

République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة الجبلاي بونعامة خميس مليانة
Université Djilali Bounaâma 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 :

Solution analytique du propagateur de Feynman pour le potentiel d'Hulthén q-déformé

Présenté par :
Chaouchi Asma
Ghobrini Amina

Soutenu le 23/05/2017 devant le jury :

- H. Boukabcha	Maitre de conférences « B » (UDBKM)	Président
- A. Diaf	Maitre de conférences « A » (UDBKM)	Encadreur
- F. Boudjema	Maitre de conférences « B » (UDBKM)	Examinatrice

Année universitaire : 2016/ 2017

Remerciements

D'abord nous remercions Allah soubhanou Wa ta
hala.

Nous remercions en particulier notre encadreur :

A l'université « Dr . A. Diaf »

Ainsi que tous nos professeurs qui nous ont enseigné
durant nos études à la faculté des sciences et techniques.
A la fin nous tenons à remercier tous nos collègues
d'étude, particulièrement notre promotion.

Dédicaces

Nous dédions ce modeste travail

A nos chers parents, source de
tendresse, de noblesse et d'affection.

A nos frères et sœurs

A tous nos amis et nos camarades

Sans oublier tous les professeurs.

الملخص

نهدف إلى تحديد طيف الطاقات والدوال الموجية المرافقة للحالات " ℓ " للكُمون Hulthén المشوه في مجال التكاملات المسارية ل Feynman، لهذا استعملنا تقريبين مختلفين للحد المركزي وتقنية التحويل الزمان-المكاني لحل هذه المسألة.

النتائج المتوصل إليها مطابقة للنتائج العددية وأحسن من نتائج الطرق الأخرى .

الكلمات المفتاحية

تكاملات المسار-الناشر- دالة Green - كُمون Hulthén المشوه - الحالة المرتبطة.

Résumé

Nous nous proposons de déterminer le spectre des énergies ainsi que les fonctions d'onde associées, relatifs aux états " ℓ " du potentiel Hulthén q -déformé dans le cadre du formalisme des intégrales de chemins de Feynman.

Pour traiter ce potentiel, nous avons utilisé deux approximations différentes pour le terme centrifuge et la technique des transformations spatio-temporelles pour résoudre ce problème. Nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus numériquement, et beaucoup mieux que ceux d'autres méthodes.

Mots clés

Intégrales de Chemins, Propagateur, Fonction de Green, potentiel de Hulthén q -déformé, états liés.

Abstract

We propose to find the Energy spectrum and the wave functions associated to the q -deformed Hulthén potential in the frame work of the Feynman path integral formalism. To treat this potential, we have used two different approximations schemes of the centrifugal term, and the space-time transformation in the aim to solve the problem. Our results are in a good agreement with those of the numerical calculations and better than those of other methods.

Key Words

Path Integral, propagator, Green function, the Hulthén deformed potential, the bound state.

Table des matières

Introduction	4
1 Le formalisme général des intégrales de chemin	7
1.1 Introduction	7
1.2 Expérience de Feynman	8
1.3 Amplitude de probabilité	9
1.4 L'action classique	10
1.5 Les intégrales de Feynman dans l'espace-temps	11
1.6 Intégrales de chemin dans l'espace des phases	15
1.7 Propagateur de L'oscillateur harmonique	18
2 Les transformations spatio-temporelles dans le formalisme de Feynman	21
2.1 Introduction	21
2.2 Transformation locale du temps en mécanique classique	22
2.3 Notion du «promotor»	23
2.4 Les transformations spatio-temporelles dans le formalisme de Feynman . .	24
2.4.1 Transformation du propagateur	24
2.5 Exemples d'applications	31
2.5.1 Exemple 1	31
2.5.2 Exemple 2	32
2.5.3 Exemple 3	33
3 Spectre des énergies relatives aux états "ℓ" pour le potentiel de Hulthén q-déformé	34
3.1 Introduction	34

3.2	L'intégrale de chemin pour le potentiel Hulthén q -déformé	35
3.3	Fonction de Green et propagateur de Feynman	35
3.4	Transformation des coordonnées d'espace et du temps	42
3.5	Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes	44
3.6	Résultats et discussion	45
3.7	Représentation graphique des énergies	48
Conclusion		53
	Annexe	54
Bibliographie		55

Liste des tableaux

3.1	Les énergies $-E_{n,l}$ ($2p, 3p, 3d$ et $4p$) relatives au potentiel de Hulthén en unités atomiques ($\hbar = m = e = Z = 1$) avec $D=3$	47
3.2	Les énergies $-E_{n,l}$ ($4d - 6g$) relatives au potentiel de Hulthén en unités atomiques ($\hbar = m = e = Z = 1$) avec $D=3$	48

Introduction

La mécanique quantique est la branche de la physique qui a pour objet d'étudier et de décrire les phénomènes fondamentaux à l'œuvre dans les systèmes physiques, plus particulièrement à l'échelle atomique et subatomique. Elle fut développée au début au par une dizaine de physiciens européens, afin de résoudre différents problèmes que la physique classique. Dans ce monde la matière est régit par la mécanique et l'onde est régit selon les lois de l'optique (les équations de Max well), jusqu'au jour au cette physique a montré ses limites.

En effet, les physiciens n'ont pas pu donner une explication rigoureuse à plusieurs phénomènes physiques vers la fin du 19^{ème} siècle. Nous pouvons citer parmi ces expériences, l'effet photoélectrique, le rayonnement du corps noir, l'effet Compton etc.... Ces observations obligèrent les physiciens à pousser de plus en plus leur curiosité et à pénétrer dans un monde qui leur était totalement inconnu. Les règles traditionnelles de la physique classique, telles que la séparation entre la notion d'onde et corpuscule, ne semblaient plus avoir lieu, et il a fallu de généreux efforts pour lever le voile sur toutes les ambiguïtés qui entouraient jusqu'alors, ces phénomènes nouveaux. C'est ainsi qu'est née la mécanique quantique qui est venue traduire, en langage mathématique, les résultats de Planck, De Broglie et Einstein pour ne citer que les plus connus [1]. Cette mécanique quantique est née en 1900, [2] suite des travaux d'un physicien allemand Max Planck qui découvrit d'une façon inattendu que la matière émis de la lumière selon un mode d'émission quantifié, il appela cette émission particulière théorie du quanta, par la suite les physiciens vont se rendre compte que se contenant discontinu réserve pleins de propriétés surprenante. La physique théorique permis les premières sciences à avoir utilisé les mathématiques : elle s'attache à décrire et à prédire les résultats sous forme d'expressions mathématiques. Nous allons citer trois formalismes mathématiques pour expliquer les phénomènes physiques :

Formalisme de Heisenberg (*Juillet*1925) à eu l'idée d'introduire des opérateurs qui ne commutent pas, était basée sur les propriétés des matrices, Heisenberg a utilisé cette représentation pour déterminer les valeurs propres du hamiltonien. Le deuxième formalisme est celui de Schrödinger [3] dans lequel l'état d'un système quantique est décrit par une fonction d'onde solution d'une équation différentielle du second ordre.

Si Heisenberg et Schrödinger ont proposé des théories basées sur la notion d'hamiltonien, Feynman à quant à lui proposé une formulation lagrangienne de la mécanique quantique non relativiste. Ce troisième formalisme des intégrales de chemin publiée en 1948 [4] est basé sur les résultats de la publication d'un travail de Dirac [5]. Ce dernier a pu montrer que montré que la fonction de Green, solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, peut s'exprimer dans un intervalle de temps infinitésimale comme l'exponentiel de l'action \mathbf{S} du système physique étudié. Cette solution est proportionnelle à $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ où $S = \int L(q, \dot{q}, t) dt$.

L'idée centrale du formalisme de Feynman est d'associer une amplitude de probabilité à chaque chemin, ou histoire, du système entre un état initial et un état final donnés est proportionnelle à l'exponentielle d'une action. L'amplitude totale, appelée propagateur, est la somme des amplitudes relatives à tous les chemins possibles, cette formalisme est basé sur le principe de la superposition [6]. Le formalisme de Feynman présente de nombreux avantages elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique sa formulation lagrangienne lui permet en effet, de traiter indifféremment les problèmes dépendant et indépendant du temps [6, 7].

Après avoir calculé le propagateur relatif aux potentiels de l'oscillateur harmonique et de la particule libre; l'application du formalisme de Feynman à confronté plusieurs problèmes notamment l'atome d'Hydrogène dont le problème n'a pas pu être résolu. Il a fallu attendre l'année 1979 pour que ce problème soit résolu avec l'introduction de la transformation de Duru-Kleinert [8] ont appliqués pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stifel(KS) pour le cas du potentiel de Coulomb, cette transformation est basée sur une transformation d'espace $x \mapsto q$, suivi d'une transformation de temps $t \mapsto s$.

Nous notons que les intégrales de parcours trouvent également un champ d'application en physique des solides [7], physique statistique [9], cosmologie [10] et en électrodynamique

quantique [11].

Notre travail s'inscrit dans le cadre de l'application des techniques, basées sur les intégrales de parcours, dans la résolution des problèmes de la mécanique quantique.

Ce mémoire, comporte trois chapitres.

Le premier chapitre de ce mémoire est un exposé succinct sur les concepts et les notions fondamentales du formalisme des intégrales de chemins, et nous définissons le propagateur de l'oscillateur harmonique.

Dans le deuxième chapitre, nous exposerons la méthode des transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert. Nous pouvons, en effet, via cette technique, ramener le calcul du propagateur de forme compliquée, à celui d'une forme plus maniable, Nous avons présenté trois potentiels comme exemples d'applications.

Le troisième chapitre sera consacré à la détermination du spectre des énergies relatives aux états " ℓ " pour le potentiel de Hulthén q -déformé par l'application de la technique développée dans la 2^{ème} chapitre, et en utilisant deux approximation du terme centrifuge. Nous comparons nos résultats avec ceux donnés dans les littératures. Enfin, on termine par une conclusion.

Chapitre 1

Le formalisme général des intégrales de chemin

1.1 Introduction

D'un point de vue historique, entre 1925 – 1926 plusieurs physiciens comme Bohr, Born, Dirac, Heisenberg, Pauli, et Schrödinger ont proposé des théories basées sur la notion d'hamiltonien [7] qui stipule que la probabilité de trouver une particule au point x à l'instant t est égale à $|\Psi(x, t)|^2$ où la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ solution de l'équation de Schrödinger est l'amplitude de probabilité de la particule au point (x, t) [12].

En revanche en 1933, Dirac a observé que l'action joue un rôle central dans la mécanique classique mais qu'il ne semblait avoir aucun rôle important dans la mécanique quantique. Il a ensuite avancé que cette situation pourrait être corrigée si le propagateur de la mécanique quantique correspondait à $\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]$ où S est l'action classique évaluée le long du chemin classique [5]. Par la suite Feynman a développé la proposition de Dirac en 1948 [4] et a réussi à dériver un troisième formalisme de la mécanique quantique, basée sur le fait que le propagateur peut être écrit comme une somme sur tous les chemins possibles (pas seulement les chemins classiques) reliant le point initial et le point final du mouvement d'une particule. Alors que Dirac n'a considéré que le chemin classique, Feynman a montré que tous les chemins ont la même contribution, c'est ainsi que Feynman a introduit les intégrales de chemin "Feynman path intégral".

Dans ce chapitre, nous allons présenter les notions fondamentales et une introduction

des intégrales fonctionnelles.

1.2 Expérience de Feynman

Feynman a imaginé un dispositif expérimental identique à celui de Young en remplaçant la source lumineuse par un faisceau à électrons. Les particules émises par une source d'électrons S en A ont tous la même énergie (mono-énergétique) et partent dans toutes les directions pour rencontrer l'écran B . Ce dernier a deux trous, 1 et 2, à travers lesquels les électrons peuvent passer. Enfin, au plan C , nous avons un détecteur d'électrons qui peut être placé à une distance x variable du centre de l'écran [6].

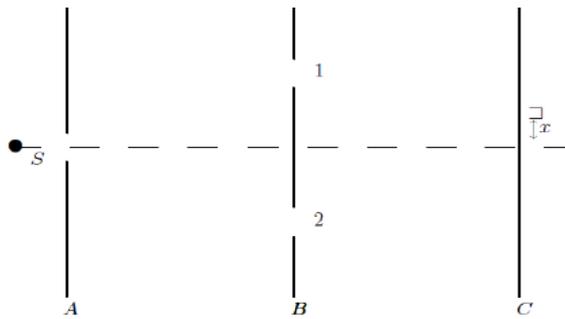


Figure 1.1 : Expérience de Feynman.

Autrement dit, on mesure la probabilité $P(x)$ qu'un électron arrive en x :

- Lorsque les deux fentes sont ouvertes.
- Lorsque l'un seulement est ouvert.

Les résultats de cette expérience sont représentés sur la figure 1.2 [13].

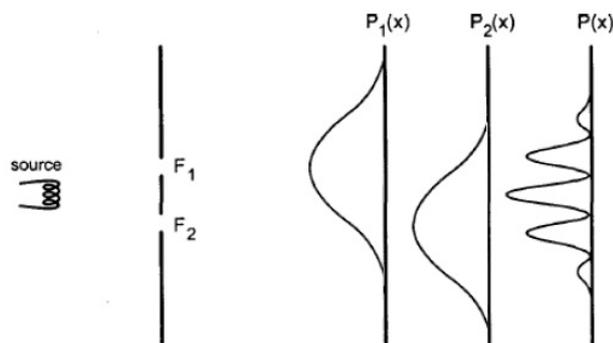


Figure 1.22 : Résultats enregistrés.

$P(x)$ donne l'intensité enregistrée sur le détecteur le long de la plaque d'enregistrement avec les deux fentes ouvertes.

$P_1(x)$ représente l'intensité enregistrée sachant que la fente 1 ouverte et la fente 2 fermée.

$P_2(x)$ représente l'intensité enregistrée sachant que la fente 1 fermée et la fente 2 ouverte.

La somme des deux n'est pas égale au résultat expérimental. En conclusion, l'expérience nous dit soit que $P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$; soit que notre deuxième hypothèse est fausse.

Les résultats observé conduit la plupart des physiciens à la conclusion "On ne peut pas dire : l'électron est passé soit par 1 soit par 2"

1.3 Amplitude de probabilité

Pour donner une explication à ces résultats, Feynman a eu l'idée d'associer une amplitude de probabilité complexe $\Phi(x)$ où $P(x)$ n'est autre que son module au carré [1] :

$$P(x) = |\Phi(x)|^2, \quad (1.1)$$

d'où :

$$P_1(x) = |\Phi_1(x)|^2, \quad (1.2)$$

$$P_2(x) = |\Phi_2(x)|^2.$$

L'amplitude de probabilité pour que l'électron tombe en un point situé à une distance x du centre de l'écran, est donnée par la somme des deux amplitudes $\Phi_1(x)$ et $\Phi_2(x)$.

Afin de savoir comment chaque trajectoire contribue à l'amplitude totale pour aller de x' à x'' , nous pouvons dire qu'en mécanique quantique, ce n'est pas seulement le chemin pour lequel l'action est maximale qui est important mais tous les chemins sont possibles. Ils contribuent de façon égale à l'amplitude totale mais avec des phases différentes.

La probabilité $P(x', x'')$ d'aller du point x' , à l'instant t' , au point x'' , à l'instant t'' est la valeur absolue au carré $P(x', x'') = |K(x', x'')|^2$, d'une amplitude $K(x', x'')$ pour

aller de x' à x'' .

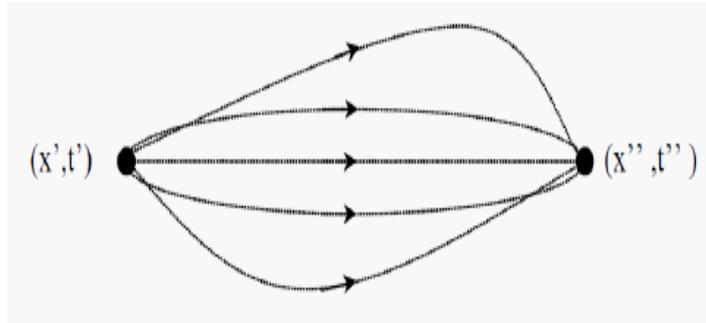


Figure 1.3 : Transition entre deux états de localisation pour $x' = 0$, $x'' = x(t)$.

1.4 L'action classique

Considérons une particule, à une dimension, en mouvement sous l'action d'un potentiel $V(x)$ allant du point $A(x', t')$ au point $B(x'', t'')$. Le chemin de la particule est représenté par une fonction du temps $x(t)$

avec

$$\begin{cases} x(t') = x' \\ x(t'') = x'' \end{cases} . \quad (1.3)$$

Le mouvement de la particule est régi par le Lagrangien :

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) . \quad (1.4)$$

Le chemin classique noté par $x_{classique}(t)$ est celui pour lequel l'action de la particule donnée par

$$S = \int_{t'}^{t''} L(x, \dot{x}, t) dt, \quad (1.5)$$

est minimale. En d'autres termes, la variation de l'action

$$\delta S = S(x + \delta x) - S(x) = 0, \quad (1.6)$$

au premier ordre en δx . Or

$$\begin{aligned}
S(x + \delta x) &= \int_{t'}^{t''} L(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}, t) dt \\
&= \int_{t'}^{t''} \left(L(x, \dot{x}, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \\
&= S(x) + \int_{t'}^{t''} \left(\delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt.
\end{aligned} \tag{1.7}$$

En intégrant par partie, la variation de l'action devient :

$$\delta S = \delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t'}^{t''} - \int_{t'}^{t''} \delta x \left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \tag{1.8}$$

Puisque $\delta x(t') = \delta x(t'') = 0$, le terme $\delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t'}^{t''}$ de l'équation (1.7) est nul. Comme δx peut prendre toute valeur arbitraire entre les points initial et final, la condition suivante est toujours satisfaite,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \tag{1.9}$$

Cette équation est appelée équation d'Euler-Lagrange du mouvement de la particule.

1.5 Les intégrales de Feynman dans l'espace-temps

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste avec les notions de propagateur et de chemin d'espace-temps, Feynman a eu l'idée de prescrire la formulation mathématique de la mécanique quantique pour le calcul des probabilités. Ainsi, il donne une méthode pour calculer la probabilité de passer entre deux points espace-temps suivant un chemin C , ensuite Feynman donne une nouvelle formulation du postulat concernant l'évolution des systèmes physiques [4] :

Postulat 01

L'amplitude totale est donnée par la contribution des amplitudes relatives à toutes les

trajectoires.

Postulat 02

La contribution de tous les chemins est identique, elle diffère uniquement par la phase, c-à-dire que :

$$K(x'', t''; x', t') = \text{const} \exp\left(i \frac{S_{cl}}{\hbar}\right), \quad (1.10)$$

où $K(x'', t''; x', t')$ est le propagateur, définissant l'amplitude de probabilité pour que la particule passe du point espace-temps (x', t') à (x'', t'') .

Feynman propose de discrétiser chaque chemin [14], en subdivisant l'intervalle $[t', t'']$ en N intervalles égaux de largeur ε ,

où $t_N = t''$ tel que $\varepsilon = t_{n+1} - t_n$, i.e $N\varepsilon = (t'' - t')$, notons par $x(t_n) = x_n$ pour $n = 0, 1, \dots, N$.

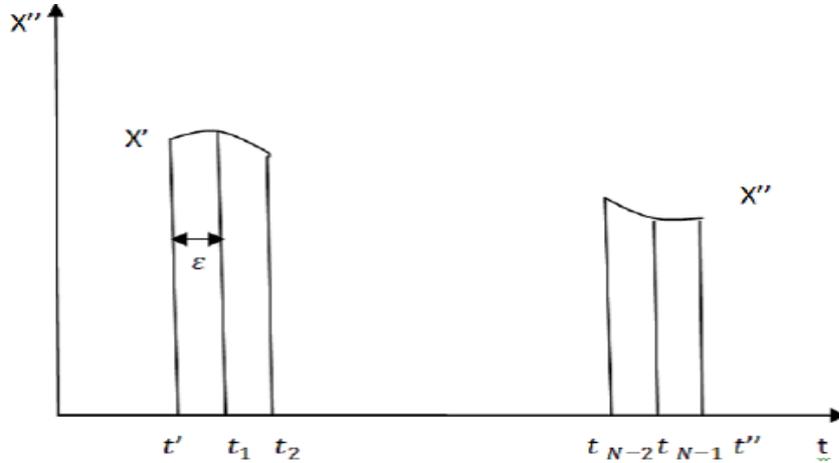


Figure 1.4 : Chemin espace – temps.

Le propagateur d'une particule se mouvant entre deux points très voisins et soumise à un potentiel $V(x)$ peut s'écrire comme [5] :

$$\begin{aligned} K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) &= K(x_{n+1}, x_n; \varepsilon) \\ &= \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m(x_{n+1} - x_n)^2}{2\varepsilon^2} - V(x_n) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Le propagateur s'écrit en fonction de l'opérateur évolution dans le temps comme :

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x'' | U(t', t'') | x' \rangle, \quad (1.12)$$

telle que :

$$U(t', t'') = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t'' - t')H\right). \quad (1.13)$$

En effet :

$$|\Psi(t'')\rangle = U(t', t'') |\Psi(t')\rangle, \quad (1.14)$$

en fait la projection et en injectant la relation de fermeture on trouve :

$$\begin{aligned} \Psi(x'', t'') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'' | U(t', t'') | x' \rangle \langle x' | \Psi(t') \rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} K(x'', t''; x', t') \Psi(x', t') dx', \end{aligned} \quad (1.15)$$

pour $t'' > t_1 > t'$: (c.à.d on divise l'intervalle) on aura :

$$\Psi(x'', t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x'', t''; x_1, t_1) \Psi(x_1, t_1) dx_1. \quad (1.16)$$

On a :

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, t_1) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_1 | U(t', t_1) | x' \rangle \langle x' | \Psi(t') \rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_1, t_1; x', t') \Psi(x', t') dx', \end{aligned} \quad (1.17)$$

c.à.d (1.16) devient :

$$\Psi(x'', t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x'', t''; x_1, t_1) \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_1, t_1; x', t') \Psi(x', t') dx' dx_1, \quad (1.18)$$

ainsi de suite pour une subdivision, $t'' > t_{N-1} > \dots > t_1 > t'$, de l'intervalle $[t', t'']$,

on aura :

$$\Psi(x'', t'') = \int \cdots \int \prod_{i=1}^N K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) \Psi(x', t') dx' dx_1 dx_2 \dots dx_{i-1}. \quad (1.19)$$

Dans le cas général :

$$\Psi(x_n, t_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \Psi(x_{n-1}, t_{n-1}) dx_{n-1}, \quad (1.20)$$

pour $n = 1, 2, \dots, N$.

Alors en comparant (1.15) et (1.19) on aura :

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} K(x'', t''; x', t') \Psi(x', t') dx' \\ &= \int \cdots \int \prod_{i=1}^N K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) \Psi(x', t') dx' dx_1 dx_2 \dots dx_{i-1}, \end{aligned} \quad (1.21)$$

par identification, on trouve :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \text{ou} \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int \cdots \int \prod_{i=1}^N K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) dx_1 dx_2 \dots dx_{i-1}, \quad (1.22)$$

avec

$$\begin{aligned} & \prod_{i=1}^N K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) dx_1 dx_2 \dots dx_{i-1} \\ &= K(x_N, t_N; x_{N-1}, t_{N-1}) \prod_{i=1}^{N-1} K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) dx_i, \end{aligned} \quad (1.23)$$

et

$$K(x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}) = K(x_i, t_i - t_{i-1}, x_{i-1}) = K(x_i, x_{i-1}, \varepsilon). \quad (1.24)$$

Le propagateur globale sera donné par :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \text{ou} \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int \cdots \int K(x_N, x_{N-1}, \varepsilon) \prod_{i=1}^{N-1} K(x_i, x_{i-1}, \varepsilon) dx_i, \quad (1.25)$$

le remplacement de chaque propagateur $K(x_i, x_{i-1}, \varepsilon)$ par son expression conduit à une forme condensée :

$$K(x'', t''; x', t') = \int \mathfrak{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right], \quad (1.26)$$

où la mesure $\mathfrak{D}x(t)$ est donnée par :

$$\mathfrak{D}x(t) = \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right]^{-\frac{1}{2}} dx_n, \quad (1.27)$$

et

$$S(x(t)) = \sum_{n=1}^N \left[\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\varepsilon} - \varepsilon V(x_n) \right]. \quad (1.28)$$

Nous notons qu'à la limite classique, $\hbar \rightarrow 0$; les arguments $\frac{i}{\hbar} S(x(t))$, deviennent importants de sorte que leurs contributions dans le propagateur s'annulent mutuellement. Le terme dominant dans ce cas, est celui relatif au chemin classique.

1.6 Intégrales de chemin dans l'espace des phases

A une dimension, l'évolution d'une particule soumise à un potentiel $V(x)$ et repérée par les positions x' et x'' aux instants fixes t' et t'' respectivement, peut être décrite en définissant le propagateur comme étant l'amplitude de probabilité de transition exprimée à l'aide de l'opérateur d'évolution [15].

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x' | \hat{U}(t'' - t') | x'' \rangle \theta(t'' - t'), \quad (1.29)$$

$\theta(t'' - t')$ étant la fonction saut :

$$\theta(t'' - t') = \begin{cases} 1 & \text{pour } t'' > t' \\ 0 & \text{pour } t' > t'' \end{cases}. \quad (1.30)$$

En divisant l'intervalle de temps $T = (t'' - t')$ en $(N + 1)$ intervalles infinitésimaux égaux ε , on peut décomposer l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t'' - t')$ en $(N + 1)$ opérateurs élémentaires $\hat{U}(t_n - t_{n-1})$

$$\hat{U}(t'' - t') = \hat{U}(t_{N+1} - t_N) \hat{U}(t_N - t_{N-1}) \dots \hat{U}(t_n - t_{n-1}) \dots \hat{U}(t_1 - t_0), \quad (1.31)$$

avec $t_{N+1} = t''$, $t_0 = t'$ et $T = \varepsilon(N + 1)$. Ensuite, en insérant N relations de fermeture de la forme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n| = 1 \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots, N, \quad (1.32)$$

entre les opérateurs d'évolution infinitésimaux, le propagateur peut se mettre sous la forme d'un produit de $(N + 1)$ propagateurs élémentaires

$$\begin{aligned} K(x'', t''; x', t') &= \langle x'', t'' | x', t' \rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \prod_{n=1}^N dx_n, \end{aligned} \quad (1.33)$$

où

$$\begin{aligned} \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle &= \langle x_n | \hat{U}(t_n - t_{n-1}) | x_{n-1} \rangle \\ &= \langle x_n | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{H}\right) | x_{n-1} \rangle, \end{aligned} \quad (1.34)$$

avec $x_0 = x'$ et $x_{N+1} = x''$. L'opérateur Hamiltonien \hat{H} de la particule est donné par

$$\hat{H} = \hat{T}(p, t) + \hat{V}(x, t), \quad (1.35)$$

où $\hat{T}(p, t)$ est l'opérateur énergie cinétique et $\hat{V}(x, t)$ l'opérateur énergie potentielle.

Pour ε très petit, on peut appliquer la formule de Baker-Hausdorff [16] :

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{H}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{T}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar^2}\varepsilon^2\hat{X}\right), \quad (1.36)$$

où l'opérateur \hat{X} représente le développement

$$\hat{X} \equiv \frac{i}{2} [\hat{V}, \hat{T}] - \frac{\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{1}{6} [\hat{V}, [\hat{V}, \hat{T}]] - \frac{1}{3} [\hat{V}, \hat{T}], \hat{T} \right) + 0(\varepsilon^2), \quad (1.37)$$

si nous négligeons tous les termes d'ordre supérieur ou égal à ε^2 puisque l'action élémentaire est par définition d'ordre ε et si nous insérons les deux relations de fermeture suivantes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n |x_n\rangle \langle x_n| = 1 \quad ; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} |p_n\rangle \langle p_n| = 1, \quad (1.38)$$

dans l'expression (1.34), nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle x_n | \exp\left(\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{H}(t_n)\right) | x_{n-1} \rangle &\approx \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}(x, t_n)\right) | x \rangle \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{T}(p, t_n)\right) | x_{n-1} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}(x, t_n)\right) | x \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar} [p_n(x - x_{n-1}) - \varepsilon T(p_n, t_n)]\right]. \end{aligned} \quad (1.39)$$

En tenant compte de l'élément de matrice local

$$\langle x_n | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}(x, t_n)\right) | x \rangle = \delta(x_n - x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(x_n, t_n)\right), \quad (1.40)$$

on a

$$\begin{aligned} &\langle x_n | \hat{U}(t_n - t_{n-1}) | x_{n-1} \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} [p_n(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon [T(p_n, t_n) + V(x_n, t_n)]] \right\}. \end{aligned} \quad (1.41)$$

En substitution de (1.41) dans (1.33) et en définissant la fonction de Green $G(x'', x'; E)$

via la transformée de Fourier du propagateur $K(x'', t''; x', t')$, nous obtenons

$$\begin{aligned} G(x'', x'; E) &= \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) K(x'', t''; x', t') \\ &= \int_0^\infty dT \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \left[\int dx_n \right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} S(x(t)) \right], \end{aligned} \quad (1.42)$$

avec l'action élémentaire

$$S(x(t)) = [p_n(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon(T(p_n, t_n) + V(x_n, t_n) - E)], \quad (1.43)$$

et $T = t'' - t'$.

1.7 Propagateur de L'oscillateur harmonique

La notion d'oscillation harmonique est très importante en mécanique quantique. En effet elle peut intervenir dans la description de nombreux phénomènes [17].

Le potentiel relatif à l'oscillateur harmonique s'écrit comme :

$$V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2. \quad (1.44)$$

Il existe plusieurs méthodes de calcul du propagateur relatif à un potentiel harmonique : les intégrations successives, la méthode matricielle et la méthode de Van-Vleck-Pauli-Morette [1].

Dans le cas où le potentiel étudié a une forme quadratique, on utilise la méthode de Van-Vleck-Pauli-Morette

$$K(x'', t''; x', t') = \sqrt{\frac{1}{2i\pi\hbar} \left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x' \partial x''} \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}. \quad (1.45)$$

Le lagrangien relatif à l'oscillateur harmonique unidimensionnel est donné par :

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m}{2}\omega^2 x^2. \quad (1.46)$$

L'équation différentielle du mouvement s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= 0 \\ \Rightarrow \ddot{x} + \omega^2 x &= 0, \end{aligned} \quad (1.47)$$

cette équation admet pour solution :

$$x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad (1.48)$$

en tenant compte des conditions aux limites :

$$\begin{cases} x(t=0) = x_0 \\ x(t=T) = x_T \end{cases}, \quad (1.49)$$

on aura :

$$\begin{aligned} x(t=0) &= x_0 = A, \\ x(t=T) &= x_T = x_0 \cos \omega T + B \sin \omega T \Rightarrow B = \frac{x_T - x_0 \cos \omega T}{\sin \omega T}, \end{aligned} \quad (1.50)$$

alors,

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \cos \omega t + \frac{x_T - x_0 \cos \omega T}{\sin \omega T} \sin \omega t \\ &= \frac{x_0 \cos \omega t \sin \omega T + x_T \sin \omega t - x_0 \cos \omega T \sin \omega t}{\sin \omega T} \\ &= \frac{x_T \sin \omega t + x_0 \sin \omega (T - t)}{\sin \omega T}. \end{aligned} \quad (1.51)$$

On calcule la dérivée de $x(t)$:

$$\dot{x}(t) = \frac{x_T \omega \cos \omega t - x_0 \omega \cos \omega (T - t)}{\sin \omega T}, \quad (1.52)$$

dans l'intervalle $[0, T]$, l'action classique est donné par :

$$\begin{aligned}
S_{cl} &= \int_0^T dt L(x, \dot{x}) = \int_0^T \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt \\
&= \frac{m}{2} \left([x\dot{x}]_0^T - \int_0^T x (\ddot{x} + \omega^2 x) dt \right) \\
&= \frac{m}{2} [x_{cl}(T) \dot{x}_{cl}(T) - x_{cl}(0) \dot{x}_{cl}(0)], \tag{1.53}
\end{aligned}$$

après remplacement par les expressions de $x_{cl}(T)$, $x_{cl}(0)$ et de leurs dérivées, l'expression de S_{cl} devient :

$$S_{cl} = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(x_T^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2x_0 x_T], \tag{1.54}$$

le propagateur s'écrit alors,

$$K_{OH}(x'', t''; x', t') = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega T)}} e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} [(x_T^2 + x_0^2) \cos(\omega T) - 2x_0 x_T] \right\}}. \tag{1.55}$$

A la limite $\omega \rightarrow 0$, nous aurons :

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\omega T}{\sin(\omega T)} = 1. \tag{1.56}$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} K_{OH}(x'', t''; x', t') = K_{PL}(x'', t''; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar T}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2T} (x_T - x_0)^2}. \tag{1.57}$$

Alors le propagateur de l'oscillateur harmonique se réduit à celui de la particule libre (PL).

Chapitre 2

Les transformations spatio-temporelles dans le formalisme de Feynman

2.1 Introduction

Après avoir calculé le propagateur relatif aux potentiels de l'oscillateur harmonique et de la particule libre ; l'application du formalisme de Feynman à confronté plusieurs problèmes notamment l'atome d'Hydrogène dont le problème n'a pas pu être résolu. Il a fallu attendre l'année 1979 pour que ce problème soit résolu avec l'introduction de la transformation de Duru-Kleinert [8].

En effet, Duru et Kleinert ont appliqués pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stifel (KS) pour le cas du potentiel de Coulomb [18], cette transformation est basée sur une transformation d'espace $x \mapsto q$, suivi d'une transformation de temps $t \mapsto s$.

Nous notons qu'il existe deux types de transformations de temps :

Transformation locale du temps : elle dépend de la position où $ds = f[q(t)] dt$, où $f[q(t)]$ est une fonction connue.

Transformation globale du temps : transforme le paramètre temps t , en un nouveau

paramètre s appelé pseudo-temps.

$$t \rightarrow g(s) \rightarrow s = g^{-1}(t). \quad (2.1)$$

Nous allons voir, dans ce chapitre, les transformations locales du temps en mécanique classique. Nous introduisons ensuite la notion du "promoteur", puis nous développons par la suite cette technique dans le cadre du formalisme de Feynman.

2.2 Transformation locale du temps en mécanique classique

La transformation locale du temps est utilisée en mécanique classique dans le cas des forces de gravitation. Le principe variationnel $\delta S = 0$, conduit en coordonnées polaires à deux équations :

$$m\ddot{r} - \frac{\ell^2}{mr^3} + \frac{dV}{dr} = 0, \quad (2.2)$$

et

$$mr^2\dot{\theta} = \ell = cte, \quad (2.3)$$

cette équation (2.3) exprime la conservation du moment cinétique ℓ , alors que l'équation (2.2) exprime la conservation de l'énergie E de système.

L'intégration de (2.2) donne :

$$\frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{\ell^2}{2mr^2} + V(r) = E = cte, \quad (2.4)$$

en intégrant (2.4), nous trouvons la trajectoire classique $r(t)$.

On s'intéresse, souvent, en mécanique au calcul de l'équation de l'orbite en fonction de $r = f(\theta)$. Ceci peut se réaliser en réécrivant l'équation (2.3) comme suit :

$$d\theta = \frac{\ell}{mr^2} dt. \quad (2.5)$$

On peut considérer cette équation comme une transformation locale du temps. Elle

devient plus intéressante encore lorsqu'elle est suivie de la transformation de coordonnée $r \mapsto u = f(r)$, avec $u = \frac{1}{r}$.

L'équation de l'orbite devient alors :

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{\ell^2} \frac{d}{du} [V(u)], \quad (2.6)$$

dans le cas :

$$\begin{aligned} V(r) &= \frac{1}{r^2} \\ \Rightarrow V(u) &= u^2. \end{aligned} \quad (2.7)$$

L'équation (2.6) devient :

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + \left(\frac{2m}{\ell^2} + 1 \right) u = 0, \quad (2.8)$$

ainsi, nous avons transformé le problème du potentiel $V(r)$ en un problème de l'oscillateur harmonique.

2.3 Notion du «promotor»

La fonction de Green $G(\vec{q}', \vec{q}'; E)$ représente la transformé de Fourier du propagateur $K(\vec{q}', \vec{q}'; T)$, il en résulte :

$$G(\vec{q}', \vec{q}'; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} \exp \frac{iET}{\hbar} K(\vec{q}', \vec{q}'; T) dT, \quad (2.9)$$

où encore :

$$G(\vec{q}', \vec{q}'; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} P(\vec{q}', \vec{q}'; T) dT, \quad (2.10)$$

avec $P(\vec{q}', \vec{q}'; T) = \exp \left(\frac{iET}{\hbar} \right) K(\vec{q}', \vec{q}'; T)$ est dit "promotor".

Sous sa forme intégrale, ce dernier s'écrit comme :

$$P(\vec{q}', \vec{q}'; T) = \int \exp \left(\frac{iW}{\hbar} \right) \mathfrak{D}\vec{q}(t), \quad (2.11)$$

où

$$W = \int L dt + E(t'' - t'), \quad (2.12)$$

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

2.4 Les transformations spatio-temporelles dans le formalisme de Feynman

Nous allons dans ce qui suit, considérer le cas unidimensionnel $D = 1$.

2.4.1 Transformation du propagateur

Nous pouvons passer d'un propagateur difficile à calculer à une forme de propagateur que l'on sait calculer à l'aide du méthode spatio-temporelle. La technique de cette méthode repose sur une transformation de coordonnée $x \mapsto q$, suivie d'une transformation temporelle $t \mapsto s$. Pour mieux illustrer cette méthode, considérons un système physique décrit par un potentiel $V(x)$ de forme compliquée.

Le propagateur qui gouverne son évolution dans le potentiel $V(x)$, est défini par l'intégrale de Feynman.

$$K(x'', t''; x', t') = \int \cdots \int \mathfrak{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L dt\right), \quad (2.13)$$

où

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x).$$

Sous une forme discrète le propagateur s'écrit :

$$K(x'', t''; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \int \cdots \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S_j\right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j, \quad (2.14)$$

avec

$$S_j = \frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x). \quad (2.15)$$

Commençons par la transformation de coordonnée $x = f(q)$, qui sera suivie par une transformation locale du temps. Nous utilisons la règle de la mid-point $\tilde{q}_j = \frac{q_j + q_{j-1}}{2}$.

Le développement de Δx_j , au 3^{ème} ordre conduit à :

$$\Delta x_j = f'(\tilde{q}_j) \Delta q_j \left[1 + \frac{1}{24} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right], \quad (2.16)$$

le terme énergie cinétique aura pour forme :

$$\frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\varepsilon} f'^2(\tilde{q}_j) (\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right]. \quad (2.17)$$

Le terme d'énergie potentiel $V(x_j)$, se transforme comme suit :

$$\varepsilon V(x_j) = \varepsilon V[f(\tilde{q}_j)] + 0(\varepsilon^2), \quad (2.18)$$

où encore :

$$\varepsilon V(x_j) = \varepsilon V(f_j).$$

L'expression du propagateur après la transformation

Terme energie cinétique :

posons :

$$\Delta x_j = x_j - x_{j-1},$$

où

$$\begin{aligned} x_j &= f(q_j), \\ x_{j-1} &= f(q_{j-1}). \end{aligned}$$

En utilisant la règle de la mid-point, nous pouvons écrire :

$$\tilde{q}_j = \frac{q_j + q_{j-1}}{2}, \quad (2.19)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} q_j &= \tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}, \\ q_{j-1} &= \tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}. \end{aligned}$$

Le développement en série de $f(q_j)$ en série de Taylor conduit à :

$$\begin{aligned} f(q_j) &= f\left(\tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}\right) \\ &= f(\tilde{q}_j) + f'(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{48} + \dots, \end{aligned} \quad (2.20)$$

de même

$$\begin{aligned} f(q_{j-1}) &= f\left(\tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}\right) \\ &= f(\tilde{q}_j) - f'(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} - f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{48} + \dots, \end{aligned} \quad (2.21)$$

d'où

$$\begin{aligned} \Delta x_j &= f(q_j) - f(q_{j-1}) \\ &= f'(\tilde{q}_j) \Delta q_j + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{24}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

où encore :

$$(\Delta x_j)^2 = f'^2(\tilde{q}_j) (\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right] + 0 [\varepsilon^2]. \quad (2.23)$$

Considérons maintenant la mesure :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \prod_{j=1}^{N-1} f'(q_j) dq_j, \quad (2.24)$$

où $dx_j = f'(q_j) dq_j$,

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \left[f'(q_N) f'(q_0) \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \sqrt{f'(q_j) f'(q_{j-1})} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (2.25)$$

Afin d'écrire le terme énergie cinétique sous sa forme standard, on utilise la transformation locale du temps $t \mapsto s$, où la nouvelle variable temps s est reliée à t par :

$$dt = \left[f'(q_s) \right]^2 ds. \quad (2.26)$$

Le nouvel intervalle de temps est :

$$\sigma_j = s_j - s_{j-1},$$

ce temps est lié à l'ancien intervalle de temps par la relation suivante :

$$\varepsilon = \sigma_j f'(q_j) f'(q_{j-1}), \quad (2.27)$$

d'où

$$\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \left[f'(q_N) f'(q_0) \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (2.28)$$

Afin d'écrire ε en terme de \tilde{q}_j , nous utilisons les relations suivantes :

$$f'(q_j) = f'(\tilde{q}_j) + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} + \dots, \quad (2.29)$$

$$f'(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j) - f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} + \dots, \quad (2.30)$$

le développement de $f'(q_j)$ et $f'(q_{j-1})$ en série des puissances de \tilde{q}_j et Δq_j conduit à :

$$f'(q_j) f'(q_{j-1}) = f'^2(\tilde{q}_j) \left[1 + \frac{(\Delta q_j)^2}{4} \left\{ \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left(\frac{f_j^{(2)}}{f_j'} \right)^2 \right\} \right]. \quad (2.31)$$

Nous pouvons également écrire ε comme :

$$\varepsilon = \sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{(\Delta q_j)^2}{4} \left[\frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left(\frac{f_j^{(2)}}{f_j'} \right)^2 \right] \right\}, \quad (2.32)$$

le terme énergie cinétique devient :

$$\begin{aligned} \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 &= \frac{m}{2} f_j'^2 (\Delta q_j)^2 \left(1 + \frac{1}{12} \frac{f_j^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f_j'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right) \\ &\times \frac{1}{\sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{(\Delta q_j)^2}{4} \left[\frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left(\frac{f_j^{(2)}}{f_j'} \right)^2 \right] \right\}}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

en retenant uniquement les termes en $(\Delta q_j)^4$, il vient :

$$\frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j} (\Delta q_j)^4 \Delta V_j, \quad (2.34)$$

où

$$\Delta V_j = \frac{f_j''^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(3)}}{f_j'}. \quad (2.35)$$

Terme energie potentiel :

$$\varepsilon V(x_j) = \sigma_j f_j'^2 V(f_j) = \sigma_j f_j'^2 V_j. \quad (2.36)$$

Nous pouvons écrire le terme exponentiel du propagateur

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j} \Delta V_j (\Delta q_j)^4 - \sigma_j f_j'^2 V_j \right\}\right]. \quad (2.37)$$

En utilisant la relation de la démocratie :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dq_j = \prod_{j=1}^{N-1} d(\Delta q_j). \quad (2.38)$$

Et le résultat,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 - bx^4) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-ax^2 - \frac{3b}{4a^2}\right), \quad (2.39)$$

dans notre cas $a = \frac{m}{2i\hbar\sigma_j}$ et $b = \frac{m\Delta V_j}{8i\hbar\sigma_j}$.

On aboutit à :

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_j\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{m}{2\sigma_j}(\Delta q_j)^2 - \sigma_j\left(f_j'^2 V_j + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{m}\Delta V_j\right)\right\}\right]. \quad (2.40)$$

Le pseudo temps "s" vérifie la condition :

$$t = t'' - t' = \int_{s'}^{s''} ds \left[f'(q_s)\right]^2, \quad (2.41)$$

cette condition peut être formulée comme suit :

$$\left[f'(q'')f'(q')\right] \int_0^\infty ds \delta\left[T - \int_{s'}^{s''} d\tau \left[f'(q_\tau)\right]^2\right] = 1. \quad (2.42)$$

Aussi le propagateur global aura pour expression :

$$\begin{aligned} K\left(f(q''), t''; f(q'), t'\right) &= \lim_{N \rightarrow \infty} f'(q')f'(q'') \int_0^\infty \delta\left(T - \int_{s'}^{s''} d\tau \left[f'(q_\tau)\right]^2\right) ds \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} f'(q')f'(q'') \int_0^\infty \delta\left(T - \int_{s'}^{s''} d\tau \left[f'(q_\tau)\right]^2\right) K_N ds \end{aligned} \quad (2.43)$$

où K_N est donné [16] par :

$$K_N = [f(q_N) \cdot f(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S_j\right) \prod_{j=1}^{N-1} dq_j, \quad (2.44)$$

nous arrivons après développement à :

$$\begin{aligned} K\left(f(q''), t''; f(q'), t'\right) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{f'(q'')f'(q')}}{2\pi\hbar} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \sigma_j}\right)^{\frac{N}{2}} \\ &\quad \times \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right) dE \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp\left(\sum_{j=1}^N \frac{i}{\hbar}\tilde{S}_j\right), \end{aligned}$$

avec

$$\tilde{S}_j = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left(f_j'^2 V_j + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{m} \Delta V_j - E f_j'^2 \right). \quad (2.46)$$

Nous pouvons extraire la fonction de Green $G(q'', q'; E)$, transformé de Fourier du propagateur

$$K(q'', q'; E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{iET}{\hbar}\right) G(q'', q'; E) dE, \quad (2.47)$$

où

$$G(q'', q'; E) = \sqrt{f'(q'') f'(q')} \int_0^\infty ds P(q'', q'; s). \quad (2.48)$$

Après identification :

$$P(q'', q'; s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{S}_j\right), \quad (2.49)$$

où

$$\sum_{j=1}^N \tilde{S}_j = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left(f_j'^2 (V_j - E) + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{m} \Delta V_j \right) \right\}. \quad (2.50)$$

A la limite continue ($N \rightarrow \infty$),

$$\tilde{S}(q(s)) = \int_0^s dE \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\sigma} \right)^2 - \tilde{V}(q) \right], \quad (2.51)$$

avec

$$\tilde{V}(q) = f'^2(q) [V(f(q)) - E] + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{m} \Delta V_j, \quad (2.52)$$

où

$$\Delta V = \frac{\hbar^2}{8m} \left[3 \frac{f_j''^2}{f_j'^2} - 2 \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} \right]. \quad (2.53)$$

La fonction de Green $G(q'', q'; E)$ n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur $K(q'', q'; E)$, cette fonction donnera le spectre de l'énergie à partir de ses pôles et les fonctions d'ondes correspondantes à partir des résidus aux pôles, du système physique étudié.

Dans le but d'illustrer la méthode présentée précédemment, nous nous proposons de

l'appliquer aux potentiels.

2.5 Exemples d'applications

2.5.1 Exemple 1

Le potentiel de Morse est donné par :

$$V(r) = V_0 (1 - \exp(-\alpha r))^2. \quad (2.54)$$

Nous cherchons à trouver le potentiel transformé $\tilde{V}(q)$, en utilisant les changements des variables :

$$r \equiv f(q) = -\frac{2}{\alpha} \ln q; \quad \frac{dt}{ds} = \left[f'(q) \right]^2, \quad (2.55)$$

et

$$\Delta V_j = \left[\frac{f''}{f'} \right]^2 - \frac{2}{3} \frac{f'''}{f'}. \quad (2.56)$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned} f' &= -\frac{2}{\alpha} \frac{1}{q}, \quad f'' = \frac{2}{\alpha} \frac{1}{q^2}, \quad f''' = -\frac{4}{\alpha} \frac{1}{q^3}; \\ ds &= \frac{\alpha^2 q^2}{4} dt \quad \text{et} \quad \Delta V_j = -\frac{1}{3q^2}. \end{aligned}$$

La substitution de ces valeurs dans l'expression du potentiel transformé donne :

$$\tilde{V}(q) = \frac{4}{\alpha^2 q^2} \left[V_0 (1 - q^2)^2 - E \right] + \frac{3 \hbar^2}{8m} \left\{ -\frac{1}{3q^2} \right\}, \quad (2.57)$$

où encore

$$\tilde{V}(q) = \left[\frac{4(V_0 - E)}{\alpha^2} \frac{1}{q^2} - \frac{8V_0}{\alpha^2} + \frac{4V_0 q^2}{\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{8mq^2} \right], \quad (2.58)$$

on pose :

$$\begin{aligned}\omega^2 &= \frac{8V_0}{m\alpha^2}, \\ v^2 &= \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2\alpha^2}.\end{aligned}$$

La relation (2.58) devient :

$$\tilde{V}(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2 + \hbar^2 \frac{(4v^2 - \frac{1}{4})}{2mq^2} - m\omega^2. \quad (2.59)$$

Nous avons ramené le problème lié au potentiel de Morse à celui de l'oscillateur harmonique qui est déjà connu.

2.5.2 Exemple 2

Soit le potentiel anharmonique suivant :

$$V(r) = Ar^6 + Br^4 + Cr^2 + Dr^{-2}, \quad (2.60)$$

avec A , B , C et D sont des constantes.

Nous cherchons à trouver le potentiel transformé $\tilde{V}(q)$, en utilisant les changements des variables :

$$r \equiv f(q) = p^{\frac{1}{2}}q^{\frac{1}{2}}, \quad (2.61)$$

où p est une constante.

Nous trouvons :

$$\begin{aligned}f' &= \frac{1}{2}p^{\frac{1}{2}}q^{-\frac{1}{2}}, \quad f'' = -\frac{1}{4}p^{\frac{1}{2}}q^{-\frac{3}{2}}, \quad f''' = \frac{3}{8}p^{\frac{1}{2}}q^{-\frac{5}{2}}; \\ ds &= \frac{4q}{p}dt \quad \text{et} \quad \Delta V_j = -\frac{1}{4q^2}.\end{aligned} \quad (2.62)$$

La substitution de ces valeurs dans l'expression du potentiel transformé donne :

$$\tilde{V}(q) = \frac{p}{4q} \left[Ap^3q^3 + Bp^2q^2 + Cpq + \frac{D}{pq} - E \right] + \frac{3\hbar^2}{8m} \left\{ -\frac{1}{4q^2} \right\}, \quad (2.63)$$

où encore

$$\tilde{V}(q) = \left(\frac{D}{4} - \frac{3\hbar^2}{32m} \right) \frac{1}{q^2} + \frac{A}{4} p^4 q^2 + \frac{B}{4} p^3 q + \frac{C}{4} p^2 - \frac{E}{4} \frac{p}{q}. \quad (2.64)$$

Ce potentiel transformé est donné en fonction du nouveau paramètre q .

2.5.3 Exemple 3

Soit le potentiel suivant :

$$V(r) = Ar^{\frac{2}{3}} + \frac{B}{r^{\frac{2}{3}}} + \frac{G}{r^2}, \quad (2.65)$$

où A , B et G sont des constantes.

Nous cherchons à trouver le potentiel transformé $\tilde{V}(q)$, en utilisant les changements des variables :

$$r \equiv f(q) = q^{\frac{3}{2}}. \quad (2.66)$$

Nous déduisons :

$$\begin{aligned} f' &= \frac{3}{2}q^{\frac{1}{2}}, \quad f'' = \frac{3}{4}q^{-\frac{1}{2}}, \quad f''' = -\frac{3}{8}q^{-\frac{3}{2}}; \\ ds &= \frac{4}{9q}dt \quad \text{et} \quad \Delta V_j = \frac{5}{12q^2}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

La substitution de ces valeurs dans l'expression du potentiel transformé donne :

$$\tilde{V}(q) = \frac{9q}{4} \left[Aq + \frac{B}{q} + \frac{G}{q^3} - E \right] + \frac{3\hbar^2}{8m} \left\{ \frac{5}{12q^2} \right\}, \quad (2.68)$$

où encore

$$\tilde{V}(q) = \left[\frac{9G}{4} + \frac{5\hbar^2}{32m} \right] \frac{1}{q^2} + \frac{9A}{4}q^2 - \frac{9E}{4}q + \frac{9B}{4}. \quad (2.69)$$

Chapitre 3

Spectre des énergies relatives aux états " ℓ " pour le potentiel de Hulthén q -déformé

3.1 Introduction

Il existe de nos jours plusieurs techniques différentes de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire, ces solutions jouent un rôle important en mécanique quantique et sont donc d'un intérêt particulier pour les physiciens aussi bien que pour les mathématiciens.

L'approche des intégrales de chemin de Feynman occupe une place centrale à cause de son interprétation physique et son lien avec la théorie classique, dans cette approche nous allons étudier le potentiel de Hulthén introduit en 1942 [19], ce dernier a été l'objet de plusieurs études aussi bien en mécanique quantique non-relativiste qu'en mécanique relativiste [19, 20], il est souvent utilisé comme une bonne approximation de certaines interactions en physique et en chimie notamment la physique nucléaire et la physique des particules [21], la physique atomique [22, 23], la physique de l'état solide [24], et la chimie physique [25].

Notre but est la recherche en mécanique quantique standard des énergies pour les états $\ell \neq 0$, relatives au potentiel de Hulthén généralisée q -déformé en utilisant deux approximations pour le terme centrifuge [26, 27, 28].

3.2 L'intégrale de chemin pour le potentiel Hulthén q -déformé

Le potentiel de Hulthén généralisée q -déformé [29, 30, 31] à la forme suivante :

$$V_H(r) = -Ze^2\delta \frac{\exp(-\delta r)}{1 - q \exp(-\delta r)}, \quad (3.1)$$

où Z , e , δ et q sont respectivement les nombres atomiques, la charge électrique, le paramètre d'écran et la déformation réel. La figure 3.1 montre la variation de ce potentiel en fonction de r et q .

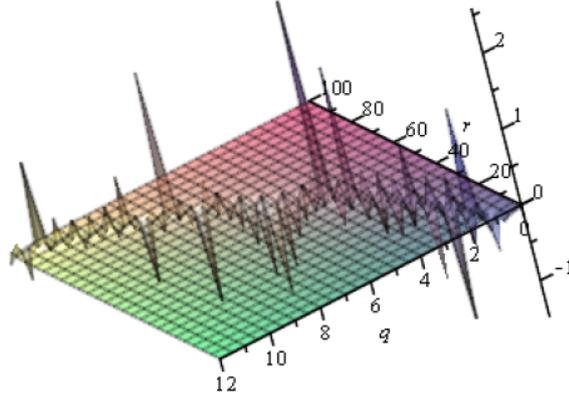


Figure 3.1 : Le potentiel de Hulthén q -déformé en fonction de r et q avec $Z = e = 1$ et $\delta = 0.025$.

3.3 Fonction de Green et propagateur de Feynman

Le propagateur relatif au potentiel de Hulthén généralisée q -déformé entre deux points espace-temps (r^t, t') et (r'', t'') s'écrit comme [7] :

$$K(r'', t''; r^t, t') = \frac{1}{4\pi r'' r^t} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \times K_{\ell}(r'', t''; r^t, t') P_{\ell}(\cos \theta), \quad (3.2)$$

où $P_{\ell}(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre et $\theta \equiv (r'', r^t)$

avec

$$K_\ell(r'', t''; r', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j \right] \times \prod_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j, \quad (3.3)$$

$$S_j = \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - \varepsilon V_{eff}, \quad (3.4)$$

et $\Delta r_j = r_j - r_{j-1}$, $\varepsilon = \Delta t_j = t_j - t_{j-1}$, $t' = t_0$ et $t'' = t_N$,

ici V_{eff} est donné par :

$$V_{eff} = \frac{\hbar^2 \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right)}{2mr^2} - Ze^2 \delta \frac{\exp(-\delta r)}{1 - q \exp(-\delta r)}. \quad (3.5)$$

En posant $\delta = 2\delta'$, l'équation (3.1) devient :

$$V_H(r) = -2Ze^2 \delta' \frac{\exp(-2\delta' r)}{1 - q \exp(-2\delta' r)}. \quad (3.6)$$

Dans le but de ramener le problème des états " ℓ " du potentiel de Hulthén à celui des états " s ", nous effectuons le changement de variable suivant :

$$q \exp(-2\delta' r) = \frac{t}{t+1} \Rightarrow \exp(-2\delta' r) = \frac{t}{q(t+1)}, \quad (3.7)$$

la substitution de (3.7) dans (3.6) donne :

$$V_H(r) = -2Ze^2 \delta' \frac{\frac{t}{q(t+1)}}{1 - \frac{t}{(t+1)}}, \quad (3.8)$$

ce qui donne :

$$V_H(r) = \frac{-2Ze^2 \delta'}{q} t. \quad (3.9)$$

Par ailleurs, nous notons que le potentiel (3.1) n'est pas exactement soluble pour les états $\ell \neq 0$, dans le but de surmonter cette difficulté, nous utilisons, pour le terme centrifuge, les deux approximations suivantes :

1^{ère} approximation du terme centrifuge [26]

$$\frac{1}{r^2} \approx \delta^2 \left[c_0 + \frac{\exp(-\delta r)}{(1 - q \exp(-\delta r))^2} \right], \quad (3.10)$$

$$c_0 = \frac{-e^{-2\gamma}q \gamma^2 + e^{-\gamma}\gamma^2 - e^{-2\gamma}q^2 + e^{-2\gamma}\gamma^2 + 2qe^{-\gamma} - 1}{\gamma^2 (-e^{-2\gamma}q^2 + 2qe^{-\gamma} - 1)},$$

pour $q = 1$:

$$c_0 = \frac{1}{12}, \text{ Ikhdair prend la valeur de } \gamma = 0.4990429999 \text{ (valeur approché) .}$$

2^{ème} approximation du terme centrifuge [27, 28]

$$\frac{1}{\delta^2 r^2} = \frac{1}{x^2} \approx c_0 + \frac{c_1 \exp(-x)}{1 - q \exp(-x)} + \frac{c_2 \exp(-2x)}{(1 - q \exp(-x))^2}, \quad (3.11)$$

où $x = \delta r$ est une variable sans dimension,

$$\left\{ \begin{array}{l} c_0 = \frac{-\ln(z_l)q^2 z_l^2 + 3q^2 z_l^2 - 2\ln(z_l)q z_l + \ln(z_l)^2 - 6q z_l + 3\ln(z_l) + 3}{\ln(z_l)^4} \\ c_1 = -\frac{2(\ln(z_l)q^3 z_l^3 - 3q^3 z_l^3 + 9q^2 z_l^2 - 3\ln(z_l)q z_l - 9q z_l + 2\ln(z_l) + 3)}{z_l \ln(z_l)^4} \\ c_2 = -\frac{\ln(z_l)q^4 z_l^4 - 3q^4 z_l^4 - 2\ln(z_l)q^3 z_l^3 + 12q^3 z_l^3 - 18q^2 z_l^2 + 2\ln(z_l)q z_l + 12q z_l - \ln(z_l) - 3}{z_l^2 \ln(z_l)^4} \end{array} \right. ,$$

pour $q = 1$

$$\left\{ \begin{array}{l} c_0 = \frac{-\ln(z_l)z_l^2 + \ln(z_l)^2 - 2\ln(z_l)z_l + 3z_l^2 + 3\ln(z_l) - 6z_l + 3}{\ln(z_l)^4} \\ c_1 = -\frac{2(\ln(z_l)z_l^3 - 3z_l^3 - 3\ln(z_l)z_l + 9z_l^2 + 2\ln(z_l) - 9z_l + 3)}{z_l \ln(z_l)^4} \\ c_2 = -\frac{\ln(z_l)z_l^4 - 2\ln(z_l)z_l^3 - 3z_l^4 + 12z_l^3 + 2\ln(z_l)z_l - 18z_l^2 - \ln(z_l) + 12z_l - 3}{z_l^2 \ln(z_l)^4} \end{array} \right. .$$

Ces deux approximations ont été utilisées dans plusieurs travaux dans le cadre du formalisme de Schrödinger.

Calcul de V_{eff} en utilisant la 1^{ère} approximation

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\delta'^2 \left[c_0 + \frac{\exp(-2\delta' r)}{(1 - q \exp(-2\delta' r))^2} \right]. \quad (3.12)$$

En utilisant la relation (3.7), nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\delta'^2 c_0 + \frac{4\delta'^2}{q} t + \frac{4\delta'^2}{q} t^2. \quad (3.13)$$

La substitution de (3.9) et (3.13) dans (3.5) donne :

$$\begin{aligned}
V_{eff} = & \left(\frac{-2Ze^2\delta'}{q} + \frac{2\delta'^2\hbar^2}{mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \right) t \\
& + \left(\frac{2\delta'^2\hbar^2}{mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \right) t^2 \\
& + \frac{2\delta'^2 c_0 \hbar^2}{m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right), \tag{3.14}
\end{aligned}$$

posons :

$$\begin{cases} R = \frac{-2Ze^2\delta'}{q} + \frac{2\delta'^2\hbar^2}{mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ F = \frac{2\delta'^2\hbar^2}{mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ G = \frac{2\delta'^2 c_0 \hbar^2}{m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \end{cases}, \tag{3.15}$$

ceci donne :

$$V_{eff} = Rt + Ft^2 + G. \tag{3.16}$$

Les fonctions hyperboliques déformées, définies pour la première fois par Arai [32] comme suit :

$$\begin{cases} \cosh_q x = \frac{1}{2} (\exp(x) + q \exp(-x)) \\ \sinh_q x = \frac{1}{2} (\exp(x) - q \exp(-x)) \\ \tanh_q x = \frac{\sinh_q x}{\cosh_q x} \end{cases}, \tag{3.17}$$

par ailleurs, nous pouvons écrire :

$$\coth_q(\delta' r) = \frac{\cosh_q(\delta' r)}{\sinh_q(\delta' r)} = \frac{1 + q \exp(-2\delta' r)}{1 - q \exp(-2\delta' r)} = \frac{1 + \frac{t}{t+1}}{1 - \frac{t}{t+1}} = 2t + 1, \tag{3.18}$$

ce qui donne :

$$t = \frac{\coth_q(\delta' r) - 1}{2}. \tag{3.19}$$

La substitution de (3.19) dans (3.16) donne :

$$V_{eff} = \left(\frac{R}{2} - \frac{F}{2} \right) \coth_q(\delta' r) + \frac{F}{4} \coth_q^2(\delta' r) + \frac{F}{4} - \frac{R}{2} + G, \quad (3.20)$$

en utilisant la relation :

$$\coth_q^2(\delta' r) = 1 + \frac{q}{\sinh_q^2(\delta' r)}, \quad (3.21)$$

nous pouvons écrire :

$$V_{eff} = \frac{R-F}{2} \coth_q(\delta' r) + \frac{F}{4} \frac{q}{\sinh_q^2(\delta' r)} + \frac{F-R}{2} + G, \quad (3.22)$$

où encore :

$$V_{eff} = -A \coth_q(\delta' r) + \frac{B}{\sinh_q^2(\delta' r)} + C, \quad (3.23)$$

par conséquent,

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \frac{(F-R)}{2} \\ B = \frac{Fq}{4} \\ C = \frac{(F-R)}{2} + G \end{array} \right. , \quad (3.24)$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \frac{Ze^2\delta'}{q} \\ B = \frac{\delta'^2\hbar^2}{2m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ C = \frac{Ze^2\delta'}{q} + \frac{2\delta'^2c_0\hbar^2}{m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \end{array} \right. . \quad (3.25)$$

Nous utilisons le changement suivant [32] :

$$\begin{aligned} \sinh_q(\delta' r) &= \sqrt{q} \sinh(\delta' y) ; & \cosh_q(\delta' r) &= \sqrt{q} \cosh(\delta' y) ; \\ \coth_q(\delta' r) &= \frac{\cosh_q(\delta' r)}{\sinh_q(\delta' r)} = \frac{\cosh(\delta' y)}{\sinh(\delta' y)} = \coth(\delta' y), \end{aligned} \quad (3.26)$$

où

$$r = y + \frac{1}{\delta'} \ln(\sqrt{q}), \quad (3.27)$$

ceci conduit à

$$V_{eff} = -A \coth(\delta' y) + \frac{B'}{\sinh^2(\delta' y)} + C, \quad (3.28)$$

où

$$\begin{cases} A = \frac{Ze^2\delta'}{q} \\ B' = \frac{\delta'^2\hbar^2}{2mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ C = \frac{Ze^2\delta'}{q} + \frac{2\delta'^2c_0\hbar^2}{m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \end{cases}. \quad (3.29)$$

Calcul de V_{eff} en utilisant la 2^{ème} approximation

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\delta'^2 \left[c_0 + \frac{c_1 \exp(-2\delta' r)}{1 - q \exp(-2\delta' r)} + \frac{c_2 \exp(-4\delta' r)}{(1 - q \exp(-2\delta' r))^2} \right]. \quad (3.30)$$

En utilisant la relation (3.7), nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\delta'^2 c_0 + 4\delta'^2 c_1 \frac{t}{q} + 4\delta'^2 c_2 \frac{t^2}{q^2}, \quad (3.31)$$

la substitution de (3.9) et (3.31) dans (3.5) donne :

$$\begin{aligned} V_{eff} &= \left(\frac{-2Ze^2\delta'}{q} + \frac{2\delta'^2c_1\hbar^2}{mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \right) t \\ &+ \left(\frac{2\delta'^2c_2\hbar^2}{mq^2} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \right) t^2 \\ &+ \frac{2\delta'^2c_0\hbar^2}{m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right), \end{aligned} \quad (3.32)$$

posons :

$$\begin{cases} T = \frac{-2Ze^2\delta'}{q} + \frac{2\delta'^2c_1\hbar^2}{mq} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ M = \frac{2\delta'^2c_2\hbar^2}{mq^2} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ N = \frac{2\delta'^2c_0\hbar^2}{m} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \end{cases}, \quad (3.33)$$

ceci donne :

$$V_{eff} = Tt + Mt^2 + N. \quad (3.34)$$

On procède de la même manière que la 1^{ère} approximation, on aboutit à :

$$\begin{cases} A = \frac{Ze^2\delta'}{q} + \frac{\delta'^2(c_2 - qc_1)\hbar^2}{mq^2} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ B' = \frac{\delta'^2 c_2 \hbar^2}{2mq^2} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \\ C = \frac{Ze^2\delta'}{q} + \frac{\delta'^2(c_2 - qc_1 + 2q^2c_0)\hbar^2}{mq^2} \left(\left(\ell + \frac{D}{2} - 1 \right)^2 - \frac{1}{4} \right) \end{cases}. \quad (3.35)$$

La figure 3.2 représente la variation de V_{eff} en fonction de r pour trois valeurs du moment angulaire ($\ell = 0, 1$ et 2) pour $\delta = 0.075$.

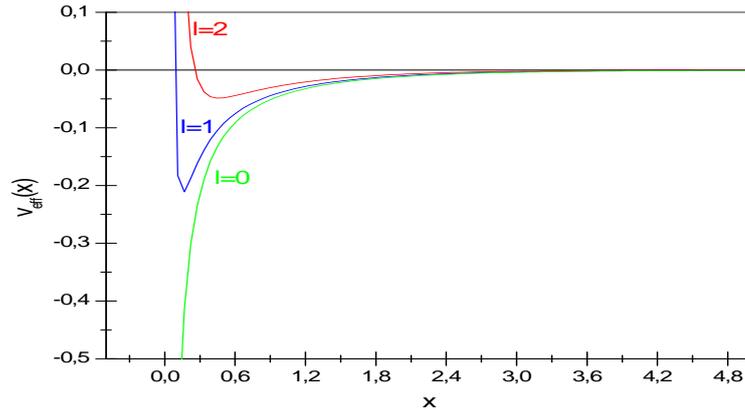


Figure 3.2 : Variation de V_{eff} en fonction de r pour trois valeurs du moment angulaire ($\ell = 0, 1$ et 2) et pour $\delta = 0.075$.

.Ainsi, nous avons transformé le problème relatif aux états " ℓ " du potentiel de Hulthén à celui des états " s " similaire à celui de Manning-Rosen. Nous proposons de résoudre ce dernier en utilisant la méthode de Duru-Kleinert qui repose 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 dont le spectre a été déjà calculé.

3.4 Transformation des coordonnées d'espace et du temps

Nous introduisons souvent une transformation de coordonnées suivie d'une transformation locale du temps afin de rendre l'étude beaucoup plus accessible. Effectuons les changements d'espace et du temps suivants :

$$r = f(q) \equiv \left(\frac{1}{\delta'}\right) \operatorname{arc} \coth(2 \coth^2(q) - 1), \quad (3.36)$$

$$dt = f'^2(q) ds, \quad (3.37)$$

avec

$$f'^2(q) = \left(\frac{1}{\delta'}\right)^2 \tanh^2(q). \quad (3.38)$$

Ces transformations nous permettent de passer d'un propagateur de départ difficile à calculer, en une forme plus maniable.

Nous avons, par ailleurs, que la fonction de Green relative à un propagateur donné, nous permet de tirer à partir de ses pôles le spectre des énergies, et les fonctions d'ondes correspondantes à partir des résidus aux pôles. Cette fonction est obtenue à partir de la transformée de Fourier du propagateur $K_\ell(r'', r'; T)$ comme suit :

$$K_\ell(r'', r'; T) = \frac{1}{2\pi i} \int G(r'', r'; E) \exp\left(\frac{-iET}{\hbar}\right) dE, \quad (3.39)$$

où

$$G(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} \left[f'(q') f'(q'') \right]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \hat{K}_\ell(q'', q'; s'') ds'', \quad (3.40)$$

le propagateur devient :

$$\hat{K}_\ell(q'', q'; s'') = \int \mathfrak{D}q(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - f'^2(q) [V(f(q)) - E] - \Delta V(q) \right) ds \right], \quad (3.41)$$

et la correction quantique ΔV est donnée par :

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8m} \left[3 \frac{[f_j''(q)]^2}{[f_j'(q)]^2} - 2 \frac{f_j'''(q)}{f_j'(q)} \right]. \quad (3.42)$$

La transformation (3.36) nous permet d'écrire l'expression pour les dérivés de $f(q)$ dans des ordres différents.

$$f'(q) = \frac{1}{\delta' \coth q} \quad ; \quad f''(q) = \frac{1}{\delta'} \frac{[\coth^2 q - 1]}{\coth^2 q} \quad ; \quad f'''(q) = \frac{-2}{\delta'} \frac{[\coth^2 q - 1]}{\coth^3 q}, \quad (3.43)$$

la correction devient :

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8m} \left[\frac{1}{\cosh^2 q} + \frac{3}{\sinh^2 q} \right]. \quad (3.44)$$

Par ailleurs, la transformation (3.36) conduit à une nouvelle expression du potentiel (3.28) :

$$V_H(f(q)) = -A (2 \coth^2 q - 1) + 2B' (2 \coth^2 q - 2) \coth^2 q + C, \quad (3.45)$$

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

$$f'^2(q) V_H(f(q)) = \frac{(-C - A)}{\delta'^2 \cosh^2 q} + \frac{4B'}{\delta'^2 \sinh^2 q} - \frac{(-C + A)}{\delta'^2}, \quad (3.46)$$

en déduit :

$$f'^2(q) [V_H(f(q)) - E] + \Delta V(q) = \frac{2m(E - C - A) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{2m\delta'^2 \cosh^2 q} + \frac{8mB' + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{2m\delta'^2 \sinh^2 q} - \frac{(E - C + A)}{\delta'^2}, \quad (3.47)$$

en tenant compte de (3.47), le propagateur (3.41) devient :

$$\begin{aligned} \hat{K}_\ell(q'', q'; s'') &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' \frac{(E - C + A)}{\delta'^2} \right] \\ &\times \int \mathfrak{D}q(s) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\eta(\eta-1)}{\sinh^2 q} - \frac{v(v-1)}{\cosh^2 q} \right] \right) ds \right], \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\hat{K}_\ell(q'', q'; s'') = \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' \frac{(E - C + A)}{\delta'^2} \right] K_\ell^{MPT}(q'', q'; s''), \quad (3.49)$$

avec

$$\begin{cases} \eta = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1 + \frac{8mB'}{\delta'^2 \hbar^2}} \\ v = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{-2m(E-C-A)}{\delta'^2 \hbar^2}} \end{cases}. \quad (3.50)$$

L'intégrale de chemin (3.49) est similaire à la mise à jour au potentiel de Pöschl-Teller modifiée, qui est un problème résolu est connu. En fait, l'adaptation de la notion de Frank et Wolf, la solution de l'intégrale de parcours lit $2s = \eta(\eta - 1)$, $-2c = v(v - 1)$, et en introduire les nombres k_1, k_2 qui sont définis en fonction de c et s .

On posant :

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(\frac{1}{4} - 2C \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\ k_2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(\frac{1}{4} + 2s \right)^{\frac{1}{2}} \right] \end{cases}. \quad (3.51)$$

Le propagateur devient :

$$K_\ell^{MPT}(q'', q'; s'') = \sum_{n=0}^{N_m} \exp(-is'' E_n) \chi_{n,\ell}^{(k_1, k_2)}(q'') \chi_{n,\ell}^{*(k_1, k_2)}(q'). \quad (3.52)$$

3.5 Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes

En substituant (3.52) dans (3.49), nous trouvons :

$$\begin{aligned} \hat{K}_\ell(q'', q'; s'') &= \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} s'' \left[\frac{(E - C - A)}{\delta'^2} - E_n^{MPT} \right] \right\} \\ &\times \chi_{n,\ell}^{H(K_1, K_2)}(q'') \chi_{n,\ell}^{H^*(K_1, K_2)}(q'), \end{aligned} \quad (3.53)$$

avec N_m le nombre maximal des états excités.

En intégrant sur le paramètre pseudo-temps s'' , nous obtenons :

$$G_\ell(r'', r'; E) = \sum_{n=0}^{N_m} \frac{\chi_{n,\ell}^{H(k_1, k_2)}(r'') \chi_{n,\ell}^{H^*(k_1, k_2)}(r')}{E_{n,\ell}^H - E}, \quad (3.54)$$

avec la valeur de k_1 et k_2 comme suit :

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{1}{2}(s + 2n + 1)\right) + \frac{2mA}{\hbar^2 \delta'^2 (s + 2n + 1)} \right] \\ k_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{8mB'}{\delta'^2 \hbar^2}}\right) \equiv \frac{1}{2}(1 + s) \end{cases}. \quad (3.55)$$

En posant $u = \frac{1}{2} \left[1 - \coth(\delta' r)\right]$, d'après la fonction de Pöschl-Teller, et l'équation du propagateur 3.53 nous obtenons la fonction d'onde de Hulthén suivant :

$$\begin{aligned} \chi_{n,\ell}^{H(K_1, K_2)}(r) &= \sqrt{\delta'} N_n^{(k_1, k_2)} (u - 1)^{\frac{1}{2} - k_1 + n} u^{k_1 - 1 - \frac{s}{2} - n} \times {}_2F_1\left(-n, 2k_1 - n - 1; s + 1; \frac{1}{1-u}\right) \\ &= \left[\frac{\delta' (2k_1 - 1) n! \Gamma(2k_1 - n - 1)}{\Gamma(n + s + 1) \Gamma(2k_1 - s - n - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} (1 - \exp(-2\delta r))^{k_1} \\ &\quad \times \exp\left\{-2\delta r \left[k_1 - \frac{s}{2} - n - 1\right]\right\} \times P_n^{(2k_1 - 2n - s - 2, s)}(1 - 2\exp(-2\delta r)), \end{aligned} \quad (3.56)$$

où $P_n^{\alpha, \beta}$ est le polynôme de Jacobi.

Le spectre d'énergie est obtenu à partir des pôles :

$$\begin{aligned} E_{n,\ell}^H &= -\frac{\delta'^2 \hbar^2}{2m} [2(k_1 - k_2 - n) - 1]^2 - A + C \\ &= -\left[\frac{\hbar^2 \delta'^2 (s + 2n + 1)^2}{8m} + \frac{2mA^2}{\hbar^2 \delta'^2 (s + 2n + 1)^2} \right] + C. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Ce spectre est donné en fonction des paramètres du potentiel.

3.6 Résultats et discussion

Nous avons calculé par la méthode des intégrales fonctionnelles de Feynman et pour différente valeur du paramètre d'écran δ , le spectre d'énergie $E_{n,\ell}$ des états liés pour le potentiel du Hulthén q -déformé et pour $q = 1$, Les calculs ont été faites via un programme Maple.

Les deux approximations donnée par équations [26, 27, 28] du terme centrifuge, nous ont conduits à calculer deux valeurs numériques pour l'énergie et différentes valeurs de n et ℓ avec l'utilisation du nombre quantique totale $n_T = n + \ell + 1$. Nos résultats sont consignés dans les tableaux ?? et ont été comparé avec les méthodes suivantes : la méthode Numérique [33], les méthodes Nikiforov-Uvarov [27, 34], et la méthode des itérations asymptotiques [35].

Nous ne constatons que nos résultats des énergies des états liés obtenue avec les deux approximations est donné par (*present1* et *present2*) sont en bon accord avec les résultats numériques et meilleurs que ceux donnés par les autres méthodes. Néanmoins quand on arrive à partir de l'état $3d$, seul les résultats *present2* reste en adéquation avec le résultat numérique ; ceci est dû au choix de l'approximation.

États	δ	<i>present1</i>	<i>present2</i>	<i>num.</i> [33]	N-U(Stanek) [27]	N-U [34]	AIM [35]
2p	0.025	0.1127604	0.1127310	0.1127605	0.1127604	0.1127611	0.1128125
	0.050	0.1010416	0.1010437	0.1010425	0.1010420	0.1010442	0.1012500
	0.075	0.0898437	0.0898455	0.0898478	0.0898453	0.0898495	0.0903125
	0.100	0.0791666	0.0791714	0.0791794	0.0791717	0.0791769	0.0800000
	0.150	0.0593750	0.0594007	0.0594415	0.0594007	0.0593981	0.0612500
	0.200	0.0416666	0.0417491	0.0418860	0.0417491	0.0417078	0.0450000
	0.250	0.0260416	0.0262466	0.0266111	0.0262466	0.0261059	0.0312500
	0.300	0.0125000	0.0129346	0.0137900	0.0129347	0.0125925	0.0200000
3p	0.350	0.0010416	0.0018698	0.0037931	0.0018698	0.0011675	0.0112500
	0.025	0.0437065	0.0436983	0.0437069	0.0437066	0.0437072	0.0437590
	0.050	0.0331597	0.0331606	0.0331645	0.0331602	0.0331623	0.0333681
	0.075	0.0239149	0.0239173	0.0239397	0.0239173	0.0239207	0.0243837
	0.100	0.0159722	0.0159797	0.0160537	0.0159798	0.0159825	0.0168056
3d	0.150	0.0039930	0.0040316	0.0044663	0.0040316	0.0040162	0.0058681
	0.025	0.0436024	0.0436030	0.0436030	0.0436028	0.0436044	0.0437587
	0.050	0.0327430	0.0327495	0.0327532	0.0327495	0.0327508	0.0333681
	0.075	0.0229774	0.0230109	0.0230307	0.0230109	0.0229948	0.0243837
	0.100	0.0143055	0.0144146	0.0144842	0.0144147	0.0143364	0.0168055
4p	0.150	0.0002430	0.0008528	0.0013966	0.0008528	0.0003124	0.0058681
	0.025	0.0199479	0.0199447	0.0199489	0.0199480	0.0199486	0.0200000
	0.050	0.0110416	0.0110423	0.0110582	0.0110422	0.0110442	0.0112500
	0.075	0.0045312	0.0045339	0.0046219	0.0045340	0.0045370	0.0050000
	0.100	0.0004166	0.0004252	0.0007550	0.0004252	0.0004269	0.0012500

TAB. 3.1 – Les énergies $-E_{n,l}$ ($2p$, $3p$, $3d$ et $4p$) relatives au potentiel de Hulthén en unités atomiques ($\hbar = m = e = Z = 1$) avec $D=3$.

États	δ	<i>present1</i>	<i>present2</i>	<i>num.</i> [33]	N-U(Stanek) [27]	N-U [34]	AIM [35]
4d	0.025	0.0198437	0.0198444	0.0198462	0.0198444	0.0198457	0.0200000
	0.050	0.0106250	0.0106354	0.0106674	0.0106355	0.0106327	0.0112500
	0.075	0.0035937	0.0036478	0.0038345	0.0036479	0.0036111	0.0050000
4f	0.025	0.0196875	0.0196902	0.0196911	0.0196903	0.0196914	0.0200000
	0.050	0.0100000	0.0100463	0.0100620	0.0100463	0.0100154	0.0112500
	0.075	0.0021875	0.0024452	0.0025563	0.0024452	0.0022222	0.0050000
5p	0.025	0.0094010	0.0093995	0.0094036	0.0094011	0.0094017	0.0094531
	0.050	0.0026041	0.0026047	0.0026490	0.0026047	0.0026067	0.0028125
5d	0.025	0.0092968	0.0092976	0.0093037	0.0092977	0.0092988	0.0094531
	0.050	0.0021875	0.0022000	0.0023131	0.0022001	0.0021952	0.0028125
5f	0.025	0.0091406	0.0091451	0.0091521	0.0091451	0.0091445	0.0094531
	0.050	0.0015625	0.0016380	0.0017835	0.0016381	0.0015779	0.0028125
5g	0.025	0.0089322	0.0089440	0.0089465	0.0089441	0.0089387	0.0094531
	0.050	0.0007291	0.0009495	0.0010159	0.0009496	0.0007549	0.0028125
6p	0.025	0.0041493	0.0041486	0.0041548	0.0041493	0.0041500	0.0042014
6d	0.025	0.0040451	0.0040460	0.0040606	0.0040460	0.0040471	0.0042014
6f	0.025	0.0038888	0.0038944	0.0039168	0.0038945	0.0038927	0.0042014
6g	0.025	0.0036805	0.0036995	0.0037201	0.0036996	0.0036870	0.0042014

TAB. 3.2 – Les énergies $-E_{n,l}$ ($4d - 6g$) relatives au potentiel de Hulthén en unités atomiques ($\hbar = m = e = Z = 1$) avec $D=3$.

3.7 Représentation graphique des énergies

Nous présentons dans ce qui suit les graphes tracés à partir des résultats du deux tableaux représentant la variation de l'énergie $E_{n,\ell}$ en fonction du paramètre δ .

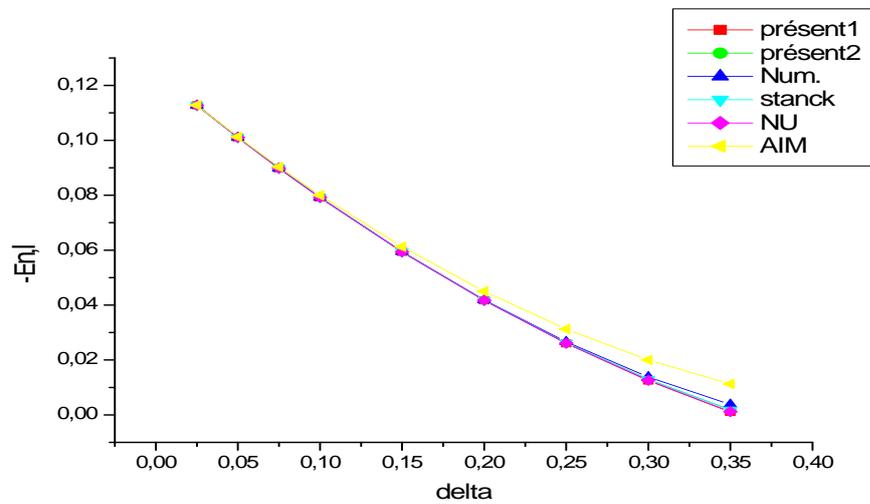


Figure 3.3 : Les énergies de l'état 2p en fonction de delta.

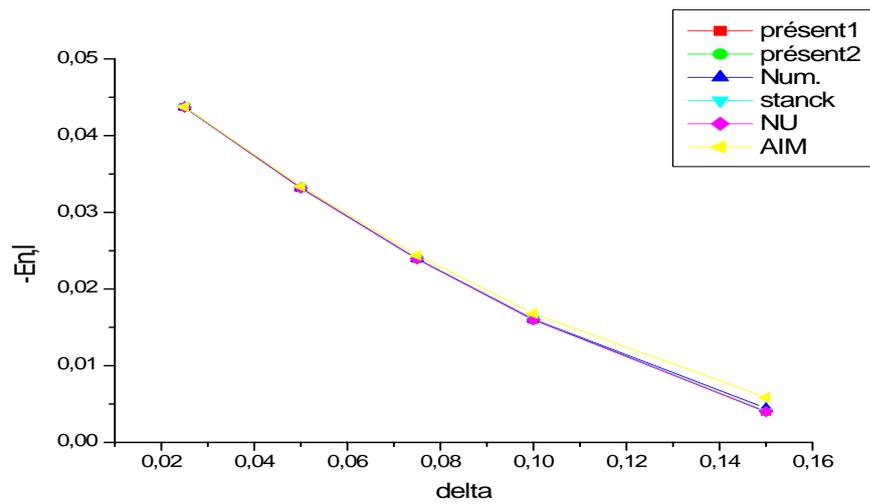


Figure 3.4 : Les énergies de l'état 3p en fonction de delta.

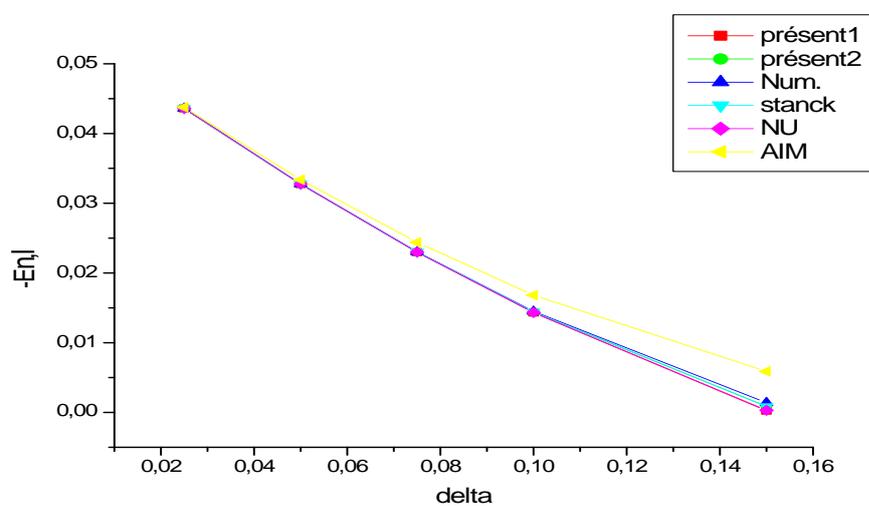


Figure 3.5 : Les énergies de l'état 3d en fonction de delta.

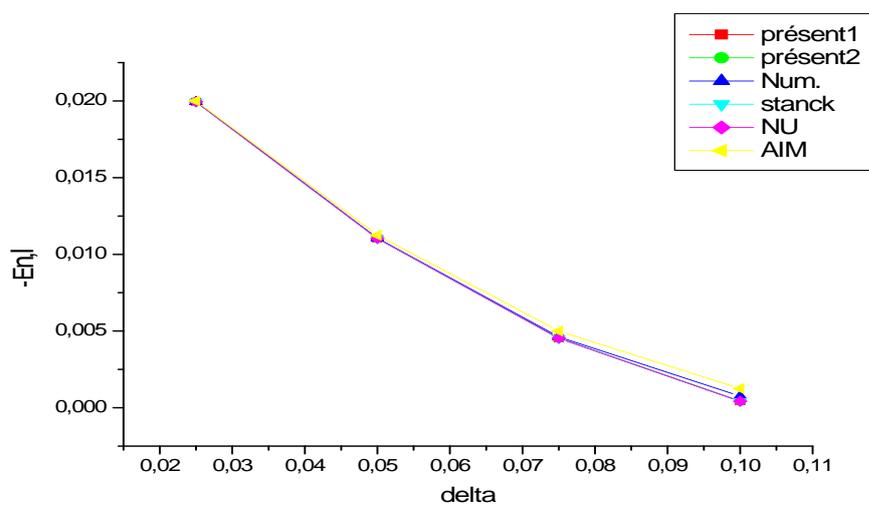


Figure 3.6 : Les énergies de l'état 4p en fonction de delta.

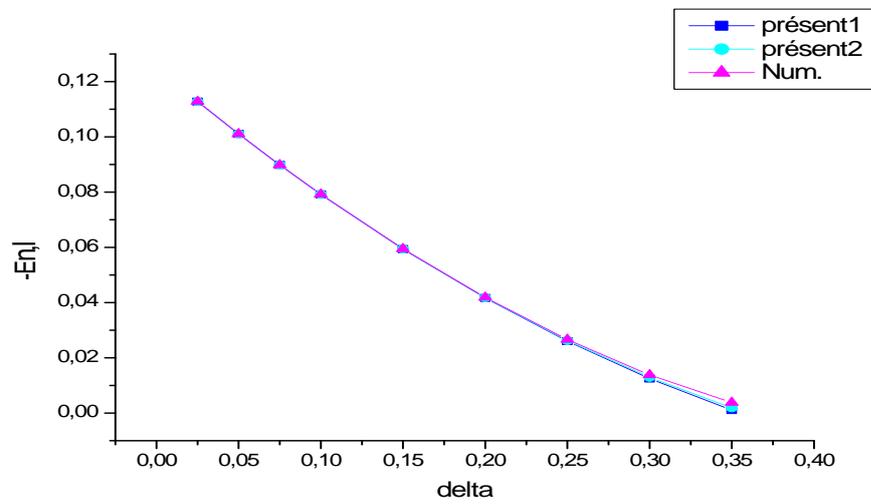


Figure 3.7 : Les énergie de l'état 2p en fonction de delta.

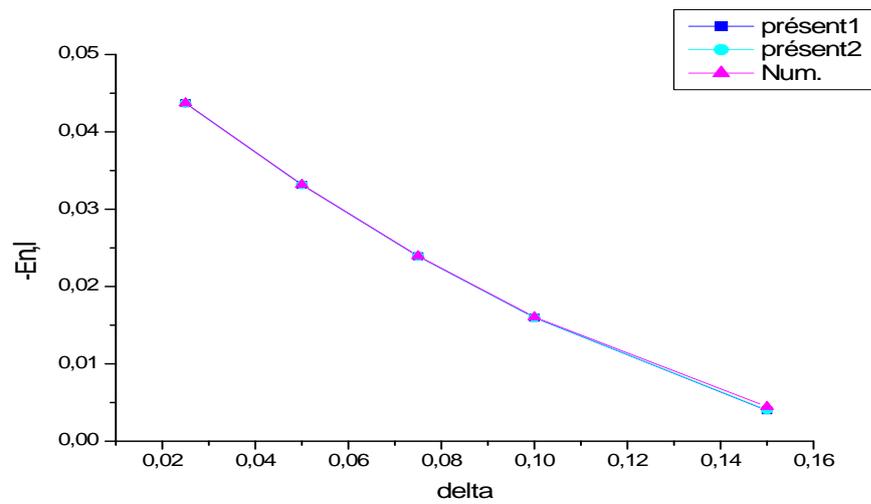


Figure 3.8 : Les énergies de l'état 3p en fonction de delta.

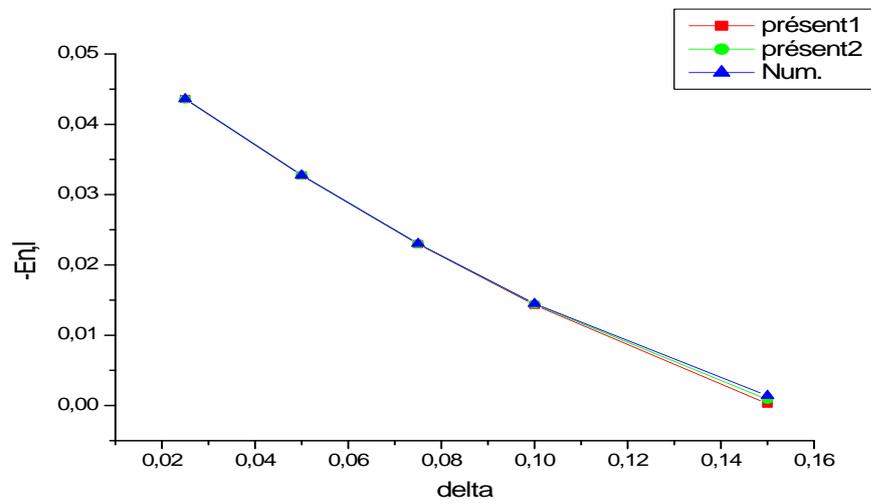


Figure 3.9 : Les énergies de l'état 3d en fonction de delta.

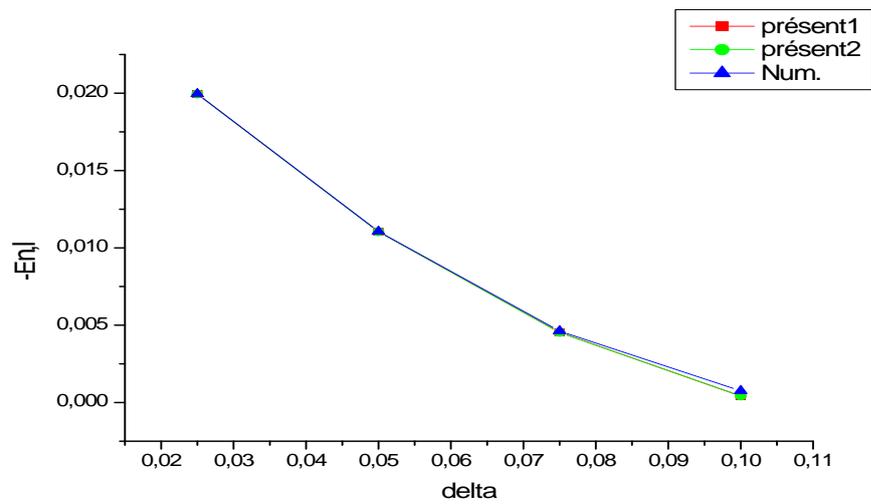


Figure 3.10 : Les énergies de l'état 4p en fonction de delta.

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons déterminé le spectre des énergies des états " ℓ " ainsi que les fonctions d'onde correspondantes pour le potentiel de Hulthén q -déformé dans un espace de D dimension par la méthode des intégrales de chemin de Feynman.

Pour traiter ce potentiel, nous avons utilisé deux approximations pour le terme centrifuge ; celle-ci nous a permis de passer de la résolution d'un problème relatif aux états " ℓ " du potentiel de Hulthén q -déformé à celui de l'état " s " ($\ell = 0$) similaire à Manning-Rosen. Nous avons utilisé la technique des transformations spatio-temporelles pour résoudre ce problème, cette dernière nous a permis de passer du propagateur relatif au potentiel similaire à Manning-Rosen à celui de Pöshel-Teller modifié dont le spectre a été déjà calculé.

Nous allons déterminer, par la suite, l'expression analytique du spectre d'énergie $E_{n,\ell}$ des états liées dans un espace de D dimension et le paramètre de déformation q positive pour les deux approximations. Dans le but de montrer l'efficacité de ces approximations, nous avons considéré un cas particulier ($D = 3$ et $q = 1$). Nos résultats ont été comparé aux énergies calculées numériquement et avec les deux méthodes Nikiforov-Uvarov [27, 34], la méthode des itérations asymptotiques. On constate qu'ils sont en bon accord avec ceux obtenus numériquement, et beaucoup mieux que ceux des autres méthodes. Les présentes approximations du terme centrifuge pourraient être une méthode utile et approprié pour d'autres potentiels de forme exponentielle. En fait, elles ont le grand avantage de conduire à une expression analytique valable, qui dépend des paramètres potentiels.

Le formalisme de Feynman constitue un bon outil de résolution des problèmes de la mécanique quantique.

Annexe

La 2^{ème} approximation du terme centrifuge est donnée par :

$$\frac{1}{\delta^2 r^2} = \frac{1}{x^2} \approx c_0 + \frac{c_1 \exp(-x)}{1 - q \exp(-x)} + \frac{c_2 \exp(-2x)}{(1 - q \exp(-x))^2}, \quad (3.58)$$

où $x = \delta r$ est une variable sans dimension.

Notre but est déterminé les valeurs de c_0 , c_1 et c_2 . En utilisant un développement limité au voisinage $\Delta z = 0$. En effet,

$$\frac{1}{x^2} = \frac{1}{\ln(z)^2} = \frac{1}{\ln(z_l + \Delta z)^2}, \quad (3.59)$$

où $z = \exp(-\delta r)$, $\Delta z = z - z_l$, avec z_l représente le minimum du potentiel V_{eff} .

Le développement de l'équation (3.59) en terme de série de Taylor autour de $\Delta z = 0$ à l'ordre 2 donne :

$$\frac{1}{x^2} = \frac{1}{\ln(z_l)^2} - \frac{2}{z_l \ln(z_l)^3} \Delta z + \left[\frac{3 + \ln(z_l)}{z_l \ln(z_l)^4} \right] \Delta z^2 + O(\Delta z^3). \quad (3.60)$$

L'approximation (3.58) peut être reformulé comme suit :

$$\frac{1}{x^2} = c_0 + \frac{c_1 (z_l + \Delta z)}{-q (z_l + \Delta z) + 1} + \frac{c_2 (z_l + \Delta z)^2}{(-q (z_l + \Delta z) + 1)^2}. \quad (3.61)$$

Sont développement en série de Taylor autour de $\Delta z = 0$ au deuxième ordre donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{x^2} = & \frac{c_0 q^2 z_l^2 - c_1 q z_l^2 - 2c_0 q z_l + c_2 z_l^2 + c_1 z_l + c_0}{(q z_l - 1)^2} \\ & + \left[\frac{(c_1 q z_l - 2c_2 z_l - c_1)}{(q z_l - 1)^3} \right] \Delta z \\ & - \left[\frac{c_1 q^2 z_l - 2c_2 q z_l - c_1 q - c_2}{(q z_l - 1)^4} \right] \Delta z^2 + O(\Delta z^3). \end{aligned} \quad (3.62)$$

En identifiant les équations (3.60) et (3.62), nous obtenons :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_0 = \frac{-\ln(z_l)q^2z_l^2 + 3q^2z_l^2 - 2\ln(z_l)qz_l + \ln(z_l)^2 - 6qz_l + 3\ln(z_l) + 3}{\ln(z_l)^4} \\ c_1 = -\frac{2(\ln(z_l)q^3z_l^3 - 3q^3z_l^3 + 9q^2z_l^2 - 3\ln(z_l)qz_l - 9qz_l + 2\ln(z_l) + 3)}{z_l \ln(z_l)^4} \\ c_2 = -\frac{\ln(z_l)q^4z_l^4 - 3q^4z_l^4 - 2\ln(z_l)q^3z_l^3 + 12q^3z_l^3 - 18q^2z_l^2 + 2\ln(z_l)qz_l + 12qz_l - \ln(z_l) - 3}{z_l^2 \ln(z_l)^4} \end{array} \right. ,$$

pour $q = 1$:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_0 = \frac{-\ln(z_l)z_l^2 + \ln(z_l)^2 - 2\ln(z_l)z_l + 3z_l^2 + 3\ln(z_l) - 6z_l + 3}{\ln(z_l)^4} \\ c_1 = -\frac{2(\ln(z_l)z_l^3 - 3z_l^3 - 3\ln(z_l)z_l + 9z_l^2 + 2\ln(z_l) - 9z_l + 3)}{z_l \ln(z_l)^4} \\ c_2 = -\frac{\ln(z_l)z_l^4 - 2\ln(z_l)z_l^3 - 3z_l^4 + 12z_l^3 + 2\ln(z_l)z_l - 18z_l^2 - \ln(z_l) + 12z_l - 3}{z_l^2 \ln(z_l)^4} \end{array} \right. . \quad (3.63)$$

Bibliographie

- [1] A. Diaf, Thèse de Magister, Application des intégrales de Feynman en mécanique quantique et étude des potentiels sextiques, (Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediène, (2001)).
- [2] C. Cohen Tannoudji, Mécanique quantique (*Hermann*, 1977).
- [3] P. A. Martin, Une initiation à l'intégrale fonctionnelle en physique quantique et statistique (*Presse polytechnique*, 1996).
- [4] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.
- [5] R. A. M. Dirac, The Principles of quantum Mechanics (*Oxford University Press*, Oxford, 1958).
- [6] R. P. Feynman and , A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (*Mc Graw – Hill*, 1965).
- [7] D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, Path integral Methods and Their Applications (*World Scientific*, Singapore, 1986).
- [8] I. H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett.* **B 84** (1979) 185.
- [9] H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets (*World scientific*, Singapore, 2004).
- [10] B. K. Berger and C. N. Vogeli, *Phys. Rev.* **32 D** (1989) 2477.
- [11] A. O. Barut and I. H. Duru, *Phys. Rep.* **172** (1989) 1.
- [12] L. Boudebza, Thèse de Magister, Super-Intégrabilité sur une Hyperboloïde a deux dimensions, (Université Mentouri Constantine, (2007)).
- [13] E. Pippa Storey, Thèse de Doctorat, Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps : étude semi-classique, (Universite Paris VI, 1996).

-
- [14] B. Boudjedaa, Thèse de Doctorat, Fondements mathématiques des intégrales de chemin "Feynman path integrals", (Université Mentouri Constantine (2010)).
- [15] S. Mameri, Thèse de Doctorat, Quantification par l'intégrale de chemin d'un ensemble de potentiels déformés, (Université Mentouri Constantine, (2010)).
- [16] H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets (*World scientific*, Singapore, 2009).
- [17] T. Arenas, T. D. de mécanique quantique, *Masson*, (1976).
- [18] A. Tilbi, Intégrale de chemin semi-classique et théorie de Broglie-Bohm, université Mentouri constantine, (2007).
- [19] L. Hulthén, Ark. Mat, Astron. Fys. **28A**, **5** (1942).
- [20] W. C. Qiang, Y Gao and R. S. Zhou, Cent. Eur. *J. Phys. Lett* **A 371**, **201** (2007).
- [21] L. Hulthén, M. Sugawara and S. Flügge (ed.), Handbuch der Physik, Springer (1957).
- [22] T. Tietz, *J. Chem. Phys.* **35**, **1917** (1961).
- [23] C. S. Lam and Y. P. Varshni, *Phys. Rev.* **A 4**, **1875** (1971).
- [24] A. A. Berezin, *Phys. Stat. Sol. (B)*, **50** (1972) 71.
- [25] P. Pyykko and J. Jokisaari, *J. Chem. Phys.* **10**, **293** (1975).
- [26] H. I. Ahmadov, *J. Phys.* **A 1550193-16** (2015).
- [27] J. Stanek, Cent. Eur. *J. Chem.* **9**, **737** (2011).
- [28] J. Stanek, Cent. Eur. *J. Phys.* **12**, **90** (2014).
- [29] N. Saad, *Phys, Scr.* **76**, **623** (2007).
- [30] M. Simsek and H. Egrifes, *J. Phys.* **A 37**, **4379** (2004).
- [31] F. Yaşuk, C. Berkdemir, A. Berkdemir and C. Önem, *Phys, Scr.* **71**, **340** (2005).
- [32] A. Arai, *J. Math. Anal. Appl.* **158**, **63** (1991); *J. Phys.* **A 34**, **4281** (2001).
- [33] Y. P. Varshni, *Phys. Rev.* **A 41**, **4682** (1990).
- [34] S. M. Ikhdaïr, Eur. *Phys. J.* **A 39**, **307** (2009).
- [35] O. Bayrak, G. Kocak, and I. Boztosun, *J. Phys. A : Math Gen.* **39**, **11521** (2006).