

République Algérien Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université de DJILALI BOUNAAMA KHEMIS MILIANA



Faculté des Sciences et de la Technologie  
Département de Science de la Matière  
Mémoire du projet de fin d'Etude

*pour l'obtention du diplôme de*

*Master*

*En*

**PHYSIQUE**

*Spécialité : physique théorique*

**SUJET**

**Etude des états "1" relatif au potentiel q-déforme de  
Manning-Rosen via les intégrales de chemin de  
Feynman.**

**Réalisé par :**

**\*Moungar Soumia**

**Encadrée par :**

**\*Diaf Ahmed**

**Année universitaire 2015/2016**

# Remerciements

Au nom d'ALLAH, le Clément et le Miséricordieux.

*A travers cette thèse de master, je tiens à remercier toutes les personnes qui ont eu contribué de près ou de loin à construire ce travail, même par un petit sourire d'encouragement.*

*J'aimerais d'abord exprimer ma gratitude à mon encadreur **Pr. Diaf Ahmed** pour avoir accepté de bon gré de participer à cette thèse, ainsi que pour ses efforts fournis, pour ses conseils judicieux prodigués et pour sa patience et sa persévérance dans mon suivi, malgré ses charges intenses.*

*Mes profonds remerciements vont aux membres du jury **M. Boukabcha H,** et **Mme.. Zaoui S.** Qui m'ont fait l'honneur de participer et de juger ma thèse malgré leurs plans de charge.*

Enfin je n'oublie pas de remercier ma mère qui n'a cessé de me suivre et de m'encourager et à toute la famille et tous mes amis.

**Moungar Soumia**



# Dédicaces

À ma mère

À mon père

À mes sœurs et tous leurs filles

À mes frères et tous leurs enfants



À tous mes amis

# Résumé

Une nouvelle expression analytique de l'énergie des états "1" est obtenue pour le potentiel Manning-Rosen dans le cadre du formalisme des intégrales de chemin en utilisant une approximation du terme centrifuge. Nous montrons qu'en effectuant une transformation espace-temps, on peut passer d'un propagateur difficile à calculer à un autre connue. Nos résultats sont en très bon accord avec ceux calculés par d'autres méthodes.

## Mots clés:

Intégrales de chemin, propagateur, fonction de Green, transformation de Duru-Kleinert, potentiel de Manning-Rosen, potentiel de Pöschl-Teller.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Généralités sur les intégrales de chemin</b>	<b>6</b>
1.1 Introduction . . . . .	6
1.2 Origine du concept d'intégrale de chemins . . . . .	6
1.3 Expérience de pensée de Feynman . . . . .	7
1.4 Amplitude de probabilité . . . . .	9
1.5 L'amplitude en mécanique quantique . . . . .	10
1.6 L'action classique . . . . .	10
1.7 Construction du propagateur . . . . .	12
1.8 Passage du propagateur à la fonction de Green . . . . .	13
1.9 Propagateur et l'équation de Schrödinger . . . . .	14
1.10 Application . . . . .	15
1.10.1 Particule libre . . . . .	15
<b>2 Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme des intégrales de Feynman</b>	<b>17</b>
2.1 Introduction . . . . .	17
2.2 Types de transformations spatio-temporelles . . . . .	18
2.2.1 Transformation locale du temps en mécanique classique . . . . .	18
2.2.2 Concept de «promotor» . . . . .	19
2.3 Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman . . . . .	20

---

2.3.1	Transformation du propagateur . . . . .	20
2.4	Application . . . . .	27
2.4.1	Potentiel du Coulomb . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Etude des états "l" relative au potentiel q-déformé de Manning-Rosen via les intégrales de chemin de Feynman</b>	<b>28</b>
3.1	Introduction . . . . .	28
3.2	Le potentiel de Manning-Rosen q-déformé . . . . .	29
3.3	L'approximation du terme centrifuge . . . . .	31
3.4	L'intégrale de chemin pour le potentiel de Manning-Rosen . . . . .	32
3.5	Transformation des coordonnées d'espace et du temps . . . . .	36
3.6	Spectre d'énergie et fonctions d'ondes . . . . .	39
3.7	Discussion des résultats . . . . .	40
	<b>Conclusion</b>	<b>44</b>

# Liste des tableaux

3.1	Les énergies des états liés $-E_{n,l}$ en unités atomiques ( $\hbar = m = 1$ ), pour le potentiel de Manning-Rosen pour $a' = 0.75$ , et différentes valeurs de $2\alpha$ . ici $c_0 = 1/12, c_1 = 1, c_2 = 1$ . . . . .	41
3.2	Les énergies des états liés $-E_{n,l}$ en unités atomiques ( $\hbar = m = 1$ ), pour le potentiel de Manning-Rosen pour $a' = 1.5$ et différentes valeurs de $2\alpha$ . ici $c_0 = 1/12, c_1 = 1, c_2 = 1$ . . . . .	43

# Introduction

La mécanique quantique joue un rôle fondamental pour la description et la compréhension des phénomènes naturels à une échelle très "petite".

Historiquement la mécanique quantique prend naissance vers la fin du 19<sup>ème</sup> siècle et le début du 20<sup>ème</sup> siècle et cela grâce aux idées de quantification de l'énergie. En 1900 c'est Planck qui, pour expliquer certaines particularités du rayonnement thermique. Puis Einstein, en 1905, et en s'appuyant sur l'idée de Planck, il a pu expliquer quelques phénomènes tels le rayonnement du corps noir, effet photoélectrique, 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].

La construction du formalisme des intégrales de chemin en mécanique quantique non relativiste par Feynman [2] en 1948 est basée sur les résultats de la publication d'un travail de Dirac [3]. En développant l'idée de Dirac, Feynman avait réussi à établir Deux formalismes mathématiques de la mécanique quantique : le formalisme matriciel de Heisenberg [4] et la formulation différentielle introduite par Schrödinger.

Ainsi, que Feynman a pu construire un troisième formalisme basé sur le principe de la superposition [5]. Il introduit des notions élémentaires telle que l'action  $S$ , le Lagrangien  $L$ , la trajectoire classique, c'est-à-dire les outils de la mécanique classique. L'amplitude de probabilité pour aller d'un point espace-temps  $(x_a; t_a)$  à un autre  $(x_b; t_b)$  est propor-

tionnelle à  $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$ , où  $S$  est l'action classique donnée par  $S = \int L dt$ . L'amplitude totale, appelée propagateur, est la somme des amplitudes relatives à tous les chemins possibles.

Cette formulation est intéressante puisqu'elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique.

Le formalisme de Feynman présente de nombreux avantages. Sa formulation lagrangienne lui permet en effet, de traiter indifféremment les problèmes dépendant et indépendant du temps [5, 6].

L'application du formalisme des intégrales de chemin aux problèmes de la particule libre et de l'oscillateur harmonique s'est faite avec succès. Cependant, ce formalisme a rencontré des difficultés dans l'étude de l'atome d'hydrogène. Il a fallu attendre l'année 1979 pour que ce problème soit résolu avec l'introduction de la transformation de Duru-Kleinert [7]. Dès lors, de nombreux travaux ont été réalisés et ont permis à ce formalisme de se développer davantage [8].

Les intégrales de parcours trouvent également un champ d'application en physique statistique [9], physique des solides [6].

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. Une application à la particule libre sera présentée.

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 connue.

*Le troisième chapitre* sera consacré à l'application de la technique développée au *chapitre 2*, au cas du potentiel de type exponentiel qui est le potentiel de Manning-Rosen, ainsi nous déterminerons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde relatifs aux états "l", et nous comparons nos résultats avec ceux obtenus par d'autres méthodes. Nous terminons, enfin, par une conclusion.

# Chapitre 1

## Généralités sur les intégrales de chemin

### 1.1 Introduction

L'intégrale de chemin est un objet mathématique qui peut être considéré comme une généralisation à un nombre infini de variables, représentée par des chemins, des intégrales ordinaires. Elle partage les propriétés algébriques des intégrales ordinaires, mais présente des propriétés nouvelles du point de vue de l'analyse [10]. C'est Richard Feynman qui a introduit les intégrales de chemin en physique dans sa thèse, Soutenue en *mai* 1942.

Par ailleurs, l'intégrale de chemin met en correspondance de façon très explicite les deux mécaniques classique et quantique. Dans ce chapitre, nous présentons des généralités sur le formalisme des intégrales de chemin. Nous allons donc nous baser sur un formalisme Lagrangien qui est une autre formulation de la mécanique quantique.

### 1.2 Origine du concept d'intégrale de chemins

Les physiciens ont bâti entre 1900 et 1926 une nouvelle théorie appelée théorie quantique. Trois formulations mathématiques de cette théorie ont vu alors le jour :

La mécanique matricielle de Heisenberg (Juillet 1925) [11], selon cette dernière les variables physiques, telles que la position  $q$  et le moment  $p$  ne sont plus représentés par

des nombres mais par des matrices. Le deuxième formalisme est celui de Schrödinger [12] dans lequel l'état d'un système quantique est décrit par une fonction d'onde solution d'une équation différentielle du second ordre.

Par ailleurs, le lien qu'entretiennent les opérateurs quantiques avec les objets de la mécanique classique ont été un sujet d'étude dès la naissance de la théorie quantique. En particulier, Dirac [2, 13] a montré que la fonction de Green, solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, peut s'exprimer dans un intervalle de temps infinitésimal, comme l'exponentielle de l'action classique. C'est à partir de cette idée que Feynman a construit son formalisme [5], où il a montré en 1942 que la relation formelle entre ces quantités s'écrit sous forme d'une intégrale fonctionnelle. Le calcul de cette dernière posait d'énormes difficultés mathématiques. Feynman a pu contourner ces difficultés via l'idée de Volterra qui consiste à remplacer la fonctionnelle par une fonction d'un nombre fini  $N$  de variables. Ceci a ramené le calcul de l'intégrale fonctionnelle à celui d'une intégrale multiple de Riemann de dimension  $N$  et d'arriver au résultat désiré en faisant tendre  $N$  vers l'infini.

### 1.3 Expérience de pensée de Feynman

Feynman a imaginé une expérience identique dans laquelle la source lumineuse est remplacée par une source d'électrons. Une particule émise par une source d'électrons  $S$  en  $A$  qui ont tous la même énergie (mono-énergétique) et partent dans toutes les directions pour rencontrer l'écran  $B$ . L'écran  $B$  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 [14].

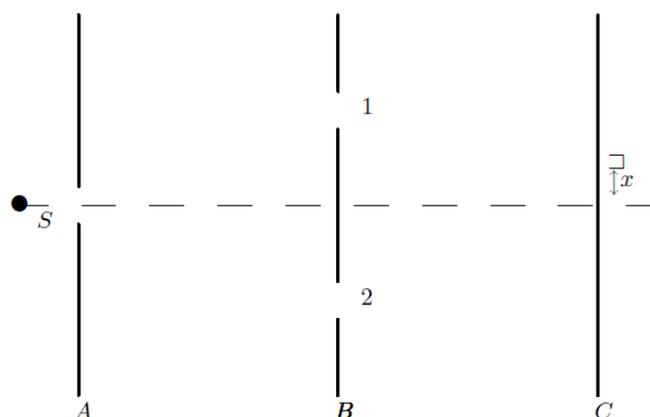


FiG 1.1 : Exprience de Feynman

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 [15] :

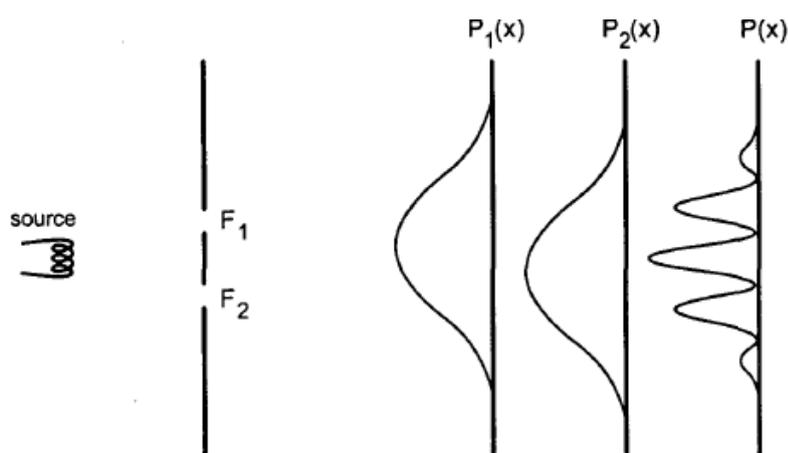


FiG 1.2 : Rsltats enregistrs .

$P(x)$  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 observés conduisent la plupart des physiciens à la conclusion suivante : « On ne peut pas dire : l'électron est passé soit par 1 soit par 2 ».

## 1.4 Amplitude de probabilité

Dans le but de donner une interprétation physique à ces résultats, Feynman a introduit la notion d'amplitude de probabilité complexe  $\phi(x)$  où  $P(x)$  n'est autre que son module au carré [1] :

$$\begin{aligned} P_1 &= |\phi_1|^2, \\ P_2 &= |\phi_2|^2, \\ \phi &= \phi_1 + \phi_2, \\ P &= |\phi|^2. \end{aligned} \tag{1.1}$$

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  $\phi_2(x)$ .

$\phi_1(x)$ , l'amplitude d'arriver à travers le trou 1 plus  $\phi_2(x)$ , l'amplitude d'arriver à travers le trou 2.

## 1.5 L'amplitude en mécanique quantique

Maintenant nous devons savoir comment chaque trajectoire contribue à l'amplitude totale pour aller de  $x_a$  à  $x_b$ . En mécanique quantique, ce n'est pas seulement le chemin pour lequel l'action est minimal qui est important mais tous les chemins possibles. Ils contribuent de façon égale à l'amplitude totale mais avec des phases différentes. La probabilité  $P(x_a; x_b)$  d'aller du point  $x_a$  à l'instant  $t_a$  au point  $x_b$  à l'instant  $t_b$  est la valeur absolue au carré  $P(x_a; x_b) = |K(x_a; x_b)|^2$  d'une amplitude  $K(x_a; x_b)$  pour aller de  $x_a$  à  $x_b$ . Cette amplitude est la somme des contributions de chaque chemin [16].

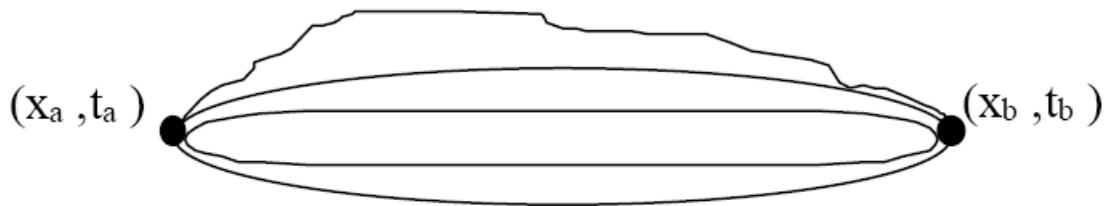


FIG1.3 : transition entre deux états de localisation pour  $x_a = 0, x_b = x_t$

L'amplitude de probabilité correspondante est appelée "propagateur", il est donné par :

$$K(x_a; x_b) = \sum_{\substack{\text{sur tous les chemins} \\ \text{de } x_a \text{ à } x_b}} \Phi[x(t)]. \quad (1.2)$$

## 1.6 L'action classique

Considérons une particule, à une dimension, en mouvement sous l'action d'un potentiel  $V(x, t)$  allant du point  $A(x_a, t_a)$  au point  $B(x_b, t_b)$ . Le chemin de la particule est représenté par une fonction du temps  $x(t)$  avec  $x(t_a) = x_a$  et  $x(t_b) = x_b$ . Le mouvement de la particule est régi par le Lagrangien.

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x, t). \quad (1.3)$$

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

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt, \quad (1.4)$$

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

$$\delta S = S(x + \delta x) - S(x) = 0, \quad (1.5)$$

au premier ordre en  $\delta x$ , or

$$\begin{aligned} S(x + \delta x) &= \int_{t_a}^{t_b} L(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}, t) dt, \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left( L(x, \dot{x}, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt, \\ &= S(x) + \int_{t_a}^{t_b} \left( \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \end{aligned} \quad (1.6)$$

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

$$\delta S = \delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \delta x \left( \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \quad (1.7)$$

Puisque  $\delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0$ , le terme  $\delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \Big|_{t_a}^{t_b}$  de l'équation (1.6) est nul. Comme  $\delta x$  peut prendre toute valeur arbitraire entre les points initial et final, la condition suivante est toujours satisfaite,

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \quad (1.8)$$

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

## 1.7 Construction du propagateur

Considérons deux points espace-temps  $(x_a; t_a)$  et  $(x_b; t_b)$  et divisons l'intervalle de temps  $[t_a; t_b]$  en  $N$  intervalles égaux de largeur  $\varepsilon$ .

Posons :  $x_a = x(t_a)$  et  $x_b = x(t_b)$ .

Vu que  $x_a$  et  $x_b$  sont fixes.

Dans le cas d'un intervalle infinitésimal de temps  $\varepsilon$ ; le propagateur d'une particule se mouvant entre deux points très voisins et soumise à un potentiel  $V(x)$  peut s'écrire comme :

$$\begin{aligned} K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) &\equiv K(x_{n+1}, x_n; \varepsilon) \\ &= \left[ \frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right]^{-1/2} \int \prod_{n=1}^{N-1} \frac{dx_n}{\left[ \frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{-1/2}} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[ \frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon^2} - V(x) \right] \right\} \end{aligned}$$

Nous pouvons ainsi construire de proche en proche le propagateur global via les propagateurs partiels correspondants aux  $N$  intervalles de temps infinitésimaux  $\varepsilon$ ,

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \mathfrak{D}x(t) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right], \quad (1.10)$$

où la mesure  $\mathfrak{D}x(t)$  et l'action  $S(x(t))$  sont données respectivement par :

$$\mathfrak{D}x(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right]^{-1/2} \prod_{n=1}^{N-1} \frac{dx_n}{\left[ \frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{-1/2}}, \quad (1.11)$$

$$S(x(t)) \equiv \sum_{n=1}^N S(x_n, x_{n-1}; \varepsilon) = \sum_{n=1}^N \left[ \frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(x_n) \right]. \quad (1.12)$$

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.

## 1.8 Passage du propagateur à la fonction de Green

Le propagateur peut être exprimé en fonction de l'opérateur d'évolution dans le temps comme suit [17] :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | U(t_b, t_a) | x_a \rangle, \quad (1.13)$$

où

$$U(t_b, t_a) = \exp \left[ \frac{-iT}{\hbar} \hat{H}(t_b, t_a) \right], \quad (1.14)$$

avec :  $T = t_b - t_a$ . Il est, par ailleurs, possible d'extraire le spectre d'énergie ainsi que la fonction d'onde correspondante d'un système physique donnée, à partir de la fonction de Green cette, dernière n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur.

En effet,

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT e^{i(E+i\eta)T/\hbar} K(x_b, x_a; T), \quad (1.15)$$

où  $\eta$  est une constante positive.

Cette fonction vérifie la relation :

$$\left( \hat{H} - E \right) G(x_b, x_a; E) = \delta(x_b - x_a). \quad (1.16)$$

La relation (1.13) ; nous permet d'écrire :

$$G(x_b, x_a; E) = \langle x_b | \frac{1}{\hat{H} - E - i\eta} | x_a \rangle, \quad (1.17)$$

en introduisant la relation de fermeture sur  $n, l$  dans l'équation (1.15). Il vient :

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT \sum_{n,l} \langle n, l | e^{i(E+i\eta)T/\hbar} e^{-iHT/\hbar} | x_a \rangle \langle x_b | n, l \rangle, \quad (1.18)$$

ou encore,

$$G(x_b, x_a; E) = \sum_{n,l}^{\infty} \frac{\chi_{n,l}^*(x_a) \chi_{n,l}(x_b)}{E_{n,l} - E - i\varepsilon}, \quad (1.19)$$

$\chi_{n,l}(x)$  est fonction d'onde relative a l'énergie propre  $E_{n,l}$  il est également possible d'arriver à  $\chi_{n,l}(x)$  et  $E_{n,l}$  a partir de la relation :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{n,l}^{\infty} \chi_{n,l}^*(x_a) \chi_{n,l}(x_b) e^{-iE_{n,l}T/\hbar}. \quad (1.20)$$

## 1.9 Propagateur et l'équation de Schrödinger

Dans la représentation de Schrödinger, l'évolution dans le temps des états est gouvernée par l'équation :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (1.21)$$

qui s'intègre dans le cas particulier d'un Hamiltonien indépendant du temps :

$$|\psi(t_a)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_a - t)\right] |\psi(t)\rangle, \quad (1.22)$$

où  $\hat{U}(t_a, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_a - t)\right]$  représente l'opérateur d'évolution. Considérons une particule dans un potentiel, le Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (1.23)$$

Dans la représentation des positions  $x$  de l'équation d'évolution devient :

$$\langle x_a | \psi(t_a) \rangle = \langle x_a | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H}(t_a - t)\right) |\psi(t)\rangle. \quad (1.24)$$

Utilisons la relation de fermeture sur les positions  $x$

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1. \quad (1.25)$$

L'équation (1.24) devient :

$$\langle x_a | \psi(t_a) \rangle = \int dx \langle x_a | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H}(t_a - t)\right) | \psi(t) \rangle. \quad (1.26)$$

Soit encore

$$\psi(x_a, t_a) = \int K(x_a, t_a; x, t) \psi(x, t) dx. \quad (1.27)$$

Le propagateur  $K(x_a, t_a; x, t) = \langle x_a | \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \hat{H}(t_a - t)\right) | \psi(t) \rangle$  permet d'évaluer l'amplitude de transition entre les deux états. Prenons un état initial localisés en  $x_0$

$$\psi(x, t_0) = \delta(x - x_0), \quad (1.28)$$

$$\psi(x_a, t_a) = K(x_a, t_a; x_0, t_0). \quad (1.29)$$

Donne l'amplitude de probabilité de trouver la particule en  $x_a$  à l'instant  $t_a$  sachant qu'elle était en  $x_0$  à l'instant  $t_0$ .

## 1.10 Application

### 1.10.1 Particule libre

La particule libre est décrite par le Lagrangien

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2. \quad (1.30)$$

Prenons la 1<sup>er</sup> intégrale  $N = 2$  et  $i = 1$  dans l'équation (1.11)

$$\begin{aligned} & \int dx_1 \cdot e^{\frac{im}{2\hbar} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2]} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \cdot e^{\frac{im}{2\hbar} [2(x_1 - \frac{1}{2}(x_0 - x_2))^2 + \frac{1}{2}(x_2 - x_0)^2]}, \end{aligned} \quad (1.31)$$

on utilise  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha X^2) dX = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ , on obtient

$$= \sqrt{\frac{2\pi i \varepsilon \hbar}{m}} \frac{1}{2} e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} \frac{1}{2}(x_2-x_0)^2}. \quad (1.32)$$

Ceci représente un ensemble d'intégrales gaussiennes, des intégrales de la forme  $\int[\exp(-ax^2)]dx$  ou  $\int[\exp(-ax^2 + bx)]dx$ . Comme l'intégrale d'une fonction de Gauss est encore une fonction de Gauss, nous pouvons intégrer une variable après l'autre.

Nous remarquons que  $x_1$  a disparu de l'intégrale.

$$\begin{aligned} \int dx_2. e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} [(x_2-x_0)^2 + (x_3-x_2)^2]} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2. e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} \left[ \frac{3}{2}(x_2 - \frac{1}{3}x_0 - \frac{2}{3}x_3)^2 + \frac{1}{3}(x_3-x_0)^2 \right]}, \quad (1.33) \\ &= \sqrt{\frac{2\pi i \varepsilon \hbar}{m}} \frac{2}{3} e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} \frac{1}{3}(x_3-x_0)^2}. \end{aligned}$$

Nous pouvons démontrer par récurrence que :

$$\begin{aligned} &\int dx_{n-1}. e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} \left[ \frac{1}{n-1}(x_{n-1}-x_0)^2 + (x_n-x_{n-1})^2 \right]} \\ &= \sqrt{\left( \frac{2\pi i \varepsilon \hbar}{m} \right) \frac{n-1}{n}} e^{\frac{im}{2\varepsilon\hbar} \frac{1}{n}(x_n-x_0)^2}, \quad (1.34) \end{aligned}$$

en injectant tout les résultats nous aboutissons à :

$$\begin{aligned} &\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{1/2} \cdot \sqrt{\frac{1}{2} \frac{2}{3} \dots \frac{N-1}{N}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{1}{N\varepsilon}(x_b-x_a)^2} \\ &= \left( \frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon n} \right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{1}{N\varepsilon}(x_b-x_a)^2} = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{T}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b-x_a)^2}{T}}, \quad (1.35) \end{aligned}$$

l'équation du propagateur devient :

$$K(x_b, x_a) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar T}} e^{\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_b-x_a)^2}{T}},$$

où  $T = t_b - t_a = N\varepsilon$ .

# Chapitre 2

## Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme des intégrales de Feynman

### 2.1 Introduction

Il existe plusieurs techniques de calcul direct du propagateur relatif à des potentiels physiques, mais dans certains cas on ne peut pas les utiliser à cause de la forme compliquée du propagateur.

Après le succès du calcul du propagateur de l'OH et de la particule libre, le formalisme des intégrales de chemins est resté coincés ; jusqu'à l'introduction, en 1979, de la transformation de Duru- Kleinert [6] afin de résoudre le problème de l'atome d'Hydrogène.

Nous notons qu'il y a deux types de transformations temporelles :

La transformation globale du temps : transforme le paramètre  $t$  en un nouveau paramètre  $\tau$ , ou  $t$  s'écrit en fonction de  $\tau$  comme suit :

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

La transformation locale du temps : dépend de la position  $d\tau = f(q(t))dt$ , où  $f(q(t))$  et une fonction connue.

Nous présentons dans ce chapitre les types de transformations spatio-temporelles, ensuite nous développons la méthode.

## 2.2 Types de transformations spatio-temporelles

Afin d'illustrer les transformations spatio-temporelles en mécanique quantique, nous les présentons en mécanique classique.

### 2.2.1 Transformation locale du temps en mécanique classique

La transformation locale du temps apparaît naturellement en mécanique classique dans le cas des forces centrales (force de gravitation). Le principe variationnel  $\delta S = 0$  conduit en coordonnées polaires à deux équations

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

$$mr^2\dot{\theta} = l = cte. \quad (2.3a)$$

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

L'intégration de (2.2) :

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

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

Nous notons qu'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 (2.3a) comme suit :  $d\theta = \frac{l}{mr^2} dt$ .

On peut considérer cette équation comme une transformation locale de temps. Cette transformation devient plus intéressante encore lorsqu'elle est suivie de la transformation de coordonnée  $r \rightarrow u = f(r)$  avec  $u = \frac{1}{r}$ .

L'équation de l'orbite (2.1) devient alors :

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{l^2} \frac{d}{du} \left[ V\left(\frac{1}{u}\right) \right]. \quad (2.5)$$

Dans le cas de la gravitation (problème de Kepler)

$$V(r) = -\frac{k}{r} \implies V(u) = -ku. \quad (2.6)$$

L'équation (2.5) devient

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = \frac{mk}{l^2} = cte. \quad (2.7)$$

Cette équation n'est autre que celle d'un oscillateur harmonique de fréquence unité soumis à une force constante  $\frac{mk}{l^2}$ .

Ainsi le problème de Kepler a été ramené à celui d'un oscillateur harmonique, via une transformation spatio-temporelle.

### 2.2.2 Concept de «promotor»

Par ailleurs, la fonction de Green n'est autre que la transformé de Fourier du propagateur

$$G(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty \exp \frac{iET}{\hbar} K(\vec{q}_b, \vec{q}_a; T) dt. \quad (2.8)$$

Cette équation peut s'écrire comme suit :

$$G(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty P(\vec{q}_b, \vec{q}_a; T) dt. \quad (2.9)$$

Où le promotor  $P(\vec{q}_b, \vec{q}_a; T)$  n'est autre que  $\exp \frac{iET}{\hbar} K(\vec{q}_b, \vec{q}_a; T)$ .

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

$$P(\vec{q}_b, \vec{q}_a; T) = \int \exp \frac{i\omega}{\hbar} \mathfrak{D} \vec{q}(t), \quad (2.10)$$

où

$$\omega = \int L dt + E(t_f - t_i). \quad (2.11)$$

## 2.3 Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman

Considérons le cas de dimension  $D = 1$ .

### 2.3.1 Transformation du propagateur

Par cette méthode, nous pouvons passer d'un propagateur difficile à calculer à une forme de propagateur que l'on sait calculer, pourvu que certaines conditions sur les paramètres du potentiel de départ soient vérifiées. Cette technique repose sur une transformation de coordonnées  $x \rightarrow q$  suivie d'une transformation temporelle  $t \rightarrow s$  [9]. Pour mieux illustrer cette méthode, considérons un système physique décrit par un potentiel  $V(x)$  de forme compliquée. Le propagateur correspondant s'écrit sous sa forme standard comme :

$$K(x_b, t_b, x_a, t_a) = \int \dots \int \mathfrak{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L dt\right), \quad (2.12)$$

où

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x), \quad (2.13)$$

nous pouvons écrire le propagateur (2.12) sous une forme discrète :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}} \int \dots \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^n S_j\right\} \prod_{j=1}^{n-1} dx_j, \quad (2.14)$$

où  $\sigma_j = s_j - s_{j-1}$

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

### 2.3. Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman 21

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

Le développement de  $\Delta x_j$  au 3<sup>ème</sup> 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 :

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

d'autre part, le terme représentant l'énergie potentielle  $V(x_j)$  se transforme comme suit :

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

où encore

$$\varepsilon V(x_j) = \varepsilon V(f_j). \quad (2.19)$$

Nous pouvons démontrer la relation (2.17) comme suit :

posons

$$\Delta x_j = x_j - x_{j-1}, \quad (2.20)$$

où

$$x_j = f(q_j), \quad (2.21)$$

$$x_{j-1} = f(q_{j-1}), \quad (2.22)$$

nous avons posé :

2.3. Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman<sup>22</sup>

$$\tilde{q}_j = \frac{q_j + q_{j+1}}{2} \implies q_j = \tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}, \quad (2.23)$$

$$q_{j-1} = \tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}. \quad (2.24)$$

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

$$f(q_j) = f\left(\tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}\right) = f(\tilde{q}_j) + f'(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{48} + \dots \quad (2.25)$$

de même

$$f(q_{j-1}) = f\left(\tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}\right) = f(\tilde{q}_j) - f'(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} - f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{48} + \dots, \quad (2.26)$$

d'où

$$\Delta x_j = f(q_j) - f(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j) \Delta q_j + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{24} \quad (2.27)$$

où encore

$$(\Delta x_j)^2 = f'^2(\tilde{q}_j) (\Delta q_j)^2 \left[ 1 + \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} \frac{(\Delta q_j)^2}{12} \right] + 0 [\varepsilon^2], \quad (2.28)$$

considérons maintenant la mesure :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \prod_{j=1}^{N-1} f'(q_j) dq_j, \quad (2.29)$$

où  $dx_j = f'(q_j) dq_j$ ;

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = [f'(q_n) \cdot f'(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \sqrt{f'(q_j) \cdot f'(q_{j-1})} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (2.30)$$

Effectuons, dans le but décrire le terme  $T_j$  sous sa forme standard, un second changement de variable  $t \rightarrow s$ , où la nouvelle variable temps  $s$  est reliée à  $t$  par :

### 2.3. Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman 23

$$dt = [f'(q(s))]^2 ds, \quad (2.31)$$

le nouvel intervalle de temps est  $\sigma_j = s_j - s_{j-1}$

Les deux paramètres infinitésimaux  $\varepsilon$  et  $\sigma_j$  correspondant respectivement à  $t$  et  $s$ , vérifient l'équation :

$$\varepsilon = \sigma_j f'(q_j) f'(q_{j-1}), \quad (2.32)$$

d'où

$$A_N \prod_{j=1}^{n-1} dx_j = [f'(q_n) \cdot f'(q_0)]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \left( \frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{n-1} dq_j, \quad (2.33)$$

$A_N$  : est la constante de normalisation.

nous avons :

$$f(q_j) = f'(\tilde{q}_j) + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8}, \quad (2.34)$$

$$f(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j) - f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8}, \quad (2.35)$$

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

$$f'(q_j) \cdot f'(q_{j-1}) = f'^2(\tilde{q}_j) \left[ 1 + \frac{(\Delta q_j)^2}{4} \left\{ \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left( \frac{f_j^{(2)}}{f_j'} \right)^2 \right\} \right], \quad (2.36)$$

nous pouvons également écrire  $\varepsilon$  comme :

$$\varepsilon = \sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left[ \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left( \frac{f_j^{(2)}}{f_j'} \right)^2 \right] \right\}, \quad (2.37)$$

le terme énergie cinétique devient :

$$\begin{aligned} \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 &= \frac{m}{2} f'^2 (\Delta q_j)^2 \left( 1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right) \\ &\times \frac{1}{\sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left( \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \frac{f_j''^2}{f_j'^2} \right) \right\}}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

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

$$\frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j} (\Delta q_j)^4 \Delta V_j, \quad (2.39)$$

où

$$\Delta V_j = \frac{f_j''^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(3)}}{f_j'}, \quad (2.40)$$

alors que le terme énergie potentielle devient :

$$\varepsilon V(x_j) = \sigma_j f_j'^2 V(f_j) = \sigma_j f_j'^2 V_j, \quad (2.41)$$

le terme exponentiel du propagateur est donné par :

$$e^{\frac{i}{\hbar} S_j} = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j} \Delta V_j (\Delta q_j)^4 - \sigma_j f_j'^2 V_j \right\} \right], \quad (2.42)$$

en utilisant la relation de la démocratie

$$\prod_{j=1}^{N-1} dq_j = \prod_{j=1}^{N-1} d(\Delta q_j). \quad (2.43)$$

Nous utilisons :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 - bx^4) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-ax^2 - \frac{3b}{4a^2}\right). \quad (2.44)$$

Pour  $a$  grand

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

On aboutit à :

### 2.3. Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman 25

$$e^{\frac{i}{\hbar}S_j} = e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\delta_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j (f_j'^2 V_j + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{m} \Delta V_j) \right\}}, \quad (2.45)$$

le pseudo temps "s" vérifie la condition :

$$T = t_b - t_a = \int_{s_a}^{s_b} ds [f'(q(s))]^2, \quad (2.46)$$

Cette condition peut être formulée comme suit :

$$[f'(q_b)f'(q_a)] \int_0^\infty ds \delta \left[ T - \int_{s_a}^{s_b} d\tau [f'(q(\tau))]^2 \right] = 1, \quad (2.47)$$

aussi le propagateur global aura pour expression :

$$\begin{aligned} K(f(q_b), t_b; f(q_a), t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} f'(q_a)f'(q_b) \int_0^\infty \delta \left( T - \int_{s_a}^{s_b} d\tau [f'(q(\tau))]^2 \right) ds \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} f'(q_a)f'(q_b) \int_0^\infty \delta(T - \int_{s_a}^{s_b} d\tau [f'(q_s)]^2) K_N ds, \end{aligned} \quad (2.48)$$

où  $K_N$  est donné [18] par :

$$K_N = [f(q_n) \cdot f(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left( \frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}S_j} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (2.49)$$

nous arrivons après développement à :

$$\begin{aligned} k(f(q_b), t_b; f(q_a), t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{f'(q_b)f'(q_a)}}{2\pi\hbar} \left( \frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{N/2} \\ &\quad \times \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-iE\tau}{\hbar}} dE \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp \left( \sum_{j=1}^N \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j \right), \end{aligned} \quad (2.50)$$

avec

$$\tilde{S}_j = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left( f_j'^2 V_j + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{m} \Delta V_j - E f_j'^2 \right), \quad (2.51)$$

### 2.3. Les transformations de coordonnées et de temps dans le formalisme de Feynman 26

nous pouvons extraire la fonction de Green  $G(q_b, q_a; E)$  Transformée de Fourier du propagateur

$$K(q_b, q_a, E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-iET}{\hbar}} G(q_b, q_a; E) dE \quad (2.52)$$

où

$$G(q_b, q_a; E) = \sqrt{f'(q_b)f'(q_a)} \int_0^\infty ds p(q_b, q_a, s), \quad (2.53)$$

après identification :

$$P(q_b, q_a, s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left( \frac{m}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} \times \prod_{j=1}^{N-1} dq_j e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{S}_j}, \quad (2.54)$$

où :

$$\sum_{j=1}^N \tilde{S}_j = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j (f_j'^2 (V_j - E) + \Delta V_j) \right\}. \quad (2.55)$$

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

$$\tilde{S}(q(s)) = \int_0^s dE \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{d\sigma} \right)^2 - \tilde{V}(q) \right], \quad (2.56)$$

avec

$$\tilde{V}(q) = f'^2(q) [V(f(q)) - E] + \Delta V \quad (2.57)$$

où :

$$\Delta V = \frac{\hbar^2}{8m} \left[ 3 \frac{f''^2}{f_j'^2} - 2 \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} \right]. \quad (2.58)$$

La détermination de la fonction de Green  $G(q_b, q_a; E)$  nous permet, via quelques développements mathématiques, d'obtenir le spectre des énergies ainsi que les fonctions d'ondes correspondantes, du système physique étudié.

## 2.4 Application

Dans le but d'illustrer la méthode présentée précédemment, nous nous proposons de l'appliquer aux potentiels du Coulomb.

### 2.4.1 Potentiel du Coulomb

Le potentiel de Coulomb est donné par :

$$V(r) = \frac{A}{2mr^2} + \frac{e^2}{r}, \quad (2.59)$$

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

$$r = q^2 \text{ et } \frac{dt}{ds} = [f'(q)]^2, \Delta V_j = \frac{f''^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3} \frac{f^{(3)}}{f'} \text{ ici } f(q) = q^2. \quad (2.60)$$

Ce qui donne :

$$f' = 2q, f'' = 2 \text{ et } f''' = 0; ds = \frac{dt}{4q^2}; \Delta V_j = \frac{1}{q^2}. \quad (2.61)$$

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

$$\tilde{V}(q) = 4q^2 \left[ \frac{A}{2mq^4} + \frac{e^2}{q^2} - E \right] + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{mq^2},$$

où encore,

$$\tilde{V}(q) = \left( 2A + \frac{3}{8} \hbar^2 \right) \frac{1}{mq^2} + 4e^2 - 4Eq^2. \quad (2.62)$$

Nous avons transformé le potentiel de Coulomb à celui de l'oscillateur harmonique, qui déjà solvable dans le cadre du formalisme de Feynman.

# Chapitre 3

## Etude des états "l" relative au potentiel q-déformé de Manning-Rosen via les intégrales de chemin de Feynman

### 3.1 Introduction

L'étude des solutions de l'équation de Schrödinger avec des techniques récentes a fait l'objet de plusieurs travaux. Ces solutions jouent un rôle primordial en mécanique quantique, car elles contiennent toutes les informations nécessaires concernant le système quantique étudié.

Les solutions analytiques exactes des équations d'ondes (non relativiste et relativiste) ne sont possibles que pour certains potentiels physiques. Il est bien connu que les solutions exactes de ces équations d'ondes ne sont possibles que dans quelques cas simples comme le potentiel de Coulomb, l'oscillateur harmonique, les potentiels pseudo harmoniques et d'autres. Les solutions analytiques exactes de l'équation des ondes avec des potentiels de type exponentiel sont impossible pour l'état  $l \neq 0$ . Pour ce faire, différentes approximations du terme centrifuge ont été proposées, notamment celles relatives aux potentiels de type exponentiel [19]. Nous pouvons citer le potentiel de Manning-Rosen introduit en

1933, et celui de Pöschl-Teller [32, 21]. De plus, les potentiels à symétrie sphérique jouent un rôle très important en physique microscopique car ils sont largement utilisés comme une bonne approximation des potentiels d'interaction dans de nombreux domaines de la physique [22]. Parmi les méthodes proposées pour résoudre de tels problèmes, nous citons la méthode de Nikiforov-Uvarov (N-U) [23] et la méthode de Numérique (Num) [24].

Ce chapitre a pour but la détermination, dans le cas du potentiel Manning-Rosen  $q$ -déformé et via les intégrales de Feynman, le spectre des états "l" ainsi que les fonctions d'onde correspondantes.

## 3.2 Le potentiel de Manning-Rosen $q$ -déformé

Le potentiel étudié est celui de Manning-Rosen  $q$ -déformé, il s'écrit comme :

$$V_{qMR}(r) = -A' \coth_q(\alpha y) + \frac{B'}{\sinh^2_q(\alpha y)} \quad (3.1)$$

où  $A'$  et  $B'$  sont des paramètres.

Ce potentiel dépend d'un paramètre de déformation réel  $q$ .

on utilise les fonctions hyperboliques suivantes [25] :

$$\begin{aligned} \cosh_q(\alpha y) &= \sqrt{q} \cosh(\alpha y), \\ \sinh_q(\alpha y) &= \sqrt{q} \sinh(\alpha y), \\ \coth(\alpha y) &= \frac{\cosh(\alpha y)}{\sinh(\alpha y)}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\coth_q(\alpha y) = \frac{\cosh_q(\alpha y)}{\sinh_q(\alpha y)}, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned}
\cosh_q(\alpha y) &= \frac{e^{\alpha y} + qe^{-\alpha y}}{2} = \sqrt{q} \frac{e^{\alpha y} + e^{-\alpha y}}{2}, \\
\sinh_q(\alpha y) &= \frac{e^{\alpha y} - qe^{-\alpha y}}{2} = \sqrt{q} \frac{e^{\alpha y} - e^{-\alpha y}}{2}, \\
(\sinh_q(\alpha y))^2 &= q \left( \frac{e^{\alpha y} - e^{-\alpha y}}{2} \right)^2.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Nous pouvons passer de ce potentiel déformé à celui non déformé en utilisant,

$$y = r + \frac{1}{\alpha} \ln \sqrt{q}, \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned}
V_{qMR}(r) &= -A' \frac{\frac{\sqrt{q} \left( e^{\alpha \left( r + \frac{1}{\alpha} \ln \sqrt{q} \right)} + e^{-\alpha \left( r + \frac{1}{\alpha} \ln \sqrt{q} \right)} \right)}{2}}{\frac{\sqrt{q} \left( e^{\alpha \left( r + \frac{1}{\alpha} \ln \sqrt{q} \right)} - e^{-\alpha \left( r + \frac{1}{\alpha} \ln \sqrt{q} \right)} \right)}{2}} \\
&\quad + \frac{B'}{q^2 \left( e^{\alpha(r)} - e^{-\alpha(r)} \right)^2},
\end{aligned} \tag{3.6}$$

$$\begin{aligned}
V_{qMR}(r) &= -A' \frac{q \left( e^{\alpha(r)} + e^{-\alpha(r)} \right)}{q \left( e^{\alpha(r)} - e^{-\alpha(r)} \right)} \\
&\quad + \frac{4B'}{q^2 \left( e^{\alpha(r)} - e^{-\alpha(r)} \right)^2},
\end{aligned} \tag{3.7}$$

$$V_{qMR}(r) = -A' \frac{\left( e^{\alpha r} + e^{-\alpha r} \right)}{\left( e^{\alpha r} - e^{-\alpha r} \right)} + \frac{4B'}{q^2 \left( e^{\alpha r} - e^{-\alpha r} \right)^2}. \tag{3.8}$$

ou encore :

$$V_{MR}(r) = -A \coth(\alpha r) + \frac{B}{\sinh^2(\alpha r)}. \tag{3.9}$$

Avec,

$$A = A'; \quad B = \frac{B'}{q^2}.$$

Pour le cas particulier  $q = 1$ , le potentiel devient non-déformé.

Ce potentiel est similaire à celui de Manning-Rosen non-déformé.

### 3.3 L'approximation du terme centrifuge

Pour surmonter le problème du terme centrifuge certains physiciens ont utilisé l'approche proposée par Green et Aldrich 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 potentiels de type exponentiel [26, 27, 28].

Dans ce schéma d'approximation, notée  $F_1$ , le terme centrifuge est remplacé par :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 \left[ \frac{e^{-2\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})^2} \right]. \quad (3.10)$$

Comme prévu, cette approximation, est plus pertinente quand alpha ( $\alpha$ ) est faible. D'autres approximations ont été proposées. Par exemple, Qiang [29] a suggéré :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 \left[ \frac{e^{2\alpha r} e^{-2\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})} + \left( \frac{e^{-2\alpha r}}{1 - e^{-2\alpha r}} \right)^2 \right]. \quad (3.11)$$

Que nous notons  $F_2$

Une Troisième approximation présentée par Ikhdair dans la référence [30], notée  $F_3$

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 \left[ c_0 + c_1 \frac{e^{-2\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})} + c_2 \left( \frac{e^{-2\alpha r}}{1 - e^{-2\alpha r}} \right)^2 \right]. \quad (3.12)$$

$c_0 = \frac{1}{12}$ ,  $c_1 = 1$  et  $c_2 = 1$ .

Afin de comparer le degré de validité de trois approximations, nous présentons dans la *Fig 3.1*, les graphes des trois expressions. Il est clair que l'approximation  $F_3$  est la plus appropriée. Par conséquent, cette approximation  $F_3$  sera utilisée tout au long de la présente étude.

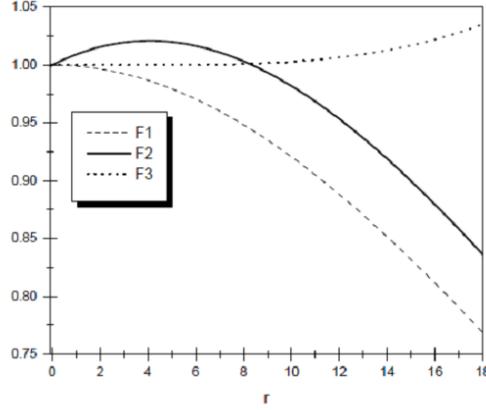


FIG 3.1 : Les graphes des trois approximations  
avec alpha=0.05

$$\text{où } F_1 \approx r^2 \cdot 4\alpha^2 \left[ \frac{e^{-2\alpha r}}{(1-e^{-2\alpha r})^2} \right], F_2 \approx r^2 \cdot 4\alpha^2 \left[ \frac{e^{2\alpha r} e^{-2\alpha r}}{(1-e^{-2\alpha r})} + \left( \frac{e^{-2\alpha r}}{1-e^{-2\alpha r}} \right)^2 \right],$$

$$F_3 = r^2 \cdot 4\alpha^2 \left[ c_0 + c_1 \frac{e^{-2\alpha r}}{(1-e^{-2\alpha r})} + c_2 \left( \frac{e^{-2\alpha r}}{1-e^{-2\alpha r}} \right)^2 \right].$$

### 3.4 L'intégrale de chemin pour le potentiel de Manning-Rosen

le potentiel (3.9) sera résolu en utilisant les intégrales de chemin

$$K(r_b, t_b, r_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_j \right] \times \prod_{j=1}^N \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j, \quad (3.13)$$

$$S_j = \frac{m}{2\varepsilon} (r_j - r_{j-1})^2 - \varepsilon V_{eff}; \quad (3.14)$$

et  $\Delta r = r_j - r_{j-1}$ ,  $\varepsilon = \Delta t_j = t_j - t_{j-1}$ ,  $t_a = t_0$  et  $t_b = t_N$ ,

où  $V_{eff}$  est donné par :

$$V_{eff} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V_{MR}(r), \quad (3.15)$$

$V_{MR}(r)$  peut être réécrit en terme des exponentielles [31],

$$V_{MR}(r) = 2\alpha^2 \left[ \frac{\alpha'(\alpha' - 1)e^{-4\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})^2} - A'_1 \frac{e^{-2\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})} \right]. \quad (3.16)$$

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

$$\begin{aligned} t &= \frac{e^{-2\alpha r}}{1 - e^{-2\alpha r}} \Rightarrow t(1 - e^{-2\alpha r}) = e^{-2\alpha r} \\ &\Rightarrow t - t.e^{-2\alpha r} = e^{-2\alpha r} \\ &\Rightarrow t = e^{-2\alpha r}(1 + t) \Rightarrow e^{-2\alpha r} = \frac{t}{1 + t}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

ce qui donne :

$$V_{MR}(r) = 2\alpha^2 [\alpha'(\alpha' - 1)t^2 - A'_1 t]. \quad (3.18)$$

Par ailleurs, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \coth(\alpha r) &= \frac{\cosh(\alpha r)}{\sinh(\alpha r)} = \frac{1 + e^{-2\alpha r}}{1 - e^{-2\alpha r}} \\ &= \frac{1 + \frac{t}{1+t}}{1 - \frac{t}{1+t}} = 2t + 1, \end{aligned} \quad (3.19)$$

ce qui donne,

$$t = \frac{\coth(\alpha r) - 1}{2}, \quad (3.20)$$

la substitution de (3.20) dans (3.18) donne :

$$V_{MR}(r) = 2\alpha^2 \left[ \alpha'(\alpha' - 1) \left( \frac{\coth(\alpha r) - 1}{2} \right)^2 - A'_1 \left( \frac{\coth(\alpha r) - 1}{2} \right) \right]. \quad (3.21)$$

On pose  $V_0 = 2\alpha^2 A'_1$ ,  $V_1 = 2\alpha^2(\alpha'(\alpha' - 1))$

$$V_{MR}(r) = - \left( \frac{V0 + V1}{2} \right) \coth(\alpha r) + \frac{V1}{4} \coth^2(\alpha r) + \frac{V0}{2} + \frac{V1}{4}. \quad (3.22)$$

Par ailleurs, nous notons que le potentiel de Manning-Rosen 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 suivante :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 \left[ c_0 + c_1 \frac{e^{-2\alpha r}}{(1 - e^{-2\alpha r})} + c_2 \left( \frac{e^{-2\alpha r}}{1 - e^{-2\alpha r}} \right)^2 \right]. \quad (3.23)$$

En utilisant la relation (3.17), nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 [c_0 + c_1 t + c_2 t^2], \text{ avec } t = \frac{\coth(\alpha r) - 1}{2}, \quad (3.24)$$

ou encore

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 \left[ \left( c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4} \right) + \left( \frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{4} \right) \coth(\alpha r) + \frac{c_2}{4} \coth^2(\alpha r) \right]. \quad (3.25)$$

L'expression (3.15) devient

$$\begin{aligned} V_{eff} &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} 4\alpha^2 \left( c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4} \right) + \frac{V0}{2} + \frac{V1}{4} \\ &+ \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} 4\alpha^2 \left( \frac{c_1}{2} - \frac{c_2}{4} \right) - \frac{V0}{2} - \frac{V1}{2} \right) \coth(\alpha r) \\ &+ \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} 4\alpha^2 \frac{c_2}{4} + \frac{V1}{4} \right) \coth^2(\alpha r), \end{aligned} \quad (3.26)$$

où encore

$$\begin{aligned} V_{eff} &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} 2\alpha^2 \left( c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4} \right) + \frac{V0}{2} + \frac{V1}{4} \\ &+ \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \alpha^2 (c_1 - c_2) - \frac{V0}{2} - \frac{V1}{2} \right) \coth(\alpha r) \\ &+ \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \alpha^2 c_2 + \frac{V1}{4} \right) \coth^2(\alpha r); \end{aligned} \quad (3.27)$$

En utilisant la relation  $\coth^2(\alpha r) = 1 + \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)}$ , nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
V_{eff} = & \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} 2\alpha^2 (c_0 - \frac{c_1}{2} + \frac{c_2}{4}) + \frac{V0}{2} + \frac{V1}{4} \\
& + (\frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \alpha^2 (c_1 - c_2) - \frac{V0}{2} - \frac{V1}{2}) \coth(\alpha r) \\
& + (\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \alpha^2 c_2 + \frac{V1}{4}) (1 + \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)}),
\end{aligned} \tag{3.28}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}
V_{eff} = & \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \alpha^2 (2c_0 - c_1 + c_2) + \frac{V0}{2} + \frac{V1}{2} \\
& + (\frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \alpha^2 (c_1 - c_2) - \frac{V0}{2} - \frac{V1}{2}) \coth(\alpha r) \\
& + (\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \alpha^2 c_2 + \frac{V1}{4}) \frac{1}{\sinh^2(\alpha r)}.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

D'une manière condensée

$$V_{eff} = -A \coth(\alpha r) + \frac{B}{\sinh^2(\alpha r)} + C \tag{3.30}$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} A = - \left( \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \alpha^2 (c_1 - c_2) - \frac{V0}{2} - \frac{V1}{2} \right), \\ B = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} \alpha^2 c_2 + \frac{V1}{4}, \\ C = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \alpha^2 (2c_0 - c_1 + c_2) + \frac{V0}{2} + \frac{V1}{4}. \end{array} \right.$$

Le propagateur devient :

$$K(r_b, r_a; T) = \int Dr(t) \exp \left[ \int_{t_a}^{t_b} \left( \frac{m}{2} \dot{r}^2 - V_{eff}(r) \right) dt \right]. \tag{3.31}$$

Nous avons transformé le problème relatif aux états "l" du potentiel de Manning-Rosen à celui des états "s". 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 (3.30), à celui relatif au potentiel de Pöschl-Teller modifié dont le spectre a été déjà calculé.

## 3.5 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 :

$$r = f(z) \equiv (2a) \operatorname{arccoth}(2 \coth^2 z - 1), \quad (3.32)$$

$$dt = f'^2(z) ds, \quad (3.33)$$

avec

$$f'^2(z) = (2a)^2 \tanh^2 z. \quad (3.34)$$

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

Nous savons, 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  $K_l(r_b, r_a; T)$  comme suit [8] :

$$K_l(z_b, z_a; T) = \int \frac{dE}{2i\pi} \exp \frac{-iET}{\hbar} G(z_b, z_a; E), \quad (3.35)$$

où

$$G(z_b, z_a; E) = \frac{i}{\hbar} [f'(z_a)f'(z_b)]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty ds_b \widehat{K}_l(z_b, z_a; s_b), \quad (3.36)$$

avec

$$\widehat{K}_l(z_b, z_a; s_b) = \int Dz(s) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^{s_b} \left( \frac{m}{2} \dot{z}^2 - f'^2(z)[V(F(z)) - E] - \Delta V(z) \right) ds \right], \quad (3.37)$$

et la correction quantique  $\Delta V$  est donnée par

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

Dans notre cas, nous avons :

$$f(z) = (2a) \operatorname{arccot} h (2 \coth^2 z - 1), \quad (3.39)$$

ce qui donne :

$$f'(z) = \frac{2a}{\coth z}; \quad f''(z) = \frac{2a (\coth^2 z - 1)}{\coth^2 z}; \quad f'''(z) = \frac{4a [\coth^2 z - 1]}{\coth^3 z}, \quad (3.40)$$

La correction devient :

$$\Delta V(z) = \frac{\hbar^2}{8m} \left[ \frac{1}{\coth^2 z} + \frac{3}{\sinh^2 z} \right]. \quad (3.41)$$

Par ailleurs, la transformation (3.39) conduit à une nouvelle expression du potentiel

$$V_{MR}(f(z)) = -A (2 \coth^2 z - 1) + 2B (2 \coth^2 z - 2) \coth^2 z + C, \quad (3.42)$$

en multiplier par  $f'^2(z)$  :

$$\begin{aligned} f'^2(z) V_{MR}(f(z)) &= \frac{(2a)^2 (-A (2 \coth^2 z - 1) + 2B (2 \coth^2 z - 2) \coth^2 z + C)}{\coth^2 z} \\ &= \frac{(2a)^2 (-C - A)}{\cosh^2 z} + \frac{4B(2a)^2}{\sinh^2 z} - (-C + A) (2a)^2, \end{aligned} \quad (3.43)$$

il en résulte,

$$\begin{aligned}
f'^2(z)[V_{MR}(F(z)) - E] + \Delta V(z) &= \frac{2m(2a)^2(E - C - A) + (\frac{\hbar^2}{4})}{2m \cosh^2 z} \\
&+ \frac{8m B(2a)^2 + (\frac{3\hbar^2}{4})}{2m \sinh^2 z} \\
&- (E - C + A)(2a)^2. \tag{3.44}
\end{aligned}$$

En tenant compte de (3.44), le propagateur (3.37) devient

$$\begin{aligned}
\hat{K}_l(z_b, z_a; s_b) &= \exp[\frac{i}{\hbar} s_b (E - C + A)(2a)^2] \\
&\times \int Dz(s) \exp[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s_b} (\frac{m}{2} \dot{z}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} [\frac{\eta(\eta-1)}{\sinh^2 z} - \frac{\nu(\nu-1)}{\cosh^2 z}]) ds]. \tag{3.45}
\end{aligned}$$

$$\hat{K}_l(z_b, z_a; s_b) = \exp[\frac{i}{\hbar} s_b (E - C + A)(2a)^2] K_l^{MPT}(z_b, z_a; s_b), \tag{3.46}$$

avec

$$\eta = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1 + \frac{8m B(2a)^2}{\hbar^2}} \text{ et } \nu = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{-2m(2a)^2(E-C-A)}{\hbar^2}}.$$

Ce propagateur est similaire à celle du potentiel de Pöschl-Teller modifié. En fait, l'adaptation de la notion de Frank et Wolf[32], la solution de l'intégrale de parcours lit  $2s = \eta(\eta - 1)$ ,  $-2C = \nu(\nu - 1)$ , et en introduire les nombres  $K_1$ ,  $K_2$  qui sont définis en fonction de  $C$  et  $s$ .

On posant :

$$K_1 = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \left( \frac{1}{4} - 2C \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \tag{3.47}$$

$$K_2 = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \left( \frac{1}{4} + 2s \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \tag{3.48}$$

Le propagateur devient :

$$K_l^{MPT}(z_b, z_a; s_b) = \sum_{n=0}^{N_m} \exp(-i s_b E_n) \chi_{l,n}^{(K_1, K_2)}(z_b) \chi_{l,n}^{*(K_1, K_2)}(z_a), \tag{3.49}$$

### 3.6 Spectre d'énergie et fonctions d'ondes

En substituant (3.49) dans (3.46), nous trouvons :

$$K_l(z_b, z_a; s_b) = \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} s_b [(E - C + A)(2a)^2 - E_n^{MPT}] \right\} \times \chi_{l,n}^{(K_1, K_2)}(z_b) \chi_{l,n}^{*(K_1, K_2)}(z_a) \quad (3.50)$$

en intégrant sur les pseudo-temps "s", nous obtenons :

$$G_l(r_b, r_a; E) = \sum_{n=0}^{N_m} \frac{\chi_{l,n}^{MR(K_1, K_2)}(r_b) \chi_{l,n}^{MR*(K_1, K_2)}(r_a)}{E_{n,l}^{MR} - E}, \quad (3.51)$$

avec la valeur de  $K_1$  et  $K_2$  comme suit :

$$K_1 = \frac{1}{2} \left[ \left(1 + \frac{1}{2}(s + 2n + 1) + \frac{2m A(2a)^2}{\hbar^2(s + 2n + 1)}\right) \right], \quad (3.52)$$

$$K_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{8m B(2a)^2}{\hbar^2}}\right) = \frac{1}{2}(1 + s), \quad (3.53)$$

et en posant  $u = \frac{1}{2}[1 - \coth(\frac{r}{2a})]$ , nous obtenons la fonction d'onde suivant :

$$\begin{aligned} \chi_{l,n}^{MR(K_1, K_2)}(r) &= \frac{N_n^{(K_1, K_2)}}{\sqrt{2a}} (u - 1)^{(\frac{1}{2}) - K_1 + n} U^{K_1 - 1 - (\frac{1}{2})s - n} {}_2F_1 \times \left( -n, 2K_1 - n - 1; s + 1; \frac{1}{1 - u} \right) \\ &= \left[ \frac{(2K_1 - 1)n! \Gamma(2K_1 - n - 1)}{(2a)\Gamma(n + s + 1)\Gamma(2K_1 - s - n - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} (1 + \exp(-2r))^{K_1} \\ &\quad \times \exp \left\{ -2r \left[ K_1 - \left( \frac{1}{2} \right) s - n - 1 \right] \right\} \times P_n^{(2K_1 - 2n - s - 2, s)}(1 - 2 \exp(-2r)) \end{aligned} \quad (3.54)$$

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

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

$$\begin{aligned}
E_{n,l}^{MR} &= \frac{E_n^{MR}}{(2a)^2} - A + C = -\frac{\hbar^2}{2m(2a)^2} [2(K_1 - K_2 - n) - 1]^2 - A + C \\
&= -\left[ \frac{\hbar^2(s + 2n + 1)^2}{8m(2a)^2} + \frac{2mA^2(2a)^2}{\hbar^2(s + 2n + 1)^2} \right] + C
\end{aligned} \tag{3.55}$$

où  $s$  est donné par :  $s = \sqrt{1 + \frac{8mB(2a)^2}{\hbar^2}}$ .

Ce spectre est donné en fonction des paramètres du potentiel.

### 3.7 Discussion des résultats

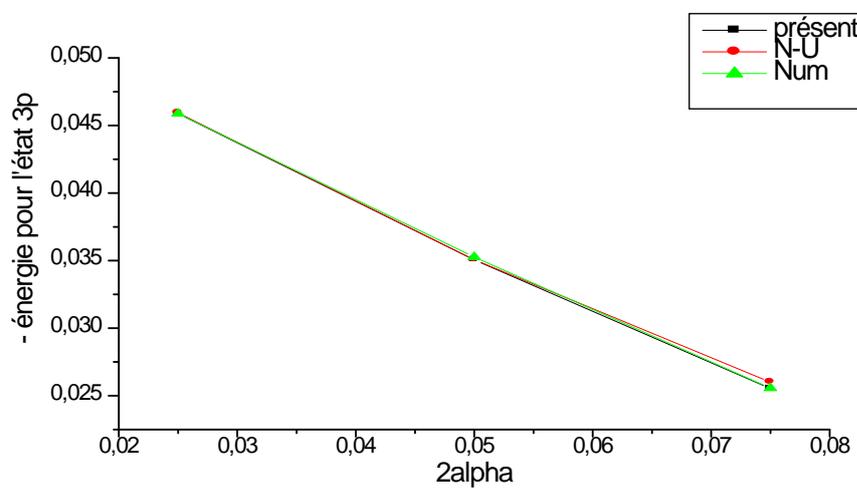
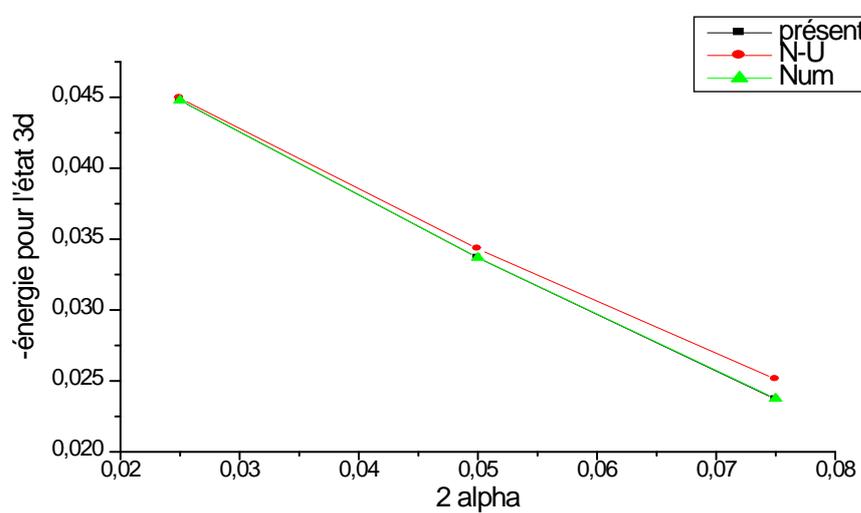
Afin de tester numériquement nos résultats pour le potentiel de Manning -Rosen, nous avons calculé en utilisant un programme Maple, le spectre d'énergie pour (3.55). Ces résultats sont consignés dans les deux tableaux ci-après et comparés avec ceux calculés numériquement : Num [24] et la méthode de (N-U) [23]. Nous constatons que nos résultats sont mieux que ceux calculés par la méthode de Nikiforov-Uvarov en utilisant la même approximation du terme centrifuge [30] si on les compare avec les résultats numériques.

		$\alpha' = 0.75$		
États	$2\alpha$	présent	N-U. [23]	Num.[24]
2p	0.025	0.1205272	0.1205793	0.1205271
	0.050	0.1082144	0.1084228	0.1082151
3p	0.025	0.0458776	0.0459297	0.0458779
	0.050	0.0350588	0.0350689	0.0352672
	0.075	0.0255422	0.0260110	0.0255654
3d	0.025	0.0447736	0.0449299	0.0447743
	0.050	0.0336832	0.0343082	0.0336930
	0.075	0.0237105	0.0251168	0.0237621
4p	0.025	0.0208087	0.0208608	0.0208097
	0.050	0.0117208	0.0119292	0.117365
	0.075	0.0050085	0.0054773	0.0050945
4d	0.025	0.0202992	0.0204555	0.0203017
	0.050	0.0109491	0.0115742	0.0109904
	0.075	0.0037984	0.0052047	0.0040331
4f	0.025	0.0199761	0.0202887	0.0199797
	0.050	0.0101783	0.0114284	0.0102393
	0.075	0.0022809	0.0050935	0.0026443
5p	0.025	0.0098055	0.0098576	0.0098079
5d	0.025	0.0095074	0.0096637	0.0095141
5f	0.025	0.0092711	0.0095837	0.0092825
5g	0.025	0.0090189	0.0095398	0.0090330
6p	0.025	0.0043530	0.0044051	0.0043583
6d	0.025	0.0041498	0.0043061	0.0041650
6f	0.025	0.0039527	0.0042652	0.0039803
6g	0.025	0.0037220	0.0042428	0.0037611

table1 :Les énergies des états liés  $-E_{n,l}$  en unités atomiques ( $\hbar = m = 1$ ), pour le potentiel de Manning-Rosen pour  $a' = 0.75$ , et différentes valeurs de  $2\alpha$  avec  $c_0 = 1/12$ ,  $c_1 = 1$ ,  $c_2 = 1$ .

### Représentation graphique

Nous Présentons dans ce qui suit les graphes tracés à partir des résultats des tableaux représentant la variation de l'énergie  $E_{n,l}$  en fonction du paramètre  $2\alpha$  et pour  $\alpha' = 0.75$ .

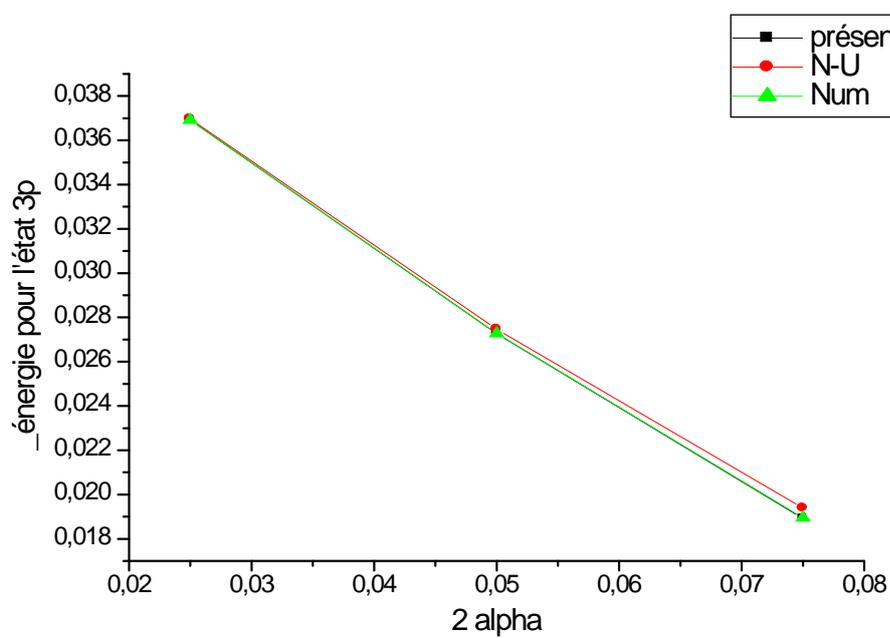
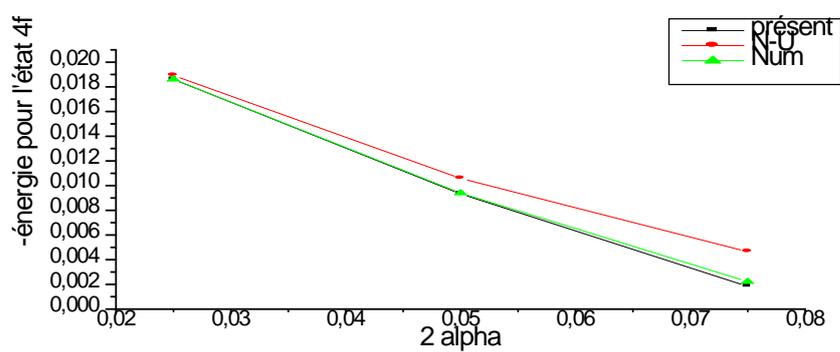
FIG 3.2 : l'état  $3p$  en fonction de  $2\alpha$ .FIG 3.3 : l'état  $3d$  en fonction de  $2\alpha$ .

		$\alpha' = 1.5$		
États	$2\alpha$	présent	N-U. [23]	Num. [24]
2p	0.025	0.0899708	0.0900229	0.0899708
	0.050	0.0800388	0.0802472	0.0800400
3p	0.025	0.0369130	0.0369651	0.0369134
	0.050	0.0272635	0.0274719	0.0272696
	0.075	0.0189162	0.0193850	0.0189474
3d	0.025	0.0394782	0.0396345	0.0394789
	0.050	0.0294379	0.0300629	0.0294496
	0.075	0.0204058	0.0218121	0.0204663
4p	0.025	0.0171728	0.0172249	0.0171740
	0.050	0.0088935	0.0091019	0.0089134
	0.075	0.0030790	0.0035478	0.0031884
4d	0.025	0.0182086	0.0183649	0.0182115
	0.050	0.0094697	0.0100947	0.0095167
	0.075	0.0028745	0.0042808	0.0031399
4f	0.025	0.0186097	0.0189223	0.0186137
	0.050	0.0093352	0.0105852	0.0094015
	0.075	0.0018402	0.0046527	0.0022307
5p	0.025	0.0080786	0.0081308	0.0080816
5d	0.025	0.0085339	0.0086902	0.0085415
5f	0.025	0.0086497	0.0089622	0.0086619
5g	0.025	0.0086001	0.0091210	0.0086150
6p	0.025	0.0034813	0.0035334	0.0034876
6d	0.025	0.0036646	0.0038209	0.0036813
6f	0.025	0.0036481	0.0039606	0.0036774
6g	0.025	0.0035213	0.0040422	0.0035623

table2 :Les énergies des états liés  $-E_{n,l}$  en unités atomiques ( $\hbar = m = 1$ ), pour le potentiel de Manning-Rosen pour  $a' = 1.5$  et différentes valeurs de ( $2\alpha$ ). ici  $c_0 = 1/12, c_1 = 1, c_2 = 1$ .

### Représentation graphique

Nous Présentons dans ce qui suit les graphes tracés à partir des résultats des tableaux représentant la variation de l'énergie  $E_{n,l}$  en fonction du paramètre  $2\alpha$  et pour  $\alpha' = 1.5$ .

FIG 3.4 : l'état  $3p$  en fonction de  $2\alpha$ FIG 3.5 : l'état  $4f$  en fonction de  $2\alpha$

# Conclusion

Nous avons déterminé, dans ce mémoire, et dans le cas du potentiel de Manning-Rosen, le spectre des énergies des états " $l$ " ainsi que les fonctions d'onde correspondantes. L'idée de base consiste à utiliser une approximation judicieuse pour le terme centrifuge ; celle-ci nous a permis de passer de la résolution d'un problème relatif aux états " $l$ " à celui de l'état " $s$ " ( $l = 0$ ).

Pour résoudre ce problème en utilise la méthode de Duru-Kleinert du formalisme des intégrales de chemin. Cette dernière nous a permis de passer du propagateur relatif au potentiel de Manning-Rosen, à celui de Pöschl-Teller modifié dont l'expression est connue.

Dans le but de montrer l'efficacité de cette approximation, nous avons calculé les énergies propres du potentiel de Manning-Rosen, pour différentes valeurs des nombres quantiques  $n$  et  $l$ . Nos résultats sont comparables aux énergies calculées numériquement et avec la méthode de N-U et sont en bon accord avec ceux obtenus numériquement. Et beaucoup mieux que ceux de la méthode de N-U. Nous pouvons conclure que l'approximation utilisée pour remplacer le terme centrifuge est une procédure alternative simple et bonne qui donne des valeurs propres d'énergie avec une précision raisonnable.

La présente approximation du terme centrifuge pourrait être une méthode utile et approprié pour d'autres potentiels de forme exponentielle. En fait, elle a le grand avantage de conduire à une expression analytique valable, qui dépend des paramètres potentiels.

# 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] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.
- [3] P. M. A. Dirac, The principles of quantum mechanics (Oxford Clarindon press,London, 1958).
- [4] W. Heisenberg, *Zeitsch. f. Phys.*, **33** (1925) 879; M. Born et P. Jordan, *Zeitsch. f. Phys.*, **34** (1925) 858; M. Born , W. Heisenberg et P. Jordan, *Zeitsch. f. Phys.*, **35** (1926) 557; P. M. A. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* **109** (1925) 642.
- [5] R. P. Feynman and Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (Mc Graw-Hill, (1965)).
- [6] D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, Path integral Methods and Their Applications ( World Sientific, Singapore, (1986)).
- [7] I. H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett* : **B 84** ((1979)) 185.
- [8] C. Groshe, F. Steiner, Handbook of Feynman path integral ( Springer ; (1998) ).
- [9] H. Kleinert , Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets ( World scientific, Singapore, (2004)).
- [10] Jean Zinn-Justin, Integrale de chemin en mécanique quantique : introduction (édition Paris (2003)).
- [11] W. Heisenberg, "Der Teil und das Ganze", Piper, Munich, (en) The Birth of Quantum Mechanics(1969) .

- 
- [12] P. A. Martin, Une initiation à l'intégrale fonctionnelle en physique quantique et statistique (Presses polytechniques, (1996)).
- [13] H. Rider. Quantum Field Theory (Cambridge University Press, (1988)).
- [14] F. Gimbert, Rapport de stage : Intégrale de chemin et Fentes d'young ; (Université Blaise Pascal (Juillet 2005)).
- [15] E. Pippa Storey, Thèse de Doctorat Ondes de matière dans des potentiels périodiques en temps : étude semi-classique, (Université Paris VI (1996)).
- [16] N. Boufflgha. Mémoire de Magister Les probabilités non commutatives et représentation probabiliste à la solution de l'équation de Schrödinger. (Université Féraht Abbas-Setif.(2013)).
- [17] S. Mameri, Thèse de Magister Quantification par l'intégrale de chemin d'un ensemble de potentiels déformés, (Université Mentouri-Constantine (2010)).
- [18] L. Chetouani and T. F. Hammann, *Nuo.Cim. Vol 98* (1986) BN1.
- [19] R. L. Greene and C. Aldrich, *Phys. Rev. A 14* (1976) 2363.
- [20] Y. P. Varshni, *Rev. Mod. Phys.* **29** (1957) 664.
- [21] O. Yesiltas, *Phys. Scr.* **75** (2006) 41.
- [22] L. Infeld, A. Schild, *Phys. Rev.* **67** (1945) 121.
- [23] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, Special Functions of Mathematical Physics (Birkhauser, Basel, (1988)).
- [24] W. Lucha et F. Schoberl *Int.J.Mod.Phys. C 10* (1999) 607.
- [25] A. Arai : Exactly Solvable Supersymmetric Quantum Mechanics.*J.Math. Anal. Appl.* **158** (1991) 63-79.
- [26] G F. Wei , C Y. Long and S H. Dong *Phys. Lett. A 372* (2008) 2592.
- [27] S M. Ikhdaïr and R. Sever *Ann. Phys . 17* (2008) 897.
- [28] W C. Qiang and S H. Dong *Phys. Lett. A 368* (2007) 13.
- [29] W C. Qiang , L. Kai and Wen Chen L, *J. Phys. A : Math. Theor.* **42** (2009) 205306.
- [30] S M. Ikhdaïr and R. Sever *Ann. Phys.* **18** (2009) 189.

- [31] M. Manning F *Phys.Rev.***44** (1933) 951, N.Rosen *Phys. Rev.* **43** (1933) 671.
- [32] C.Groshe *J.Phys. A. : Math. Gen.* **22**(1989)5073, A. Frank and K. Wolf *J. Math. Phys.***26**(1985)5.