d'après [32, 33], pour les conditions aux limites $q \rightarrow 0$ et $q \rightarrow \infty$. Les valeurs de k_1, k_2 deviennent :

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{1}{2} \left[(1 + (s + 2n + 1)) + \frac{2MA}{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)} \right], \\ k_2 &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{8MB(l)}{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \hbar^2}} \right) \equiv \frac{1}{2} (1 + s), \end{aligned}$$

D'après l'écriture de l'expression de la fonction d'onde du potentiel de pöschl-Teller modifié, et la remplace dans la formule de propagateur (3.56), nous pouvons donner l'expression de la fonction d'onde du système de potentiel de Deng-Fan :

$$\begin{aligned} \chi_{n,l}^{(k_1, k_2)}(q) &= N_n^{(k_1, k_2)} (\sinh(q))^{2k_2 - \frac{1}{2}} (\cosh(q))^{-2k_1 + \frac{3}{2}} \times \\ &\quad {}_2F_1(-k_1 + k_2 + k; -k_1 + k_2 - k + 1; 2k_2; \sinh^2(q)) \\ &= \left(\frac{2n!(2k_1 - 1)\Gamma_1(2k_1 - n - 1)}{\Gamma(2k_2 + n)\Gamma(2k_1 - 2k_2 - n)} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad (\sinh(q))^{2k_2 - \frac{1}{2}} (\cosh(q))^{2n - 2k_1 + \frac{3}{2}} \\ &\quad \times P_n^{(2k_2, 2(k_1 - k_2 - n) - 1)} \left(\frac{1 - \sinh^2(q)}{\cosh^2(q)} \right), \end{aligned} \tag{3.66}$$

en substituant la valeur de k_2 et le changement de coordonnée (3.18) dans la fonction d'onde Précédent (3.60), nous obtenons la fonction d'onde suivante :

$$\begin{aligned} \chi_{n,l}^{D-F}(r) &= \left(\frac{(2k_1 - 1) n! \Gamma(2k_1 - n - 1)}{(2\alpha)\Gamma(n + s + 1)\Gamma(2k_1 - s - n - 1)} \right)^{\frac{1}{2}} (1 - \exp(-2\alpha r))^{k_1} \\ &\quad \exp \left\{ -2\alpha r \left[k_1 - \frac{s}{2} - n - 1 \right] \right\} \\ &\quad \times P_n^{(2k_1 - 2n - s - 2, s)}(1 - \exp(-2\alpha r)). \end{aligned} \quad (3.67)$$

où : $P_n^{(\alpha, \beta)}$ est le polynome de Jacobi.

Le spectre d'énergie est obtenu à partir des pôles de la fonction de Green, quand l'équation (3.64) est nulle on obtient le spectre d'énergie correspond au potentiel de Deng-Fan :

$$E_{n,l}^{D-F} = \alpha^2 E_{n,l}^{MPT} - A + C, \quad (3.68)$$

avec

$$E_{n,l}^{MPT} = -\frac{\hbar^2}{2M} [2(k_1 - k_2 - n) - 1]^2, \quad (3.69)$$

$$E_{n,l}^{D-F} = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} [2(k_1 - k_2 - n) - 1]^2 - A + C, \quad (3.70)$$

l'expression de l'énergie s'écrit :

$$\begin{aligned} E_{n,l}^{D-F} &= -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{4}(s + 2n + 1)^2 + \frac{4M^2 A^2}{\alpha^4 \hbar^4 (s + 2n + 1)^2} - \frac{2MA}{\alpha^2 \hbar^2} \right] - A + C \\ &= -\left[\frac{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)^2}{8M} + \frac{2MA^2}{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)} \right] + C, \end{aligned} \quad (3.71)$$

tel que

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{a}{2}, \\ s &= \sqrt{1 + \frac{8MB}{\alpha^2}}, \\ \left\{ \begin{array}{l} A = -\left\{ (-Db - \frac{D}{2}b^2) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{2} \right) \right\}, \\ B = \left\{ \frac{b^2}{4}D + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(\frac{c_2}{4} \right) \right\}, \\ C = \left\{ \left(D + \frac{D}{2}b^2 + Db \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} \left(c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{2} \right) \right\}. \end{array} \right. \end{aligned}$$

Le spectre d'énergie peut être déduits de l'expression pour le potentiel de Deng-fan :

$$E_{n,l}^{D-F} = -\left[\frac{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)^2}{8M} + \frac{2MA^2}{\left(\frac{a}{2}\right)^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)} \right] + C. \quad (3.72)$$

3.4.1 Les résultats et discussions

Nous avons testé l'efficacité de la méthode de Duru-Kleinert en l'appliquant dans un large domaine de variation des paramètres du potentiel étudié et du moment angulaire " l " et aussi le nombre quantique radial n qui donne dans l'expression $n_T = n + l + 1$ où n_T est le nombre quantique total. Nous avons comparé nos résultats présentés dans les tableaux (3.1), (3.2) et (3.3), en utilisant la meilleure approximation du terme centrifuge F_4 , avec ceux calculés numériquement par : Lucha [34], Roy [36] et via la méthode de *AIM* (*Asymptotic Iteration Method*) par Oyewumi [35].

Nos résultats montrent que les valeurs propres obtenues sont en très bon accord avec ceux données par littérature. Nous constatons que nos résultats sont en parfaite adéquation avec ceux publiés par des autres auteurs, ceci s'explique deux points : le premier point est l'approximation du terme centrifuge que nous avons utilisé a une forte influence sur l'expression du potentiel effectif du système étudié et par conséquent, sur l'énergie de tous les spectres. Les mêmes effets seront plus prononcés sur la fonction d'onde. Le deuxième est la méthode de Duru-Kleinert, qui considère parmi les meilleures méthodes d'approximations qui traitent les potentiels de forme exponentiel pour trouver le spectre des énergies.

Table 3.1 : Les valeurs des énergies pour les états liés $E_{n,l}$ en unités atomique($\hbar = M = 1$), pour le potentiel de Deng-Fan avec $D_e = 15$ et $r_e = 0.4$

états	a	Nos résultats	oyewumi[35]	Lucha[34]	Roy [36]
$2p$	0.05	7.860804482	7.860804467	7.862800	7.860804466
	0.10	7.953304057	7.953304350	7.955370	—
	0.15	8.045097697	8.045099635	8.047240	8.045097775
	0.20	8.136197131	8.136203356	8.138420	—
	0.25	8.226613102	8.226628516	8.228920	8.226613566
	0.30	8.316355938	8.316388092	8.318740	—
$3p$	0.05	10.99776301	10.99776302	10.99980	10.997762943
	0.10	11.16255969	11.16256036	11.16470	—
	0.15	11.32424471	11.32424848	11.32647	11.324240817
	0.20	11.48282516	11.48283721	11.48513	—
	0.25	11.63830647	11.63833602	11.64068	11.638278167
	0.30	11.79069283	11.79075408	11.67565	—
$3d$	0.05	10.21598015	10.21598019	10.21651	10.215980103
	0.10	10.35353775	10.35353916	10.35409	—
	0.15	10.48934562	10.48935369	10.48992	10.489341948
	0.20	10.62343653	10.62346249	10.62403	—
	0.25	10.75584082	10.75590446	10.75645	10.755814653
	0.30	10.88658711	10.88671869	10.88719	—
$4p$	0.05	12.49760237	12.49760240	12.49920	12.497602157
	0.10	12.69679504	12.69679594	12.69851	—
	0.15	12.88834296	12.88834790	12.89010	12.888327591
	0.20	13.07222846	13.07224420	13.07400	—
	0.25	13.24843124	13.24846979	13.25010	13.248318043
$4d$	0.10	12.28500672	12.28500910	12.28570	—
$5p$	0.10	13.54214134	13.54214240	13.54340	13.542133643
$4f$	0.10	11.99795640	11.99796058	11.99810	—
$5d$	0.10	13.30679362	13.30679659	13.30750	13.306777642
$5f$	0.10	13.14759150	13.14759709	13.14780	13.147569396
$5g$	0.10	13.03796625	13.03797516	13.03790	13.037943909

Table 3.2 : Les valeurs des énergies pour les états liés $E_{n,l}$ en unités atomique($\hbar = M = 1$), pour le potentiel de Deng-Fan avec $D_e = 15$ et $r_e = 0.8$

états	a	Nos résultats	oyewumi [35]	Lucha [34]	Roy [36]
$2p$	0.05	4.14088717	4.140887237	4.14208	4.140887222
	0.10	4.21917860	4.219180023	4.22040	—
	0.15	4.29738549	4.297392964	4.29870	4.297390050
	0.20	4.37552212	4.375546092	4.37690	—
	0.25	4.45359979	4.453659003	4.45510	4.453636191
	0.30	4.53162699	4.531750853	4.53320	—
$3p$	0.05	7.532791443	7.532791535	7.53500	7.532791457
	0.10	7.724762188	7.724764169	7.72710	—
	0.15	7.915168250	7.915178421	7.91770	7.915170747
	0.20	8.104008092	8.104040211	8.10660	—
	0.25	8.29127539	8.291353518	8.29410	8.291296319
	0.30	8.47695930	8.477120373	8.47990	—
$3d$	0.05	5.739751026	5.739751150	5.74040	5.739751067
	0.10	5.84576658	5.845769968	5.84650	—
	0.15	5.95065953	5.950677430	5.95150	5.950665807
	0.20	6.05447487	6.054532348	6.05530	—
	0.25	6.15725185	6.157393368	6.15820	6.157304825
	0.30	6.25902386	6.259318933	6.26010	—
$4p$	0.05	9.613012928	9.613013061	9.61560	9.613012874
	0.10	9.883520982	9.883523594	9.88620	—
	0.15	10.14854219	10.14855549	10.1514	10.148539652
	0.20	10.40801558	10.40805734	10.4111	—
	0.25	10.66187221	10.66197323	10.6650	10.661857334
$4d$	0.10	8.707104860	8.707110672	8.70870	—
$5p$	0.10	11.30206916	11.30207233	11.3047	11.302066518
$4f$	0.10	7.586411226	7.586418181	7.58680	—
$5d$	0.10	10.52007782	10.52008576	10.5219	10.520074121
$5f$	0.10	9.796644960	9.796657408	9.79750	9.796641911
$5g$	0.10	9.152207481	9.152222313	9.15240	9.152206082

Table 3.3 : Les valeurs des énergies pour les états liés $E_{n,l}$ en unités atomique ($\hbar = M = 1$), pour le potentiel de Deng-Fan avec $D_e = 15$, $r_e = 0.4$ et $r_e = 0.8$, pour les états haut.

		$r_e = 0.4$		$r_e = 0.8$	
<i>états</i>	<i>a</i>	Nos résultats	Roy [36]	Nos résultats	Roy [36]
7s	0.10	14.51816453	14.5181645271	13.39332710	13.3933271044
7p	0.10	14.37872302	14.3786954503	12.97829418	12.9782829487
7d	0.10	14.28481509	14.2847492882	12.58793402	12.5879110006
7f	0.10	14.22397161	14.2238628933	12.24076639	12.2407344479
7g	0.10	14.18390688	14.1837577456	11.94207078	11.9420343928
8s	0.10	14.69070303	14.6907030278	13.80117227	13.8011722762
8p	0.10	14.59625086	14.5962052582	13.49101512	13.4909966267
8d	0.10	14.53360287	14.5334902559	13.20345477	13.2034142273
8f	0.10	14.49377382	14.4935808384	12.95113323	12.9510724239
8g	0.10	14.46824630	14.4679688582	12.73668158	12.7366050653

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un traitement rigoureux par l'approche des intégrales de chemin. Nous pouvons affirmer que ce formalisme est un outil efficace et puissant pour trouver le propagateur associé aux plusieurs problèmes de la physique quantique, en particulier les problèmes non relativiste. La plus part de ces problèmes ne peuvent pas traités d'une manière exacte.

Nous avons adopté à deux étapes pour étudier le potentiel de Deng-Fan :

Dans la première étape en introduisant une approximation judicieuse pour traiter le terme centrifuge, cette dernière nous a permis de passer de la résolution d'un problème relatif aux états " l " du potentiel de système à celui de l'état " s " d'un autre potentiel.

L'autre étape est d'adapté une transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert, l'utilisation de cette transformation a été repris au cours du raisonnement pour réduire le propagateur relatif non soluble au potentiel effectif de Deng-Fan à celui de Pöshl-Teller modifié, ce problème est bien connu et abordé auparavant dans le cadre de la formulation de Schrödinger et celle de l'intégrale de chemin, pour lequel le spectre d'énergie est les fonctions d'onde sont déterminés.

Pour le but de montrer l'efficacité de l'approximation qu'on a utilisé. Nous avons calculé les spectres d'énergie et les fonctions d'onde normalisé associé au potentiel de Deng-Fan V_{D-F} , pour différentes valeurs des paramètres de potentiel et des nombres quantique n et l . Les résultats obtenus sont comparés avec les valeurs des énergies calculées numériquement par Lucha et Roy, et par la méthode *AIM* (*Asymptotic Iteration Method*) de Oyewumi.

Nos résultats montrent que les valeurs propres obtenues en très bon accord avec celles données par Lucha, Roy et Oyewumi.

Il faut mentionner aussi que l'approximation concernant le terme centrifuge est une meilleure approximation de la forme de l'exponentiel, cette procédure permet de donner les valeurs propres d'énergies avec une bonne précision.

Pour conclure, notre méthode est efficace pour résoudre ce type de potentiel. On espère bien continuer à développer le formalisme de l'intégrale de chemin pas seulement pour les potentiels de type exponentiel mais aussi pour d'autres types et formes plus générale, et dans autres domaines de la physique.

Bibliographie

- [1] F. Mila, Mécanique quantique avancée II : Introduction à l'intégrale de chemin, (EPFL, 2004).
- [2] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.*, 20 (1948) 367.
- [3] R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, 80 (1950) 440.
- [4] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [5] I. H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett.*, B 84 (1979) 185.
- [6] G. Roepstorff, *path Integral Approach to Quantum Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1994).
- [7] L. Chetouani, A. Chouchaoui and T. F. Hammann, *Phys. Lett.*, A 204 (1995) 798b.
- [8] H. Kleinert, *Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics and Financial Markets* (World scientific, Singapore, 2004).
- [9] H. Hassanabadi, B. H. Yazarloo, S. Zarrinkamar and H. Rahimov, *Commun. Theor. Phys.*, 57 (2012) 339.
- [10] Z. Rong, H. G. Kjaergaard and M. L. Sage, *Molec. Phys.*, 101 (2003) 2285.
- [11] S. M. Ikhdair, *J. Math. Phys.*, 52 (2011) 052.
- [12] E. P. Storey, *Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps : étude semi-classique*, (Thèse de Doctorat, Université de Paris VI, 1996).
- [13] D. C. Khandekar, S. V. Lawande et K. V. Bhagwat. *Path Integral Methods and their Applications*, (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 1993).

-
- [14] S. Mameri, Quantification par l'intégrale de chemin d'un ensemble de potentiels déformés, (Thèse de Doctorat, Université Mentouri Constanine, 2010).
- [15] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, Tables of integrals, series and products (Academic Press, New York, 1965).
- [16] A. Chouchaoui, *Anal. Phys*, 312 (2004) 431.
- [17] L. Boudebza, Super-Integrabilité sur une hyperboloïde à deux dimensions, (Thèse de Magister, Université Mentouri Constanine, 2007).
- [18] B. H. Yazarloo, L. Lu, G. Liu, S. Zarrinkamar and H. Hassanabadi, *Adv. High. Enrg. Phys*, 5 (2013) 317.
- [19] S. M. Ikhdair and R. Sever, *Ann. Phys*, 18 (2009) 189.
- [20] S. M. Ikhdair, *J. Math. Phys*, 52 (2011) 052303.
- [21] S. H. Dong and X. Y. Gu, *J. Phys : Conf. Ser*, 96 (2008) 012.
- [22] O. Mustafa, *Phys. Scr*, 90 (2015) 065002.
- [23] R. L. Greene and C. Aldrich, *Phys. Rev*, A14 (1976) 2363.
- [24] G. F. Wei, C. Y. Long and S. H. Dong, *Phys. Lett*, A (2008) 372.
- [25] S. M. Ikhdair and R. Sever, *Ann. Phys*, 17 (2008) 897.
- [26] W. C. Qiang and S. H. Dong, *Phys. Lett*, A 368 (2007) 13.
- [27] W. C. Qiang, L. Kai and L. Wen. Chen, *J. Phys. A: Math. Theor*, 42 (2009) 205.
- [28] M. Badawi, N. Bessis and G. Bessis, *J. Phys. B: At. Mol. Phys*, 5 (1972) L157.
- [29] A. Diaf, A. Chouchaoui and R. J. Lombard, *Ann. Phys*, 317 (2005) 354.
- [30] C. Grosche, *J. Phys. A : Math. Theor*, 28 (1995) 5889.
- [31] A. Frank, K. B. Wolf, *J. Math. Phy.* 26 (1985) 973.
- [32] A. Diaf, A. Chouchaoui, *Phys. Scr*, A 84 (2011) 015004.
- [33] C. Grosche and F. Steiner, A table of Feynman path integrals, (Springer, Berlin, Heidelberg, 1998).

- [34] W. Lucha and F. F. Schöberl, *Mod. Phys*, C 10 (1999) 607.
- [35] K. J. Oyewumi, B. J. Falay, C. A. Onate, O. J. Oluwadare and W. A. Yahya, *Mol. Phys*, 112 (2014) 127.
- [36] A. K. Roy, *Q. Chem*, 114 (2014) 383.