

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

Université Djilali Bounaama-Khemis Miliana
Faculté des sciences et de la Technologie

Département : 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 :

**Représentation des intégrales de chemin pour
l'équation de Klein-Gordon**

Présenté par :

- KHELIFI Siham
- ZEFFANINE Marwa

Devant le jury composé de :

- Mr D. Benzaid M. C. B à Université Khemis Miliana Examineur 1
- Mr H. Boukabcha M. C. A à Université Khemis Miliana Encadreur
- Mlle K. Redaouia M. A. A à Université Khemis Miliana Examinatrice 2

Année Universitaire : 2019/2020

ملخص :

يهتم هذا العمل بدراسة معادلة الموجة النسبية، ولا سيما معادلة Klein-Gordon في إطار تكاملات المسار، من أجل كمون من النوع الاسي المشوه المكون من خمسة معاملات (DFPEP)، بكمونين شعاعي وسلمي متساويين، من خلال تطبيق تحويل الزمكان لـ Duru-Kleinert، وباستخدام تقريب مناسب لمصطلح الطرد المركزي، بالإضافة إلى استعمال أساليب رياضية لحلها ببساطة قدر الإمكان.

حول الناشر الخاص بمسألة كمون (DFPEP) إلى مسألة كمون Pöschl-Teller المبدل مما نتج عنه الحصول على طيف الطاقة المتقطع ودوال الموجة المنتظمة للحالات المترابطة ثم قارنا نتائجنا بنتائج أخرى موجودة سابقا.

كلمات مفتاحية :

تكامل المسار، معادلة Klein-Gorden، الناشر، دالة Green، التحويل الزمكاني لـ Duru-Kleinert، كمون DFPEP، كمون Pöschl-Teller المبدل، الحالات المرتبطة، دوال الموجة، طيف الطاقة.

Résumé:

Ce travail s'intéresse à l'étude de l'équation d'onde relativiste, en particulier, l'équation de Klein-Gordon dans le cadre des intégrales de chemin, pour le potentiel de type exponentiel à cinq paramètres déformés (DFPEP), à deux potentiels scalaires et vectoriels égaux, via la méthode de la transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert, et en utilisant une approximation appropriée du terme centrifuge, ainsi que des méthodes mathématiques sont également utilisées pour le résoudre le plus simplement possible.

Le propagateur associé au potentiel de type exponentiel à cinq paramètres déformés (DFPEP) réduit à celui du problème de Pöschl-Teller modifié dont les fonctions d'onde et le spectre d'énergie ont été déjà calculés, nos résultats sont discutés et comparés à ceux obtenus dans la littérature.

Mots clés :

Intégrale de chemin, équation de Klein-Gorden, propagateur, fonction de Green, transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert, potentiel DFPEP, potentiel de Pöschl-Teller modifié, les états liés, fonctions d'onde, spectre d'énergie.

Abstract:

This work is interested in the study of the relativistic wave equation, in particular, the Klein-Gordon equation in the framework of path integrals, for the deformed five-parameter exponential-type potential (DFPEP), with equal scalar and vector potentials, by applying the Duru-Klienert space-time transformation, and using appropriate approximation for the centrifugal term, as well as mathematical methods also used to solve it as more simply as possible.

The propagator associated to the five-parameter deformed exponential-type potential (DFPEP) reduced to that of the modified Pöschl-Teller problem whose wave functions and energy spectrum have already calculated, our results are discussed and compared to those obtained in the previous results.

Key Words:

Path integral, the Klein-Gorden equation, propagator, Green function, space-time transformation of Duru-Kleinert, DFPEP potential, modified Pöschl-Teller potential, bound states, wave functions, energy spectrum.

DÉDICACE

Je dédie du profond de mon cœur ce travail:

*À mon honneur, mon lien dans la vie, mon cher père **Mohamed KHELIFI**, aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous. Rien au monde ne vaut les efforts fournis jour et nuit pour mon éducation et mon bien être. Ce travail est le fruit de tes sacrifices que tu as consentis pour mon éducation et ma formation.*

*À la prunelle de mes yeux, la lumière de ma vie, mon précieux cadeau du Dieu, mon adorable mère "**K. B**" qui m'a soutenu et encouragé durant ces années d'études, qu'elle trouve ici le témoignage de ma profonde reconnaissance.*

À ma grand-mère, le symbole de la bonté, la source de tendresse, l'exemple du dévouement qui n'a pas cessé de m'encourager et de prier pour moi.

*À mes frères "**Abdelhak**" et "**Abdelmalek**", mes sœurs "**Imane**" et "**Inas**", qui ont été la source de ma force et mon encouragement.*

*À mon binôme "**Marwa**", ma belle amie qui a partagé ma fatigue et me lever tard, qui m'a aidé dans la rédaction de ce travail, qui est le fruit de nos années d'études.*

*À notre encadreur "**Dr. H. BOUKABCHA**" qui nous a aidés à terminer ce travail de la meilleure façon possible, qui nous a suivis tout au long de la préparation du mémoire et nous a guidé et conseillé*

*À mes amies "**Khalida**", "**Imane**", "**Alia**".*

À tous mes enseignants et mes collègues.

À toute ma famille, et tous ceux qui me connaissent de loin ou de près



Khelifi Siham

DÉDICACE

Je dédie ce modeste mémoire

A mon très cher père Bouzid

De tous les pères, tu as été le meilleur, tu as su m'entourer d'attention, m'inculquer les valeurs nobles de la vie, m'apprendre le sens du travail, de l'honnêteté et de la responsabilité. Merci d'avoir été toujours là pour moi, un grand soutien tout au long de mes études.

A ma très chère mère Houria

A la plus douce et la plus merveilleuse de toutes les mamans. Je te dédie à mon tour ce mémoire qui concrétise ton rêve le plus cher et qui n'est que le fruit de tes conseils et de tes encouragements. Tu n'as pas cessé de me soutenir et de m'encourager, ton amour, ta générosité exemplaire et ta présence constante ont fait de moi ce que je suis aujourd'hui.

Mes parents, *Puisse Dieu tout puissant vous protéger du mal, vous procurer longue vie, santé et bonheur afin que vous demeurez le flambeau illuminant mon chemin, J'espère que je puisse vous rendre un minimum de ce que je vous dois. Je vous aime.*

A mes chers frères Bilal et Amine pour leurs amours, leurs confiances et ses soutiens moraux afin de me remonter le moral.

A mes chères sœurs Houda et Malek qui je souhaite un avenir radieux plein de réussite, et surtout Houda, Je lui souhaite la réussite dans son baccalauréat. Ce travail soit pour vous un exemple à suivre et vous incite à mieux faire.

A ma chère sœur Meriem et son mari Abd Elkader pour leurs soutiens moraux et leurs conseils précieux afin de ne pas me surcharger dans mes études.

Aux chers enfants de ma sœur Mohamed Amine, Ritadj et katkouta NourElyakine, je leurs dis que je vous aime beaucoup.

A ma chère amie, mon binôme Siham pour son soutien moral, sa patience et sa compréhension tout au long de ce travail.

À mon promoteur Hocine Boukabcha pour votre bonté, votre modestie, votre compréhension, J'ai eu l'honneur d'être parmi vos étudiants et de bénéficier de votre riche enseignement.

À mes proches amies qui n'ont pas cessée de me conseiller, encourager et soutenir. Que Dieu les protège et leurs offre la chance et le bonheur.



Zeffanine Marwa

Alhamdulillah, par lequel les bonnes œuvres sont accomplies. Louange à Dieu, qui nous a éclairé le chemin de la science et de la connaissance.



Remerciement



*Il est d'usage d'adresser quelques remerciements dans un mémoire de fin d'études. C'est pourtant sans contrainte et en toute sincérité que nous souhaitons exprimer toute notre gratitude envers toute l'équipe de professeurs, de chargés d'enseignement qui a su maintenir notre désir d'étudier, malgré toutes les épreuves que nous avons rencontrées d'étudier la physique. Nous avons une pensée toute particulière à notre directeur de mémoire **M. BOUKABCHA Hocine**, merci pour vous nous avez honorés par votre confiance en nous confiant cet excellent sujet de travail. Nous vous remercions pour votre disponibilité malgré vos nombreuses préoccupations qui nous ont permis de toujours vous poser de nouvelles questions et ainsi d'avancer dans notre mémoire ainsi que pour votre présence chaque fois que nous avons besoin d'aide. Vous nous n'avez pas laissés confrontés à des difficultés pour réaliser ce travail, nous vous remercions pour les conseils fructueux que vous nous avez prodigués ont été très précieux. Nous n'oublierons jamais votre gentillesse, votre sympathie et votre amabilité, merci pour tout, Veuillez trouver ici, l'assurance de notre reconnaissance et notre profonde admiration.*

*Nous adressons aussi nos vifs remerciements aux membres des jurys **M BENZAID Djelloul** et **Melle REDAOUIA Keltoum** pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail.*

Nous voudrions aussi remercier tous les membres de notre famille et tous nos amis.

En fin, nous remercions toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce mémoire, qu'ils trouvent ici l'expression de notre profonde gratitude.

Table des matières

Introduction	3
1 Généralités sur les integrales de chemin et l'équation de Klein-Gordon	6
1.1 Introduction	6
1.2 L'expérience de Young	7
1.3 Idée de Feynman	7
1.4 L'action classique	9
1.5 Les integrales de chemin de Feynman dans l'espace-temps	10
1.6 Integrales de chemin dans l'espace des phases, par le produit de Lie Trotter .	12
1.7 Intégrale de chemin en coordonnées sphériques	14
1.8 Le propagateur et la fonction de Green en fonction de l'énergie et la fonction d'onde	20
1.9 L'équation de Klein-Gordon en coordonnées sphériques	21
2 Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert	24
2.1 Introduction	24
2.2 Concept de promoteur	25
2.3 La méthode de Duru-Kleinert	25
2.3.1 Transformation du propagateur	26
2.3.2 Exemples d'applications	32
3 Détermination du spectre d'énergie relative aux états "l" du potentiel de DFPEP via les intégrales de chemin de Feynman	35
3.1 Introduction	35
3.2 Le potentiel de DFPEP	36

3.2.1	Définition potentiel DFPEP	36
3.2.2	Quelques cas particuliers	36
3.3	L'intégrale de chemin pour le potentiel de DFPEP	37
3.4	Transformation des coordonnées d'espaces et du temps	41
3.5	Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes pour le potentiel de type expo- nentiel déformé à cinq paramètres	44
3.6	Résultats et discussions	47
Conclusion		53
4	Annexes	55
4.1	Annexe 1: L'expression du propagateur global discrète	55
4.2	Annexe 2: L'expression de la fonction d'onde du potentiel DFPEP	57

Introduction

La mécanique classique était décrite par les lois de Newton en 1686, et par les lois d'Hamilton en 1833, qui définissent les équations du mouvement à différentes forces, et elle était décrite aussi par les lois de Maxwell en 1865, qui décrivent l'évolution des champs électromagnétiques et les forces qu'ils exercent sur la matière. Ensuite, la théorie de la relativité d'Einstein (la relativité restreinte en 1905, puis la relativité générale en 1916), est considérée aussi comme une théorie de la mécanique classique, qui se propose un nouveau cadre théorique plus géométrique dans l'espace-temps pour formuler les équations de mouvement, et des champs électromagnétiques. À l'échelle macroscopique, ces lois classiques ont fait de grands progrès en expliquant plusieurs phénomènes physiques et naturels, mais contrairement à l'échelle microscopique ces lois ont montré ses limites, où elles n'ont pas pu expliquer certaines expériences physiques comme : l'effet photo-électrique, effet Compton. . . etc. Jusqu'à la découverte de la mécanique quantique au début du XX^{ème} siècle, le rôle de cette mécanique était de décrire le comportement et donner les lois d'évolution des constituants microscopiques (atomes, molécules, . . .) de la matière, se manifestent pour des objets de petite taille Δx , et/ou des petites impulsions Δp , tel que $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, nommé le principe d'incertitude. Le changement radical entre la mécanique quantique et la mécanique classique est que, en cette dernière; une particule est définie comme un objet ponctuelle décrit par un point (\vec{x}, \vec{p}) , alors que, la particule est définie comme un objet étendu décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{x})$, de sorte que les ondes aient une signification probabiliste en physique. D'autre part, afin de comprendre et d'expliquer les phénomènes quantiques, les chercheurs ont élaboré plusieurs formalismes mathématiques, on peut dire qu'Heisenberg était au bel endroit au bon moment, en 1925 il a développé la première formalisation mathématique de la mécanique quantique, parallèlement à Schrödinger qui le fait le sait du son côté, leurs approches mathématiques sont toutefois différentes, à celle de Schrödinger porte sur les calculs différentiel [1], bien que celle d'Heisenberg porte sur les calculs matriciels [2], les calculs de ses deux formalismes sont basés sur la notion d'hamiltonien. Ensuite,

en 1933; Dirac [3] a considéré que la formulation lagrangienne de la mécanique classique comme la plus utile que la formulation hamiltonienne, pour décrire un système physique. Richard Feynman [4] a également réussi à former un nouveau formalisme mathématique, qui est basé sur les résultats de Dirac, dans lequel il avait proposé que le propagateur de la mécanique quantique est proportionnel à $e^{\left(\frac{i}{\hbar}S\right)}$, où S est l'action classique du système. Feynman a introduit les intégrales de chemin en physique dans sa thèse soutenue en Mai 1942, qui ne sera publiée jusqu'en 1948, à cause de la guerre mondiale. L'idée de l'expérience de Feynman est venue du principe de superposition (expérience de Young), où il a remplacé la source lumineuse par un canon à électrons.

Malheureusement, les intégrations de chemin ont également rencontré des difficultés pour expliquer certains problèmes physiques, comme le problème de l'atome d'hydrogène, c'est ce qui a obligé les physiciens à formuler une nouvelle technique pour résoudre ce problème. En 1978 Ismail Hakki Duru et Hagen Kleinert ont introduit un formalisme mathématique, qui est appelé transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert [5]. Cette méthode a réussi à calculer le propagateur de Feynman associé au problème de l'atome d'hydrogène, ce succès a été considéré comme un moment décisif dans le développement des intégrales de chemin.

Le modèle de potentiel de type exponentiel à cinq paramètres ("DFPEP", deformed five-parameters exponential type potential), a été proposé en 2001 par Jia et al [6], il a été très utile dans de nombreux domaines de la physique et de la chimie et leurs différentes branches (la physique nucléaire, physique moléculaire, la chimie quantique, ...). Le potentiel de Hulthén, le potentiel Eckart, le potentiel de Manning-Rosen et autres potentiels de type exponentiel sont des fonctions potentielles bien connues (cas particuliers) de ce modèle.

Durant ces dernières années, les chercheurs ont fait des plusieurs efforts pour étudier les solutions des équations relativistes et non relativistes à la fois, avec différents modèles des potentiels physiques, pour les états l arbitraires ($l \neq 0$), car pour le cas $l=0$ les solutions sont bien définies [7]. Parmi ces équations, l'équation de Klein-Gordon, cette équation est une équation d'onde relativiste bien connue qui décrit les particules de spin zéro. Les recherches récentes sont intéressées à trouver les solutions exactes de cette équation avec des potentiels vecteur et scalaire du type exponentiel (potentiel de Hulthén, potentiel de Wood-Saxon,...), en utilisant des différentes méthodes (la méthode de Nikiforov-Uvarov, la méthode de SUSYQM,...). Les niveaux d'énergie et les valeurs propres de l'équation de Klein-Gordon ont été déterminés avec de simples potentiels, comme les potentiels harmoniques et coulombiens. Cependant, les solutions analytiques de l'équation de Klein-Gordon n'est possible

que dans le cas $l=0$ (les états s), pour certains potentiels bien connus [8], puisqu'il est impossible pour les états arbitraires $l \neq 0$, dans ce cas, des schémas d'approximation doivent être utilisés pour traiter le terme centrifuge $(\frac{1}{r^2})$.

Dans la présente étude, nous allons l'équation de Klein-Gordon pour le DFPEP, dans le cadre des intégrales de chemin en coordonnées sphériques, nous supposons que le potentiel scalaire et le potentiel vectoriel sont égaux. Jia et al ont étudié ce type de potentiel dans le cas non-relativiste, pour les états s et ont obtenu les résultats exacts en utilisant la mécanique quantique supersymétrique (SUSYQM) [9].

Le but de ce travail est d'utiliser le formalisme des intégrales de chemin en se servant de la méthode des transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert, pour obtenir les niveaux d'énergie approximatifs et la fonction d'onde correspondant des particules relativistes avec le potentiel DFPEP, en utilisant l'approche proposée par Mustafa [10], pour surmonter le problème terme centrifuge.

Ce mémoire, comporte trois chapitres:

Le premier chapitre représente des généralités sur le formalisme des intégrales de chemin de Feynman, et un rappelle succinct sur l'équation de Klein-Gordon. Premièrement, nous présentons comment Feynman a pu construire son propagateur, à partir de son expérience, qui est inspirée de celle de Young, et nous écrivons les concepts et les notions fondamentales des intégrales de parcours. Ensuite, nous définissons l'équation de Klein-Gordon en coordonnées sphériques, en présence d'un potentiel scalaire et d'un potentiel vecteur égaux, et nous la comparons avec l'équation de Schrödinger aux termes de potentiel effectif et d'énergie.

Le sujet principale dans *le deuxième chapitre* s'agit de la transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert, cela nous permet de passer d'un propagateur de forme compliquée, à une autre forme connue et maniable. D'abord nous définissons le concept de promotor, puis nous élaborons sur la méthode de Duru-Kleinert, nous terminons ce chapitre par des exemples d'application.

Le dernier chapitre, est consacré au traitement du problème de spectre d'énergie et la fonction d'onde relative aux états " l " dans l'équation de Klein-Gordon, pour le potentiel DFPEP, par l'utilisation de la méthode de Duru-Kleinert et nous utilisons une approximation pour le terme centrifuge. Finalement, nous discutons nos résultats numériques et les comparons avec les résultats obtenus par d'autres méthodes dans la littérature.

Et à la fin, nous finissons notre travail par une conclusion.

1

Généralités sur les intégrales de chemin et l'équation de Klein-Gordon

Dans ce chapitre on présente un rappel sur les notions des intégrales de chemin et sur l'équation de Klein-Gordon.

1.1 Introduction

La formulation intégrale du chemin de la mécanique quantique est une description de la théorie quantique qui généralise le principe d'action de la mécanique classique. Il remplace la notion classique d'une trajectoire classique unique et unique pour un système avec une somme ou intégrale fonctionnelle, sur une infinité de trajectoires quantiques possibles pour calculer une amplitude quantique.

Cette formulation s'est avérée cruciale pour le développement ultérieur de la physique théorique, car la covariance de Lorentz manifeste (les composantes temporelles et spatiales des quantités entrent de la même manière dans les équations) est plus facile à réaliser que dans le formalisme opérateur de la quantification canonique. Contrairement aux méthodes précédentes, l'intégrale du chemin permet de changer facilement les coordonnées entre des descriptions canoniques très différentes du même système quantique. Un autre avantage est qu'il est en pratique plus facile de deviner la forme correcte du lagrangien d'une théorie, qui entre naturellement dans les intégrales de chemin (pour les interactions d'un certain type, il s'agit de l'espace de coordonnées ou des intégrales de chemin de Feynman), que l'hamiltonien.

1.2 L'expérience de Young

Lorsque la lumière monochromatique, passant à travers deux fentes étroites, illumine un écran distant, un motif caractéristique de franges lumineuses et sombres est observé. Ce motif d'interférence résulte de la superposition d'ondes lumineuses interférentes issues des deux fentes. Des régions d'interférence constructive, correspondant à des franges lumineuses, sont produites lorsque la différence de chemin entre les deux fentes et la frange est un nombre entier de longueurs d'onde de la lumière, et les franges sombres sont produites lorsque la différence de chemin est un nombre d'interférence demi-entier de longueurs d'onde.

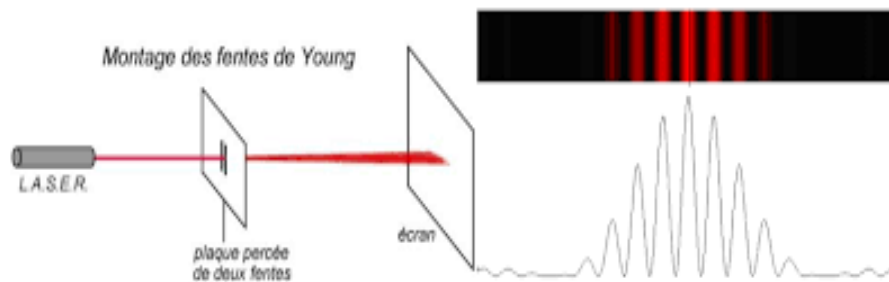


Figure 1.1 : Expérience de Young.

1.3 Idée de Feynman

Feynman a imaginé un dispositif expérimental dans lequel la source lumineuse a été remplacée par une source ponctuelle monoénergétique d'électrons (un canon d'électrons). Ces électrons sont captés par un détecteur placé à différentes positions x du centre de l'écran, dans les cas :

- Lorsque les deux fentes sont ouvertes.
- Lorsque l'une seulement est ouverte.

La figure suivante représente cette expérience et ses résultats :

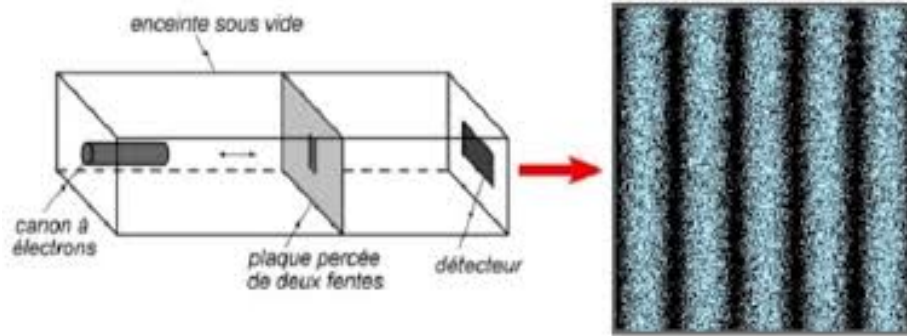


Figure 1.2 : Expérience de pensée de Feynman.

Feynman a introduit la notion d'amplitude de probabilité complexe $\Phi(x)$ où $P(x)$ n'est autre que son module au carré : $P(x) = |\Phi(x)|^2$

La probabilité pour que l'électron tombe sur l'écran est donné par:

- Lorsque la fente 1 est ouverte

$$P_1(x) = |\Phi_1(x)|^2 . \quad (1.1)$$

- Lorsque la fente 2 est ouverte

$$P_2(x) = |\Phi_2(x)|^2 . \quad (1.2)$$

- Lorsque les deux fentes sont ouvertes, l'amplitude de probabilité pour que l'électron tombe sur l'écran est donné par la somme des deux amplitudes:

$$\Phi(x) = \Phi_1(x) + \Phi_2(x) , \quad (1.3)$$

donc:

$$P(x) = |\Phi(x)|^2 = |\Phi_1(x) + \Phi_2(x)|^2 = |\Phi_1(x)|^2 + |\Phi_2(x)|^2 + 2\Phi_1\Phi_2 , \quad (1.4)$$

d'après ces résultats on remarque que P n'est égale pas à la somme directe des probabilités correspondant aux deux chemins directs

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x) . \quad (1.5)$$

Cette figure représente la différence entre les probabilités $P_1(x)$, $P_2(x)$ et $P(x)$:

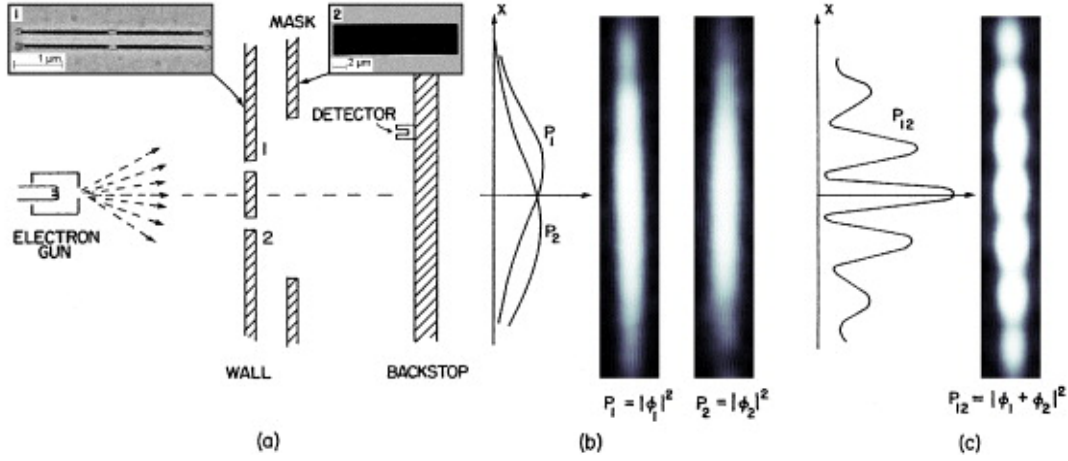


Figure 1.3 : Les probabilités $P_1(x)$, $P_2(x)$ et $P(x)$ pour que des particules soient détectées a la position x .

1.4 L'action classique

En physique théorique, l'action est une grandeur physique caractérisant globalement l'état d'un système et son évolution, c'est une grandeur fonctionnelle .

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt . \quad (1.6)$$

Typiquement, l'action se présente comme l'intégrale par rapport au temps initial et le temps d'observation du système d'une quantité L appelée le lagrangien de ce système qui est la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle.

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t) , \quad (1.7)$$

en remplaçant de l'équation (1.7) dans l'équation (1.6), on obtient:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x, t) \right] dt . \quad (1.8)$$

La variation de l'action se donne sous la forme suivante :

$$\delta S = S(x + \delta x) - S(x) = 0 . \quad (1.9)$$

Le développement au premier ordre en δx , est :

$$\begin{aligned}
 S(x + \delta x) &= \int_{t_1}^{t_2} L(x + \delta x, \dot{x} + \delta \dot{x}, t) dt \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} \left(L(x, \dot{x}, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} \left(L(x, \dot{x}, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt \\
 &= S(x) + \int_{t_1}^{t_2} \left(\delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt, \tag{1.10}
 \end{aligned}$$

l'équation (1.10) est l'action qui est utilisée pour établir les bases de la mécanique quantique dans la formulation de Feynman en intégrale de chemin.

1.5 Les integrales de chemin de Feynman dans l'espace-temps

Le propagateur K est l'amplitude de probabilité total pour une particule qui passe d'un point espace-temps (x_a, t_a) à un autre (x_b, t_b) , il est la somme des amplitudes Φ correspondant à tous les chemins possibles.

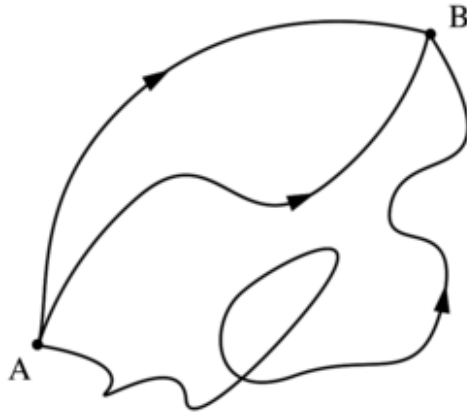


Figure 1.4 : Les chemins possibles entre deux points.

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\text{sur tous les chemins possibles}} \Phi[x(t)]. \tag{1.11}$$

Le propagateur s'écrit en fonction de l'opérateur évolution dans le temps comme [14]

:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \begin{cases} \langle x_b | u(t_b, t_a) | x_a \rangle & \text{pour } t_b > t_a \\ 0 & \text{pour } t_b < t_a \end{cases}, \tag{1.12}$$

où $u(t_b, t_a)$ est l'opérateur évolution dans le temps qui s'écrit comme:

$$u(t_b, t_a) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_b-t_a)}. \quad (1.13)$$

Si l'hamiltonien est indépendant du temps, on a alors :

$$|\Psi(t_b)\rangle = u(t_b, t_a) |\Psi(t_a)\rangle, \quad (1.14)$$

en projetant sur un état $|x_b\rangle$, on obtient:

$$\langle x_b | \Psi(t_b) \rangle = \langle x_b | u(t_b, t_a) | \Psi(t_a) \rangle, \quad (1.15)$$

la relation de fermeture des états position s'écrit:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |x_a\rangle \langle x_a| dx_a. \quad (1.16)$$

Nous insérons l'équation (1.16) dans l'équation (1.15), on obtient:

$$\langle x_b | \Psi(t_b) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_a \langle x_b | u(t_b, t_a) | x_a \rangle \langle x_a | \Psi(t_a) \rangle. \quad (1.17)$$

Le propagateur (1.12) de Feynman s'écrit aussi comme:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | \left[\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t_b - t_a)\right) \right] | x_a \rangle. \quad (1.18)$$

L'équation (1.17) devient:

$$\Psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a. \quad (1.19)$$

En subdivisant l'intervalle de temps $[t_a, t_b]$ en $(N + 1)$ intervalles infinitésimaux égaux tels que:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \text{ou} \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \int \dots \int K(x_{N+1}, x_N, \varepsilon) \prod_{j=1}^N K(x_j, x_{j-1}, \varepsilon) dx_j. \quad (1.20)$$

cette expression est l'expression du propagateur globale (voir l'annexe N°1).

La forme condensée du propagateur s'écrit comme:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int D[x(t)] \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_N[x(t)]\right], \quad (1.21)$$

où le symbole $D[x(t)]$ est la mesure différentielle relative à tous les chemins $x(t)$, ce qui est donnée par:

$$D[x(t)] = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \left[\frac{m}{2i\pi \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (1.22)$$

et $S_N[x(t)]$ est l'action qui s'écrit comme:

$$S_N(x(t)) = \sum_{j=1}^{N+1} S_j = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 - \varepsilon V(x_j) \right], \quad (1.23)$$

avec $x_b = x_{N+1}$, $t_b = t_{N+1}$, $x_a = x_0$, $t_a = t_0$ et $\Delta x_j = x_j - x_{j-1}$,
 $\varepsilon = t_j - t_{j-1} = \frac{T}{N+1}$, $T = t_b - t_a$

1.6 Integrales de chemin dans l'espace des phases, par le produit de Lie Trotter

L'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $u(t_b, t_a)$ entre deux états $|x\rangle$ et $|x_0\rangle$ est le propagateur de Feynman s'écrit comme:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | \exp \left(\frac{-iT}{\hbar} H \right) | x_0 \rangle , \quad (1.24)$$

où $T = t - t_0$, et l'opérateur Hamiltonien \hat{H} est donné par:

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + V(x) . \quad (1.25)$$

L'opérateur d'évolution peut-être écrit, d'après la formule de Lie Trotter [11], sous la forme suivante:

$$\exp \left(-\frac{iT}{\hbar} \left[\frac{P^2}{2m} + V(x) \right] \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \exp \left(-\frac{iTP^2}{2m\hbar N} \right) \exp \left(-\frac{iTV(x)}{\hbar N} \right) \right\}^N , \quad (1.26)$$

l'équation (1.26) devient:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left\{ \exp \left(-\frac{iTP^2}{2m\hbar N} \right) \exp \left(-\frac{iTV(x)}{\hbar N} \right) \right\}^N | x_0 \rangle . \quad (1.27)$$

En injectant $(N - 1)$ fois la relation de fermeture $\int_{-\infty}^{+\infty} |x_j\rangle \langle x_j| = 1$ entre les N opérateurs partiels, l'équation (1.27) devient:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^N \exp\left(-\frac{iT}{\hbar N} V(x_j)\right) \langle x_j | \exp\left(-\frac{iT P^2}{2m\hbar N}\right) | x_{j-1} \rangle \prod_{j=1}^{N-1} dx_j . \quad (1.28)$$

L'injection de la relation de fermeture de l'espace des impulsions nous permet de calculer facilement l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique:

$$\langle x_j | \exp\left(-\frac{iT}{2\hbar m N} P^2\right) | x_{j-1} \rangle = \int \langle x_j | \exp\left(-\frac{iT}{2\hbar m N} P^2\right) | P_j \rangle \langle P_j | x_{j-1} \rangle dP_j . \quad (1.29)$$

L'action de l'opérateur P sur les kets $| P_j \rangle$, conduit à:

$$\langle x_j | \exp\left(-\frac{iT}{2\hbar m N} P^2\right) | x_{j-1} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{T}{2m\hbar N} P_j^2\right) - P_j (x_j - x_{j-1}) \right]\right\} dP_j . \quad (1.30)$$

L'intégration sur la variable P_j donne:

$$\langle x_j | \exp\left(-\frac{iT}{2\hbar m N} P^2\right) | x_{j-1} \rangle = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2\right) . \quad (1.31)$$

En remplaçant l'équation (1.31) dans (1.28), on obtient:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{N}{2}} \int \cdots \int \prod_{j=1}^N \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j)\right]\right\} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j . \quad (1.32)$$

On a la relation suivante:

$$\prod_{j=1}^k \exp(\omega_j) = \exp\left(\sum_{j=1}^k \omega_j\right), \quad (1.33)$$

d'après l'équation (1.33), l'équation (1.32) devient:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{N}{2}} \times \int \cdots \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j)\right)\right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j . \quad (1.34)$$

Cette équation représente l'expression du propagateur sous sa forme lagrangienne standard. Parfois, il est avantageux de travailler avec des propagateurs contenant l'hamiltonien H au lieu du lagrangien, pour calculer le propagateur dans ce cas, nous remplaçons le terme $\langle x_j | \exp(\frac{-iT P^2}{2m\hbar N}) | x_{j-1} \rangle$ par son expression (1.30), on obtient:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^N \int \cdots \int \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[P_j(x_j - x_{j-1}) - \varepsilon \left(\frac{P_j^2}{2m} + V(x_j) \right) \right] \right) \times \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^N dP_j. \quad (1.35)$$

Il apparait dans l'expression ci-dessus l'hamiltonien partiel $H_j = \frac{P_j^2}{2m} + V(x_j)$ et le produit $P_j \dot{x}_j$ l'intégration ce fait dans ce cas sur l'espace des phases (x_j et P_j), nous obtenons l'expression du propagateur de Feynman:

$$K(x, t; x_0, t_0) = \int \cdots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [P\dot{x} - H(x, P) dt] \right\} D(x(t)) D(p(t)). \quad (1.36)$$

1.7 Intégrale de chemin en coordonnées sphériques

Dans la mécanique quantique, la symétrie rotationnelle est très importante pour trouver les fonctions d'ondes et les énergies correspondant des systèmes physiques. Les coordonnées sphériques transforment à partir de l'équation de Schrödinger d'une symétrie rotationnelle, alors, nous pouvons séparer cette équation à une partie angulaire exprimée en terme des harmoniques sphériques leurs solutions sont connues, et une partie radial qui contient des informations spéciales sur les systèmes dynamiques.

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

La relation suivante représente la formule du propagateur à trois dimensions [12]:

$$K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) = \int_{\vec{r}_a}^{\vec{r}_b} D\vec{r}(t) \exp \int \frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} (\Delta r_j)^2 - V(\vec{r}) \right) dt = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^N \int_{R^3} d\vec{r}_j \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_N \right], \quad (1.37)$$

avec

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

et l'action totale:

$$S_N = \sum_{j=1}^{N+1} S_j = \sum_{j=1}^{N+1} \frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2\vec{r}_j \cdot \vec{r}_{j-1}) - \varepsilon V(\vec{r}_j). \quad (1.38)$$

En utilisant le système des coordonnées sphériques (r, θ, φ) défini comme:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases}, \quad (1.39)$$

avec $r > 0$; $0 \leq \theta < \pi$ et $0 \leq \varphi < 2\pi$.

Tel que l'élément de volume s'écrit en coordonnées sphériques comme:

$$d\vec{r}_j = r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j, \quad (1.40)$$

le propagateur (1.37) peut être réécrite en coordonnées sphériques comme:

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j\right) \right], \end{aligned} \quad (1.41)$$

l'action élémentaire est:

$$S_j = \frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} \cos \Theta_{j,j-1}) - \varepsilon V(r_j), \quad (1.42)$$

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

avec l'angle entre deux vecteurs en coordonnées sphériques est:

$$\cos \Theta_{j,j-1} = \cos \theta_j \cos \theta_{j-1} + \sin \theta_j \sin \theta_{j-1} \cos(\varphi_j - \varphi_{j-1}), \quad (1.43)$$

et la mesure prend cette forme:

$$\prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{1}{\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m}} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^N d\vec{r} = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right]. \quad (1.44)$$

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

Pour une évolution explicite de la partie angulaire du propagateur, nous allons utiliser la formule suivante:

$$\begin{aligned} \exp(iz \cos \varphi) &= 2^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \sum_{k=0}^{+\infty} \left(k + \frac{1}{2}\right) i^k (z)^{-\frac{1}{2}} J_{k+\frac{1}{2}}(z) P_k(\cos \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \sum_{k=0}^{+\infty} (2k+1) i^k J_{k+\frac{1}{2}}(z) P_k(\cos \varphi). \end{aligned} \quad (1.45)$$

$J_n(x)$ est la fonction de Bessel, qui est donnée par:

$$J_n(x) = \sum_{P=0}^{+\infty} \frac{(-1)^P}{P!(n+P)!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2P+n}, \quad (1.46)$$

si

$$x = -U, \quad (1.47)$$

alors:

$$\begin{aligned} J_n(-U) &= \sum_{P=0}^{+\infty} \frac{(-1)^P}{P!(n+P)!} \left(\frac{-U}{2}\right)^{2P+n} \\ &= \sum_{P=0}^{+\infty} \frac{(-1)^P}{P!(n+P)!} \left(\frac{U}{2}\right)^{2P+n} (-1)^n. \end{aligned} \quad (1.48)$$

on a :

$$J_n(ix) = i^n I_n, \quad (1.49)$$

où I_n est la fonction de Bessel modifiée.

On pose :

$$y = iz, \quad (1.50)$$

d'après (1.48) et (1.49), on déduit que:

$$\begin{aligned} e^{y \cos \varphi} &= \sqrt{\frac{-\pi}{2iy}} \sum_{K=0}^{+\infty} (2k+1) i^k J_{k+\frac{1}{2}} P_k(\cos \varphi) \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2iy}} \sum_{K=0}^{+\infty} (2k+1) i^k (-1)^{k+\frac{1}{2}} J_{k+\frac{1}{2}}(iy) P_k(\cos \varphi) \\ &= (-1)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2iy}} \sum_{K=0}^{+\infty} (2k+1) i^k (-1)^{k+\frac{1}{2}} (i)^{k+\frac{1}{2}} I_{k+\frac{1}{2}}(y) P_k(\cos \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2y}} \sum_{K=0}^{+\infty} (2k+1) I_{k+\frac{1}{2}}(y) P_k(\cos \varphi), \end{aligned} \quad (1.51)$$

où $P_k(\cos \varphi)$ sont les polynômes de Legendre.

On arrive à l'expression de propagateur suivante, le remplacement de la formule (1.51) dans (1.41):

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}} \prod_{i=1}^N \left[\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\ &\quad \times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right] \right] \\ &\quad \times \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2mr_j r_{j-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l \dots l_{N+1}=0}^{+\infty} (2l_j + 1) \\ &\quad \times I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_l(\cos \Theta_{j,j-1}), \end{aligned} \quad (1.52)$$

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

où encore:

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \sum_{l \dots l_{N+1}=0}^{+\infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j^2 dr_j \right] \\
 &\times \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_j}(\cos \Theta_{j,j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\
 &\times \left[(2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left(\frac{mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_{N+1}}(\cos \theta_{j,j-1}) \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right] \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2mr_j r_{j-1}} \right)^{\frac{1}{2}}, \tag{1.53}
 \end{aligned}$$

on peut utiliser l'expression suivante:

$$\prod_{j=1}^N r_j = \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \prod_{j=1}^{N+1} (r_j r_{j-1})^{\frac{1}{2}}, \tag{1.54}$$

en substituant la relation (1.54) dans (1.53), on obtient:

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{(N+1)} \left(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \right) \sum_{l \dots l_{N+1}=0}^{+\infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{+\infty} r_j dr_j \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_j}(\cos \Theta_{j,j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \right] \\
 &\times \left[(2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left(\frac{mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) P_{l_{N+1}}(\cos \Theta_{j,j-1}) \right]. \tag{1.55}
 \end{aligned}$$

Les polynômes de Legendre peuvent être décomposés vers les harmoniques sphériques:

$$P_l(\cos \theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) \sum_{m=-l} Y_{l,m}(\theta_N, \varphi_N) Y_{l,m}^*(\theta_{N-1}, \varphi_{N-1}), \tag{1.56}$$

où:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)}{4\pi} \times \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right] P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi), \tag{1.57}$$

la formule (1.51), devient:

$$e^{y \cos \varphi} = 2\pi \sqrt{\frac{2\pi}{y}} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) I_{l+\frac{1}{2}}(y) \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_N, \varphi_N) Y_{l,m}^*(\theta_{N-1}, \varphi_{N-1}), \quad (1.58)$$

En insérant cette dernière formule dans l'expression de propagateur (1.53), on trouve:

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i\hbar\varepsilon} \right)^{(N+1)} \left(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \right) \sum_{l \dots l_{N+1}=0}^{+\infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j dr_j \right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right] \\ &\times \prod_{j=1}^N \left[I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{m r_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) I_{l_{N+1}+\frac{1}{2}} \left(\frac{m r_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \right] \\ &\times \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l_j, m_j}(\theta_j, \varphi_j) Y_{l_j, m_j}^*(\theta_{j-1}, \varphi_{j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\varphi_j \\ &\times \sum_{m=-l}^l Y_{l_{N+1}, m}(\theta_{N+1}, \varphi_{N+1}) Y_{l_{N+1}, m}^*(\theta_N, \varphi_N). \end{aligned} \quad (1.59)$$

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

$$\int_0^\pi d\varphi \int_0^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}, \quad (1.60)$$

donc on trouve l'expression du propagateur suivante:

$$K(\vec{r}_b, t_b; \vec{r}_a, t_a) = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) P_l(\cos \Theta_{a,b}), \quad (1.61)$$

où le propagateur radial $K_l(r_b, t_b; r_a, t_a)$ s'exprime également comme:

$$\begin{aligned} K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i\hbar\varepsilon} \right)^{(N+1)} \left(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j dr_j \right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{m r_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon} \right) \right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right\} \right] \right], \end{aligned} \quad (1.62)$$

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

$$I_j\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\varepsilon}{2\pi z}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{z}{\varepsilon} - \frac{1}{2}\frac{\varepsilon}{z}\left(v^2 - \frac{1}{4}\right)\right\}, \quad (1.63)$$

$$I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{\frac{mr_j r_{j-1}}{i\hbar}}{\varepsilon}\right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\varepsilon i\hbar}{2\pi m r_j r_{j-1}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{mr_j r_{j-1}}{\varepsilon i\hbar} - \left(\frac{\varepsilon i\hbar}{2m r_j r_{j-1}}\right) (l(l+1))\right\}, \quad (1.64)$$

on arrive alors à la formulation du propagateur radial en coordonnées sphériques et en fonction du potentiel effectif $V_{eff}(r_j)$:

$$\begin{aligned} K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \left(\frac{1}{r_b r_a}\right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{(N+1)}{2}} \times \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty dr_j \right] \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - \varepsilon V(r_j) - \frac{l(l+1)\hbar^2 \varepsilon}{2m r_j r_{j-1}} \right\}\right\}, \end{aligned} \quad (1.65)$$

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

$$V_{eff}(r_j) = V(r_j) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r_j r_{j-1}}, \quad (1.66)$$

donc le propagateur (1.65), devient:

$$\begin{aligned} K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) &= \left(\frac{1}{r_b r_a}\right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{(N+1)}{2}} \times \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty dr_j \right] \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - \varepsilon V_{eff}(r_j) \right\}\right\}. \end{aligned} \quad (1.67)$$

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

Nous introduisons des propagateurs en fonction de l'énergie et la fonction d'onde, qui nous permettent d'étudier la fonction d'onde finale de la particule, et son spectre d'énergie à la fois [13].

Le propagateur en fonction de l'opérateur d'évolution s'écrit comme :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b, t_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | x_a, t_a \rangle, \quad (1.68)$$

on a:

$$\sum_{l,n}^{\infty} |l, n\rangle \langle l, n| = 1, \quad (1.69)$$

en insérant la relation de fermeture (1.69) dans (1.68), on obtient:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{l,n}^{\infty} \langle x_b, t_b | \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right) | l, n \rangle \langle l, n | x_a, t_a \rangle, \quad (1.70)$$

où:

$$\langle x, t | l, n \rangle = \Psi_{n,l}(x, t), \quad (1.71)$$

alors le propagateur (1.70) devient:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{l,n}^{\infty} \Psi_{n,l}(x_b, t_b) \Psi_{n,l}^*(x_a, t_a) \exp\left(-\frac{iHT}{\hbar}\right). \quad (1.72)$$

La fonction de Green est la transformée de Fourier du propagateur [15]:

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dT \exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right) K(x_b, x_a, T), \quad (1.73)$$

où $T = t_b - t_a$,

en remplaçant l'expression du propagateur (1.72) dans l'équation (1.73), on trouve:

$$G(x_b, x_a; E) = \sum_n \frac{\Psi_n^*(x_b) \Psi(x_a)}{E - E_n}. \quad (1.74)$$

1.9 L'équation de Klein-Gordon en coordonnées sphériques

L'équation de Klein-Gordon est l'équivalent relativiste de l'équation de Schrödinger qui décrivent les particules de spin nul, ayant des vitesses relativiste ($v = c$) [21, 22].

Dans la mécanique quantique relativiste, la solution analytique de l'équation de Klein-Gordon joue un rôle très important dans la physique théorique, cette équation relativiste contient deux potentiels, l'un scalaire $S(r)$ et l'autre vectoriel $V(r)$. L'équation de Klein-Gordon pour un potentiel à symétrie sphérique à trois dimensions s'écrit sous la forme suivante [16, 17, 18] :

$$[\hbar^2 c^2 \nabla^2 + (V(r) - E_{n,l})^2 - (S(r) + M)^2] \Psi(r, \theta, \varphi) = 0, \quad (1.75)$$

où E est l'énergie, M est la masse de la particule et ∇^2 est l'opérateur de Laplace s'écrit en coordonnées sphériques comme:

$$\nabla^2 = \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (1.76)$$

L'expression du carré du moment cinétique orbital \vec{L}^2 en coordonnées sphériques est donnée par :

$$\vec{L}^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (1.77)$$

Laplacien peut se mettre sous la forme:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\vec{L}^2}{r^2}, \quad (1.78)$$

d'autre part on a:

$$\vec{L}^2 \Psi = l(l+1) \hbar^2 \Psi, \quad (1.79)$$

donc, l'équation de Klein-Gordon en coordonnées sphériques devient comme suite:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\vec{L}^2}{r^2} - \frac{1}{\hbar^2 c^2} [2 \{ E_{n,l} V(r) + M c^2 S(r) \} + V^2(r) - S^2(r) + E_{n,l}^2 - M^2 c^4] \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = 0, \quad (1.80)$$

lorsque $V(r)=S(r)$, l'équation (1.80) devient:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\vec{L}^2}{r^2} + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \{ (E_{n,l}^2 - M^2 c^4) - 2 (E_{n,l} + M c^2) V(r) \} \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = 0,$$

où la fonction d'onde totale en coordonnées sphériques s'écrit:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{R(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (1.81)$$

tels que $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ et $R(r)$ représentent les harmoniques sphériques et la fonction d'onde radiale respectivement.

La partie radial de l'équation (1.80) séparée en variables [38], devient:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \left[E_{n,l}^2 - M^2 c^4 - 2(E_{n,l} + M c^2) V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2 c^2}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad (1.82)$$

par ailleurs, l'équation de Schrödinger s'écrit comme:

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2M}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0, \quad (1.83)$$

L'équation radial de Klein-Gordan s'écrit aussi comme:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2M c^2}{\hbar^2 c^2} \left[\frac{E_{n,l}^2 - M^2 c^4}{2M c^2} - \frac{(E_{n,l} + M c^2)}{M c^2} V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2 c^2}{2M c^2 r^2} \right] R(r) = 0, \quad (1.84)$$

par comparaison entre les équations radiales de Klein-Gordon (1.82) et de Schrödinger (1.83), on a:

$$E = \frac{E_{n,l}^2 - M^2 c^4}{2M c^2}, \quad (1.85)$$

et

$$V_{eff} = \frac{(E_{n,l} + M c^2)}{M c^2} V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2M r^2}. \quad (1.86)$$

2

Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert

Dans ce chapitre on va introduire la notion du 'promoteur', puis on va développer la méthode de Duru-Kleinert, dans le cadre du formalisme des intégrales de chemin.

2.1 Introduction

L'application du formalisme des intégrales de chemin de Feynman a obtenu un succès dans certains problèmes physiques, comme le problème de la particule libre et le problème de l'oscillateur harmonique, où ce formalisme a réussi à calculer leurs propagateurs. Cependant il reste coincé lorsqu'il est appliqué sur l'atome d'hydrogène, il a rencontré des difficultés pour calculer leur propagateur. Afin de résoudre le problème de l'atome d'hydrogène Duru et Kleinert [5], ont appliqué pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stiefel (KS) pour le potentiel de coulomb [19], puis ils réussis à éliminer le problème de l'atome d'hydrogène, lorsqu'ils ont utilisé deux transformations principales, une transformation spatiale suivie d'une transformation temporelle, il y a deux types de cette dernière qui sont:

- Une transformation globale: qui transforme le paramètre temps t en un nouveau paramètre pseudo-temps τ , donnée par:

$$t \longrightarrow g(\tau) \longrightarrow \tau = g^{-1}(t),$$

- Une transformation locale: qui dépend de la position.

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

où $f[q(t)]$ est une fonction connue.

2.2 Concept de promotor

La fonction de Green n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur. On peut obtenir le spectre d'énergie à partir des pôles et des fonctions d'onde à partir des résidus aux pôles de cette fonction, l'expression de la fonction de Green est donnée par:

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty e^{\frac{iET}{\hbar}} K(x_b, x_a; T) dT, \quad (2.1)$$

on peut écrire cette équation comme:

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty P(x_b, x_a; T) dT, \quad (2.2)$$

où l'expression de promotor $P(x_b, x_a; T)$ est :

$$P(x_b, x_a; T) = e^{\frac{iET}{\hbar}} K(x_b, x_a; T), \quad (2.3)$$

l'équation (2.3) de promotor, sous sa forme intégrale s'écrit comme:

$$P(x_b, x_a; T) = \int_0^\infty e^{\frac{i\omega}{\hbar}} D \vec{x}(t), \quad (2.4)$$

où

$$\omega = \int L dt + T E, \quad (2.5)$$

avec $T = t_b - t_a$.

2.3 La méthode de Duru-Kleinert

La transformation Duru-Kleinert est une méthode mathématique nommée d'après Ismail Hakki Duru et Hagen Kleinert, qui nous permet de traiter le problème des intégrales de chemin des systèmes physiques à potentiels singuliers. Cette transformation remplace l'intégrale divergent du chemin tranché dans le temps de Richard Feynman (qui n'existe donc pas) par une autre, convergent bien défini [5].

2.3.1 Transformation du propagateur

À cause de la singularité du potentiel, le propagateur discrète est parfois mal définie dans certains problèmes quantiques, la méthode spatio-temporelle de Duru-Kleinert nous a aidé à surmonter la difficulté, nous pouvons alors passer d'une forme de propagateur difficile à calculer à une forme de propagateur qui a déjà été calculée. Cette technique repose sur une transformation de coordonnée $x \longrightarrow q$ suivie d'une transformation temporelle $t \longrightarrow \tau$.

Considérons le cas à une dimension ($D = 1$), le propagateur relatif à un potentiel $V(x)$ donné comme:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \cdots \int D[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L dt\right), \quad (2.6)$$

où

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (2.7)$$

La forme discrète du propagateur (2.6) donnée par:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \int \cdots \int \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S_j\right] \prod_{j=1}^{N-1} dx_j, \quad (2.8)$$

avec

$$S_j = \frac{m}{2\varepsilon} (x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j). \quad (2.9)$$

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les outils indispensables dans les techniques intégrales de chemin sont les règles de transformation. Considérons le propagateur de Feynman (2.8), et nous effectuons les transformations suivantes.

Transformation de coordonnées

Posons:

$$x = f(q), \quad (2.10)$$

on a :

$$\Delta x_j = x_j - x_{j-1}, \quad (2.11)$$

où

$$\begin{cases} x_j = f(q_j) \\ x_{j-1} = f(q_{j-1}) \end{cases}, \quad (2.12)$$

nous utilisons la notion du "mid-point":

$$\tilde{q}_j = \frac{q_j + q_{j-1}}{2}, \quad (2.13)$$

où

$$\begin{cases} q_j = \tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2} \\ q_{j-1} = \tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2} \end{cases}, \quad (2.14)$$

avec

$$\Delta q_j = q_j - q_{j-1},$$

on remplace les expressions de q_j et q_{j-1} (2.14) dans l'équation (2.12), et on fait le développement au 3^{ème} ordre, on obtient:

$$f(q_j) = f\left(\tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}\right) = f(\tilde{q}_j) + f'(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8} + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{48} \quad (2.15)$$

$$f(q_{j-1}) = f\left(\tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}\right) = f(\tilde{q}_j) - f'(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8} - f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{48} \quad (2.16)$$

la substitution de l'équation (2.15) et l'équation (2.16) dans l'équation (2.12) donne:

$$\Delta x_j = f'(\tilde{q}_j)\Delta q_j + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{24} \quad (2.17)$$

donc

$$(\Delta x_j)^2 = f'^2(\tilde{q}_j)(\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} \frac{(\Delta q_j)^2}{12} \right], \quad (2.18)$$

le terme énergie cinétique aura pour forme:

$$\frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\varepsilon} f'^2(\tilde{q}_j)(\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right]. \quad (2.19)$$

Transformation de la mesure

Considérons que

$$dx_j = f'(q_j) dq_j, \quad (2.20)$$

le terme de mesure devient

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \prod_{j=1}^{N-1} f'(q_j) dq_j, \quad (2.21)$$

où

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = [f'(q_N)f'(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N [f'(q_j)f'(q_{j-1})]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j, \quad (2.22)$$

alors

$$\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j = [f'(q_N)f'(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right) [f'(q_j)f'(q_{j-1})]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (2.23)$$

La transformation locale de temps

Effectuons le changement de variable suivant:

$$dt = [f'(q(\tau))]^2 d\tau. \quad (2.24)$$

Le nouvel intervalle de temps est:

$$\sigma_j = \tau_j - \tau_{j-1}. \quad (2.25)$$

La relation entre l'ancien intervalle de temps ε et le nouvel intervalle σ_j est donnée par:

$$\varepsilon = f'(q_j)f'(q_{j-1})\sigma_j. \quad (2.26)$$

On remplace l'équation (2.26) dans l'équation (2.23) on obtient:

$$\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j = [f'(q_N)f'(q_0)]^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon\sigma_j}\right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j. \quad (2.27)$$

Pour décrire ε en terme de "med-point" \tilde{q}_j , nous utilisons les relations suivantes d'ordre 3:

$$f'(q_j) = f'(\tilde{q}_j) + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8}, \quad (2.28)$$

et

$$f'(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j) - f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8}, \quad (2.29)$$

d'où

$$f'(q_j)f'(q_{j-1}) = f'^2(\tilde{q}_j) \left[1 + \frac{1}{4}(\Delta q_j)^2 \left\{ \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} - \left(\frac{f^{(2)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} \right)^2 \right\} \right], \quad (2.30)$$

on note que : $f(\tilde{q}_j) = f_j$,

d'après (2.30), l'équation (2.26) devient:

$$\varepsilon = \sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left[\frac{f_j'''}{f_j'} - \left(\frac{f_j''}{f_j'} \right)^2 \right] \right\}, \quad (2.31)$$

aussi le terme d'énergie cinétique (2.19) devient :

$$\begin{aligned} \frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 &= \frac{m}{2} f_j' (\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{f_j'''}{f_j'} \frac{(\Delta q_j)^2}{12} \right] \\ &\times \frac{1}{\sigma_j f_j'^2 \left[1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left\{ \frac{f_j'''}{f_j'} - \left(\frac{f_j''}{f_j'} \right)^2 \right\} \right]}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

il devient :

$$\frac{m}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j} (\Delta q_j)^4 \Delta V_j, \quad (2.33)$$

avec

$$\Delta V_j = \left(\frac{f_j''}{f_j'} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{f_j'''}{f_j'}. \quad (2.34)$$

Alors, le terme d'énergie potentielle devient:

$$\varepsilon V(x_j) = \sigma_j f_j'^2 V[f_j] = \sigma_j f_j'^2 V_j. \quad (2.35)$$

Le terme exponentiel du propagateur s'écrit comme:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{m}{8\sigma_j} \Delta V_j (\Delta q_j)^4 - \sigma_j f_j'^2 V_j \right\}\right]. \quad (2.36)$$

En utilisant la relation de la démocratie:

$$\prod_{j=1}^{N-1} dq_j = \prod_{j=1}^{N-1} d(\Delta q_j), \quad (2.37)$$

et l'intégrale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 - bx^4) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-ax^2 - \frac{3b}{4a^2}\right) dx. \quad (2.38)$$

Dans notre cas, on a:

$$\begin{cases} a = \frac{m}{2i\hbar\sigma_j} \\ b = \frac{m\Delta V_j}{8i\hbar\sigma_j} \end{cases}. \quad (2.39)$$

On obtient:

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

Par ailleurs, le pseudo temps τ vérifie la condition:

$$T = t_b - t_a = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau [f'(q\tau)]^2, \quad (2.41)$$

cette condition peut-être formulée comme suit:

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

Le propagateur global aura pour expression:

$$K(q_b, q_a, \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} f'(q_b)f'(q_a) \int_0^\infty \delta \left(T - \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau [f'(q\tau)]^2 \right) K_N d\tau, \quad (2.43)$$

où

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

D'après la transformation de Fourier d'une fonction:

$$\Psi(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{+\infty} e^{i\frac{Et}{\hbar}} \Psi(t) dt,$$

on peut écrire le terme $\delta(T - \int_0^{\tau_b} d\tau f'^2)$ comme suit:

$$\begin{aligned} \delta(T - \int_0^{\tau_b} d\tau f'^2) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E \left(T - \int_0^{\tau_b} d\tau f'^2 \right) \right\} \delta(E) dE \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E \left(T - \int_0^{\tau_b} d\tau f'^2 \right) \right\} dE, \end{aligned} \quad (2.45)$$

d'où:

$$\begin{cases} \delta(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\ \delta(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \delta(E) dE \end{cases}. \quad (2.46)$$

L'expression du propagateur (2.43) devient alors:

$$K(q_b, q_a; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{f'(q_b)f'(q_a)}{2\pi\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \exp \left(\frac{-i}{\hbar} T E \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} E \int_0^{\tau_b} d\tau f'^2 \right) K_N \right\} dE, \quad (2.47)$$

on remplace l'équation (2.44) du K_N dans (2.47) et après développement on arrive à:

$$K(q_b, q_a; \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{[f'(q_b)f'(q_a)]^{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left(-\frac{iET}{\hbar}\right) \times \int \cdots \int \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp\left(\sum_{j=1}^N \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j\right), \quad (2.48)$$

d'où:

$$\tilde{S}_j = \frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left(f_j'^2 V_j + \frac{3\hbar^2}{8m} \Delta V_j - E f_j'^2 \right). \quad (2.49)$$

Nous pouvons extraire la fonction de Green $G(q_b, q_a; E)$, de la transformée du propagateur par le transformation de Fourier:

$$K(q_b, q_a, \tau) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\frac{iET}{\hbar}) G(q_b, q_a, E) dE, \quad (2.50)$$

où:

$$G(q_b, q_a, E) = \sqrt{f'(q_b)f'(q_a)} \int_0^{+\infty} d\tau P(q_b, q_a; \tau). \quad (2.51)$$

L'expression de promotor donne comme:

$$P(q_b, q_a, \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \cdots \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{S}_j\right), \quad (2.52)$$

où:

$$\sum_{j=1}^N \tilde{S}_j = \sum_{j=1}^N \left[\frac{m}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left\{ f_j'^2 (V_j - E) + \frac{3\hbar^2}{8m} \Delta V_j \right\} \right]. \quad (2.53)$$

À la limite continue ($N \rightarrow \infty$):

$$\tilde{S}(q(\tau)) = \int_0^\tau d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\sigma}\right)^2 - \tilde{V}(q) \right], \quad (2.54)$$

avec:

$$\tilde{V}(q) = f'^2(q) [V(f(q) - E) + \Delta V], \quad (2.55)$$

où :

$$\Delta V = \frac{\hbar^2}{8m} \left[3 \frac{f''^2}{f_j'^2} - 2 \frac{f'''}{f_j'} \right]. \quad (2.56)$$

2.3.2 Exemples d'applications

Dans le but d'illustrer la méthode de Duru-Kleinert nous nous proposons d'appliquer aux exemples des potentiels

Exemple 1

Soit le potentiel, donné par:

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

où A , B et G sont des constantes.

Pour trouver le potentiel transformé $\tilde{V}(q)$, en utilisant les transformations suivantes:

- Transformation des coordonnées

$$r = f(q) = q^{\frac{3}{2}}. \quad (2.57)$$

- Transformation du temps:

$$dt = [f'(q)]^2 d\tau. \quad (2.58)$$

Calculons le terme correction quantique:

$$\Delta V_j = \left(\frac{f''}{f'}\right)^2 - \frac{2}{3} \frac{f'''}{f'}, \quad (2.59)$$

on a :

$$\begin{cases} f' = \frac{3}{2}q^{\frac{1}{2}} \\ f'' = \frac{3}{4}q^{-\frac{1}{2}} \\ f''' = -\frac{3}{8}q^{-\frac{3}{2}} \end{cases}, \quad (2.60)$$

alors

$$\Delta V_j = \frac{5}{12q^2}, \quad (2.61)$$

et

$$dt = \frac{9}{4}q d\tau, \quad (2.62)$$

$$V[f(q)] = Aq + \frac{B}{q} + \frac{G}{q^3}, \quad (2.63)$$

la substitution de ces valeurs dans l'équation (2.55) donne:

$$\tilde{V}(q) = \frac{9}{4}Aq^2 + \frac{9B}{4} + \frac{9}{4q^2} - \frac{9}{4}qE + \frac{5}{32} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{q^2}. \quad (2.64)$$

Exemple 2

Soit le potentiel qui s'écrit comme:

$$V(r) = \frac{A}{2mr^2} + \frac{e^2}{r}, \quad (2.65)$$

avec A et e sont des constants.

En utilisant les transformations suivantes pour trouver le potentiel $\tilde{V}(q)$

- Transformation des coordonnées:

$$r = h(q) = q^2. \quad (2.66)$$

- Transformation du temps:

$$dt = [h'(q)]^2 d\tau.$$

Calculons le terme correction quantique ΔV_j :

$$\Delta V_j = \left(\frac{h''}{h'} \right)^2 - \frac{2}{3} \frac{h'''}{h'}, \quad (2.67)$$

on a:

$$\begin{cases} h' = 2q \\ h'' = 2 \\ h''' = 0 \end{cases}, \quad (2.68)$$

alors

$$\Delta V_j = \frac{1}{q^2}, \quad (2.69)$$

$$dt = 4q^2 d\tau, \quad (2.70)$$

et

$$V(h(q)) = \frac{A}{2mq^4} + \frac{e^2}{q^2}, \quad (2.71)$$

l'expression du potentiel transformé devient:

$$\begin{aligned}\tilde{V}(q) &= (2q)^2 \left[\left(\frac{A}{2mq^4} + \frac{e^2}{q^2} \right) - E \right] + \frac{3\hbar^2}{8m} \frac{1}{q^2} \\ &= \left(\frac{2A}{m} + \frac{3\hbar^2}{8m} \right) \left(\frac{1}{q^2} \right) - 4Eq^2 + 4e^2.\end{aligned}\tag{2.72}$$

3

Détermination du spectre d'énergie relative aux états " l " du potentiel de DFPEP via les intégrales de chemin de Feynman

3.1 Introduction

Dans un système quantique, la solution exacte d'un problème physique dans lequel nous étudions le spectre d'énergie et les fonctions d'onde sous certains potentiels de type exponentiel est très importante, car elle porte des informations nécessaires concernant le système à étudier [20].

Dans ces dernières années, les chercheurs se sont orientés vers l'étude des problèmes de la particule relativiste de masse M qui se déplace sous l'action d'un champ à symétrie sphérique composé d'un potentiel scalaire $S(r)$ et d'un potentiel vectorielle $V(r)$ égaux.

L'équation de Klein- Gordon décrit le mouvement d'une particule de spin-zéro [21, 22], cette équation dans le cas des états de moment orbital " l " non nul ($l \neq 0$) n'admet aucune solution exacte, à cause du terme centrifuge [23, 24]. Pour obtenir une solution approchée de l'équation, il faut utiliser des méthodes approximatives.

L'objet de ce chapitre est de déterminer le spectre d'énergie des états « l » et les fonctions d'ondes correspondant, via les intégrales de chemin de Feynman associées à celles du potentiel du type exponentiel déformé à cinq paramètres.

3.2 Le potentiel de DFPEP

Le potentiel de type exponentiel déformé à cinq paramètres « DFPEP » (deformed five-parameters exponential type potential), que nous examinons dans cette étude est définie comme [9] :

$$\mathbf{V}_{DFPEP}(r) = p_1 + p_2 \frac{\exp(-2\alpha r)}{(1 - q' \exp(-2\alpha r))} + p_3 \frac{(\exp(-2\alpha r))^2}{(1 - q' \exp(-2\alpha r))^2}, \quad (3.1)$$

ou encore:

$$\mathbf{V}_{DFPEP}(r) = p_1 + \frac{p_2}{\exp(2\alpha r) - q'} + \frac{p_3}{(\exp(2\alpha r) - q')^2}, \quad (3.2)$$

tels que: p_1, p_2, p_3, q' et α sont cinq paramètres réglables, avec $q' \neq 0$.

3.2.1 Définition potentiel DFPEP

Ce potentiel est l'un des potentiels les plus réalistes en physique nucléaire, physique moléculaire, physique de la matière condensée et physique des particules élémentaires, puisque le potentiel incorpore les modèles potentiels bien connus comme cas spéciaux, ce modèle peut être utilisé dans le modèle de la coquille sphérique pour obtenir le fractionnement d'énergie et les nombres magiques [25].

3.2.2 Quelques cas particuliers

Nous montrons quelques cas spéciaux de potentiel "DFPEP":

Le potentiel du Maning-Rosen

Si nous définissons $p_1 = 0, p_2 = -\frac{V_0}{b^2}, p_3 = \frac{\beta(\beta-1)}{b^2}, \alpha = \frac{1}{2b}, q' = 1$, où b est le paramètre de criblage qui a une dimension de longueur. Alors le potentiel DFPEP se transforme en un potentiel de Maning-Rosen [26] comme suit:

$$V_{M-R}(r) = -\frac{V_0}{b^2} \frac{\exp\left(\frac{-r}{b}\right)}{\left(1 - \exp\left(\frac{-r}{b}\right)\right)} + \frac{\beta(\beta-1)}{b^2} \frac{(\exp\left(\frac{-r}{b}\right))^2}{\left(1 - \exp\left(\frac{-r}{b}\right)\right)^2}. \quad (3.3)$$

Le potentiel d'Hulthén

Pour $p_1 = p_3 = 0, p_2 = -V_0, q' = 1, \alpha = \frac{a}{2}$, alors le potentiel DFPEP se réduit au potentiel de Hulthén [27]:

$$V_H(r) = \frac{-V_0 \exp(-ar)}{1 - \exp(-ar)}. \quad (3.4)$$

Le potentiel de Deng-Fan

Pour $p_1 = D$, $p_2 = -2bD$, $p_3 = Db^2$, $a = \frac{\alpha}{2}$ et $q' = 1$, le potentiel DFPEP se réduit au potentiel de Morse généralisé [28]:

$$V_{D-F}(r) = D \left(1 - \frac{b}{\exp(\alpha r) - 1} \right)^2, \quad (3.5)$$

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

$$b = \exp(\alpha r_e) - 1, \quad (3.6)$$

D est le potentiel de paramètres du la dissociation d'énergie.

Le potentiel d'Eckart

Pour $p_1 = 0$, $p_2 = \beta - \alpha'$, $p_3 = \beta$, $a = \frac{1}{2\alpha}$ et $q' = 1$, le potentiel DFPEP se réduit au potentiel d'Eckart [29]

$$V_E(r) = \frac{\beta - \alpha'}{\exp\left(\frac{r}{a}\right) - 1} + \frac{\beta}{\left(\exp\left(\frac{r}{a}\right) - 1\right)^2}, \quad (3.7)$$

où α' et β sont les profondeurs du puits potentiel, et a est la plage du potentiel

3.3 L'intégrale de chemin pour le potentiel de DFPEP

Le propagateur radial de Feynman en coordonnées sphériques s'écrit comme suit [30] :

$$K(r_b, t_b; r_a, t_a) = \frac{1}{4\pi r_b r_a} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) P_l(\cos \theta), \quad (3.8)$$

où $P_l(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre avec $\theta \equiv \left(\vec{r}_b, \vec{r}_a \right)$, et le propagateur relatif s'écrit comme:

$$K_l(r_b, t_b; r_a, t_a) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^N dr_j, \quad (3.9)$$

avec

$$S_j = \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 - \varepsilon V_{eff} , \quad (3.10)$$

où: $\Delta r_j = r_j - r_{j-1}$, $\varepsilon = \Delta t_j = t_j - t_{j-1}$, $t_a = t_0$, $t_b = t_N$.

D'après l'équation de Klein-Gordon [38], nous pouvons écrire le potentiel effectif suivant :

$$V_{eff}(r) = \frac{(E + M)}{M} V_{DFPEP}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} . \quad (3.11)$$

Afin de réduire le problème des états "l" du potentiel de type exponentiel déformé à cinq paramètres "DFPEP" à celui des états "s", nous effectuons le changement de variable suivant:

$$\begin{aligned} q' \exp(-2\alpha r) &= \frac{t}{t+1} \implies \exp(-2\alpha r) = \frac{t}{q'(t+1)} \\ \exp(2\alpha r) &= \frac{q'(t+1)}{t} , \end{aligned} \quad (3.12)$$

En remplaçant l'équation (3.12) dans l'équation (3.2) on obtient :

$$V_{DFPEP}(r) = p'_1 + p'_2 t + p'_3 t^2 , \quad (3.13)$$

avec:

$$\begin{cases} p'_1 = p_1 \\ p'_2 = \frac{p_2}{q'} \\ p'_3 = \frac{p_3}{q'^2} \end{cases} . \quad (3.14)$$

Par ailleurs, pour surmonter le problème terme centrifuge nous utilisons l'approche proposée par Mustafa [10]:

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{r_e^2} \left(c_0 + \frac{c_1}{\exp(2\alpha r) - q'} + \frac{c_2}{(\exp(2\alpha r) - q')^2} \right) , \quad (3.15)$$

avec

$$\begin{cases} c_0 = \frac{\left[1 - \frac{(1 - \exp(-u))^2}{u^2} \left(\frac{4u}{1 - \exp(-u)} - (3+u) \right) \right]}{u^2} , \\ c_1 = 2 \frac{\left[\exp(u)(1 - \exp(-u)) \left(\frac{(3(1 - \exp(-u)) - (3+u)(1 - \exp(-u))^2)}{u^2} \right) \right]}{u^2} , \\ c_2 = \frac{\left[\frac{\exp(2u)}{u^2} (1 - \exp(-u))^4 \left(3+u - \frac{2u}{1 - \exp(-u)} \right) \right]}{u^2} , \end{cases} \quad (3.16)$$

dans le cas où $q' = 1$, la variable $u = \alpha r_e$ et r_e est la longueur d'équilibre, on applique le changement de variable précédent de l'équation (3.12) sur l'équation (3.15), on obtient :

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{r_e^2}(c'_0 + c'_1 t + c'_2 t^2), \quad (3.17)$$

avec

$$\begin{cases} c'_0 = c_0 \\ c'_1 = \frac{c_1}{q} \\ c'_2 = \frac{c_2}{q^2} \end{cases} . \quad (3.18)$$

L'expression du potentiel effectif en fonction du variable t est donnée par :

$$V_{eff} = \frac{(E + M)}{M} (p'_1 + p'_2 t + p'_3 t^2) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} (c'_0 + c'_1 t + c'_2 t^2), \quad (3.19)$$

où encore:

$$\begin{aligned} V_{eff} = & \left\{ \frac{(E + M)}{M} p'_1 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c'_0 \right\} + \left\{ \frac{(E + M)}{M} p'_2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c'_1 \right\} t \\ & + \left\{ \frac{(E + M)}{M} p'_3 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c'_2 \right\} t^2, \end{aligned} \quad (3.20)$$

posons:

$$\begin{cases} A_1 = \frac{(E+M)}{M} p'_1 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c'_0 \\ A_2 = \frac{(E+M)}{M} p'_2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c'_1 \\ A_3 = \frac{(E+M)}{M} p'_3 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c'_2 \end{cases} , \quad (3.21)$$

ceci donne:

$$V_{eff} = A_1 + A_2 t + A_3 t^2. \quad (3.22)$$

Les fonctions hyperboliques déformées, définies comme [31] :

$$\sinh_{q'}(x) = \frac{\exp(x) - q' \exp(-x)}{2} \quad , \quad \cosh_{q'}(x) = \frac{\exp(x) + q' \exp(-x)}{2} \quad ,$$

$$\coth_{q'}(x) = \frac{\cosh_{q'}(x)}{\sinh_{q'}(x)}, \quad (3.23)$$

d'après (3.23) , nous pouvons écrire:

$$\coth_{q'}(\alpha r) = \frac{\cosh_{q'}(\alpha r)}{\sinh_{q'}(\alpha r)} = \frac{\exp(2\alpha r) + q'}{\exp(2\alpha r) - q'}, \quad (3.24)$$

le remplacement de l'équation (3.12) dans l'équation (3.24), donne:

$$\coth_{q'}(\alpha r) = \frac{\frac{q'(t+1)}{t} + q'}{\frac{q'(t+1)}{t} - q'} = 2t + 1, \quad (3.25)$$

alors:

$$t = \frac{\coth_{q'}(\alpha r) - 1}{2}, \quad (3.26)$$

on applique le changement de variable (3.26) sur l'expression du potentiel (3.22), on obtient:

$$V_{eff}(r) = A_1 + \frac{1}{2}A_2 + \frac{1}{4}A_3 + (A_2 - A_3) \frac{\coth_{q'}(\alpha r)}{2} + A_3 \frac{\coth_{q'}^2(\alpha r)}{4}. \quad (3.27)$$

En utilisant la relation suivante:

$$\coth_{q'}^2(\alpha r) = 1 + \frac{q'}{\sinh_{q'}^2(\alpha r)}, \quad (3.28)$$

nous insérons l'équation (3.28) dans l'équation (3.27), on obtient:

$$V_{eff}(r) = A + B \coth_{q'}(\alpha r) + C \frac{1}{\sinh_{q'}^2(\alpha r)}, \quad (3.29)$$

où:

$$\begin{cases} A = A_1 - \frac{1}{2}A_2 + \frac{1}{2}A_3 \\ B = \frac{1}{2}(A_3 - A_1) \\ C = A_3 \frac{q'}{4} \end{cases} . \quad (3.30)$$

On applique le changement des variables suivant:

$$\begin{cases} r = y - \frac{1}{\alpha} \ln(\sqrt{q'}) \\ \sinh_{q'}(\alpha r) = \sqrt{q'} \sinh(\alpha y) \\ \cosh_{q'}(\alpha r) = \sqrt{q'} \cosh(\alpha y) \\ \coth_{q'}(\alpha r) = \coth(\alpha y) \end{cases} , \text{ si } q' > 0 \quad (3.31)$$

sur l'équation (3.29), on obtient:

$$V_{eff}(y) = A + B \coth(\alpha y) + C' \frac{1}{\sinh^2(\alpha y)}, \quad (3.32)$$

avec: $C' = \frac{C}{q}$, A et B sont définies précédemment.

Pour résoudre le problème relatif aux états "l" du potentiel de type exponentiel déformé à cinq paramètres "DFPEP", on va utiliser la méthode de Duru-Kleinert qui nous permet de passer de propagateur relatif au potentiel (3.32), à celui relatif au potentiel de Pöchl-Teller modifié dont le spectre a été déjà calculé.

3.4 Transformation des coordonnées d'espaces et du temps

Dans le but de faciliter l'étude, nous introduisons une transformation de coordonnée d'espace, suivie d'une transformation locale du temps. Effectuons les changements des coordonnées suivants:

Changement de coordonnée d'espace:

$$y = f(q) \equiv \frac{1}{\alpha} \arg \coth(2 \coth^2(q) - 1). \quad (3.33)$$

Changement de coordonnée de temps [33]:

$$dt = f'^2(q(\tau)) d\tau. \quad (3.34)$$

Grâce à ces deux transformations, on peut passer d'une forme de propagateur difficile à calculer, à une forme plus maniable et connu.

Nous savons par ailleurs, que le spectre d'énergie est peut tirer à partir des pôles de la fonction de Green relative à un propagateur donné, et les fonctions d'ondes correspondantes sont peuvent aussi tirer à partir des résidus aux pôles.

La relation entre la fonction de Green et le propagateur K_l , n'est que la transformée de Fourier [32] qui donnée par:

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

la fonction de Green est écrit comme suite:

$$G(r_b, r_a; E) = \frac{i}{\hbar} \left[f'(q_a) f'(q_b) \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{K}_l(q_b, q_a, \tau_b) d\tau_b, \quad (3.36)$$

où \tilde{K}_l est le propagateur relatif à trouver précédemment dans le chapitre 2

$$\tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b) = \int D_q(\tau) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau_b} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] - \Delta V(q) \right\} d\tau \right], \quad (3.37)$$

et la correction quantique $\Delta V(q)$ est donnée par:

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

Nous utilisons la transformation de coordonnée (3.33), et on pose:

$$g(q) = 2 \coth^2(q) - 1, \quad (3.39)$$

on a:

$$\arg \coth g(q) = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{g(q) + 1}{g(q) - 1} \right], \quad (3.40)$$

le remplacement de (3.40) dans (3.33), donne:

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

Après la dérivation, on obtient:

$$g'(q) = -4 \frac{\cosh(q)}{\sinh^3(q)}, \quad (3.42)$$

alors $f'(q)$ devient:

$$\begin{aligned} f'(q) &= \frac{1}{2\alpha} \left[\frac{-2g'(q)}{g^2(q) - 1} \right] \\ &= \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\coth(q)} \right), \end{aligned} \quad (3.43)$$

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

et

$$f'''(q) = \frac{-2}{\alpha} \left(\frac{\coth^2(q) - 1}{\coth^3(q)} \right). \quad (3.45)$$

En substituant les équations (3.43), (3.44) et (3.45) dans l'équation (3.38), la correction quantique $\Delta V(q)$ devient:

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8M} \left[\frac{1}{\cosh^2(q)} + \frac{3}{\sinh^2(q)} \right]. \quad (3.46)$$

La transformation (3.33) conduit à une nouvelle expression du potentiel effectif:

$$V_{eff}(y) = A + B \coth(\alpha y) + C' \frac{1}{\sinh^2(\alpha y)}, \quad (3.47)$$

donc, l'équation (3.47) devient:

$$V_{eff}(f(q)) = A - B (2 \coth^2(q) - 1) + 2C' (2 \coth^2(q) - 2) \coth^2(q), \quad (3.48)$$

on multiplie (3.48) par $f'^2(q)$, on obtient:

$$f'^2(q) V_{eff}(f(q)) = \frac{(-A - B)}{\alpha^2 \coth^2(q)} + \frac{4C'}{\alpha^2 \sinh^2(q)} - \frac{(-A + B)}{\alpha^2}, \quad (3.49)$$

ainsi

$$f'^2(q) E = \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) E - \left(\frac{1}{\alpha^2}\right) \left(\frac{E}{\coth^2(q)}\right), \quad (3.50)$$

en déduit:

$$f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q) = \frac{2M(E - A - B) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{2M\alpha^2 \cosh^2(q)} + \frac{8MC' + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{2M\alpha^2 \sinh^2(q)} - \frac{(E - A + B)}{\alpha^2}, \quad (3.51)$$

en remplaçant (3.51) dans l'expression de propagateur radiale (3.37), on obtient:

$$\begin{aligned} \tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b) &= \int D_q(\tau) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau_b} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{2M(E - A - B) + \left(\frac{\hbar^2}{4}\right)}{2M\alpha^2 \cosh^2(q)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{8MC' + \left(\frac{3\hbar^2}{4}\right)}{2M\alpha^2 \sinh^2(q)} - \frac{(E - A + B)}{\alpha^2} \right\} d\tau \right] \end{aligned} \quad (3.52)$$

où encore:

$$\begin{aligned} \tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b) &= \int D_q(\tau) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau_b} \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A + B) d\tau \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau_b} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{2M \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A - B) + \left(\frac{\hbar^2}{4} \right)}{\hbar^2 \cosh^2(q)} \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \frac{\left(\frac{1}{\alpha^2} \right) 8MC' + \left(\frac{3\hbar^2}{4} \right)}{\hbar^2 \sinh^2(q)} \right] d\tau \right\} \right], \end{aligned} \quad (3.53)$$

pour simplifier les calculs, nous écrivons le propagateur comme:

$$\begin{aligned} \tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b) &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau_b \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A + B) \right] \int D_q(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau_b} \left[\frac{M}{2} \dot{q}^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\eta(\eta - 1)}{\sinh^2(q)} - \frac{v(v - 1)}{\cosh^2(q)} \right) \right] d\tau \right\}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

par identification entre (3.53) et (3.54), on trouve que:

$$\begin{cases} \eta(\eta - 1) = \frac{(\frac{1}{\alpha^2})8MC' + (\frac{3\hbar^2}{4})}{\hbar^2} \\ v(v - 1) = -\frac{2M(\frac{1}{\alpha^2})(E - A - B) + (\frac{\hbar^2}{4})}{\hbar^2} \end{cases}, \quad (3.55)$$

la résolution de ces deux équations donne:

$$\begin{cases} \eta = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1 + \frac{8MC'}{\alpha^2 \hbar^2}} \\ v = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{-2M(E - A - B)}{\alpha^2 \hbar^2} + \frac{\hbar^2}{4}} \end{cases}. \quad (3.56)$$

Le propagateur (3.54) est similaire à celle du potentiel de Pöschl-Taller modifiée, ce dernier est un problème résolu et connu.

En fait, l'adaptation de la notion de Frank et Wolf [32] et Brut [33], la solution de l'intégrale de chemin lit $2s = \eta(\eta - 1)$, $-2c = v(v - 1)$, et en introduire les nombres k_1 et k_2 qui sont définis en fonction de c et s .

En posant:

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(\frac{1}{4} - 2c \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\ k_2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(\frac{1}{4} + 2s \right)^{\frac{1}{2}} \right] \end{cases}. \quad (3.57)$$

Le potentiel de Pöschl-Taller modifié est défini comme [34]:

$$V^{MPT}(q) = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\eta(\eta - 1)}{\sinh^2(q)} - \frac{v(v - 1)}{\cosh^2(q)} \right). \quad (3.58)$$

le propagateur devient:

$$K_l^{MPT}(q_b, q_a; \tau_b) = \sum_{n=0}^{N_m} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \tau_b E_n^{MPT}\right) \chi_{n,l}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{n,l}^{*(k_1, k_2)}(q_a), \quad (3.59)$$

où N_m est le nombre maximale des états excités.

3.5 Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes pour le potentiel de type exponentiel déformé à cinq paramètres

L'obtention de la fonction de Green à partir de la transformée de Fourier du propagateur $\tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b)$ (3.35) et (3.36), nous permet d'obtenir le spectre d'énergie et les fonctions

d'ondes correspondantes à partir des pôles et des résidus aux pôles de cette fonction respectivement.

Le propagateur du potentiel de "DFPEP" est donnée par :

$$\tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau_b \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A + B) \right] K_l^{MPT}(q_b, q_a; \tau_b), \quad (3.60)$$

où K_l^{MPT} est le propagateur qui correspond au potentiel de Pöschl-Taller modifié.

En substituant (3.59) dans (3.60), on obtient:

$$\tilde{K}_l(q_b, q_a; \tau_b) = \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tau_b \left(\left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A + B) - E_n^{MPT} \right) \right] \chi_{n,l}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{n,l}^{*(k_1, k_2)}(q_a), \quad (3.61)$$

avec N_m le nombre maximal des états excités.

Notons:

$$D = \left(\frac{1}{\alpha^2} \right) (E - A + B) - E_n^{MPT}, \quad (3.62)$$

et on remplaçons (3.61) dans (3.36), la fonction de Green devient:

$$G(r_b, r_a; E) = \frac{i}{\hbar} \left[f'(q_a) f'(q_b) \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \chi_{n,l}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{n,l}^{*(k_1, k_2)}(q_a) \int_0^{\tau_b} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \tau_b D \right) d\tau_b, \quad (3.63)$$

en intégrant sur le paramètre pseudo-temps τ_b , on obtient:

$$\begin{aligned} G(r_b, r_a; E) &= \frac{i}{\hbar} \left[f'(q_a) f'(q_b) \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \chi_{n,l}^{(k_1, k_2)}(q_b) \chi_{n,l}^{*(k_1, k_2)}(q_a) \\ &\quad \times \frac{\hbar}{iD} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \tau_b D \right). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Ici, nous avons considéré uniquement le spectre discrète, on trouve l'expansion spectrale de la fonction de Green suivante:

$$G_l(r_a, r_b; E) = \sum_{n=0}^{N_m} \frac{\chi_{n,l}^{DFPEP(k_1, k_2)}(r_b) \chi_{n,l}^{*DFPEP(k_1, k_2)}(r_a)}{E_{n,l}^{DFPEP} - E}. \quad (3.65)$$

D'après [34, 35], le respect des conditions aux limites appropriées pour $r \rightarrow 0$, et $r \rightarrow \infty$, les paramètres k_1 et k_2 deviennent:

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{2} (s + 2n + 1) + \frac{2MB}{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)} \right] \\ k_2 = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{8MC'}{\alpha^2 \hbar^2}} \right] \equiv \frac{1}{2} (1 + s) \end{cases}. \quad (3.66)$$

On écrit l'expression de la fonction d'onde du potentiel de Pöschl-Taller modifié et on la remplace dans la formule de propagateur (3.53), nous pouvons donner l'expression de la

fonction d'onde du "DFPEP":

$$\begin{aligned}
 \chi_{n,l}^{DFPEP(k_1,k_2)}(q) &= N_n^{(k_1,k_2)} (\sinh(q))^{2k_2-\frac{1}{2}} (\cosh(q))^{-2k_1+\frac{3}{2}} \\
 &\quad {}_2F_1\left(-k_1+k_2+k; -k_1+k_2-k+1; 2k_2; -\sinh^2(q)\right) \\
 &= \left[\frac{2n!(2k_1-1)\Gamma(2k_2-n-1)}{\Gamma(2k_2+n)\Gamma(2k_1-2k_2-n)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &\quad (\sinh(q))^{2k_2-\frac{1}{2}} (\cosh(q))^{2n-2k_1+\frac{3}{2}} \\
 &\quad P_n^{(2k_2-1, 2(k_1-k_2-n)-1)}\left(\frac{1-\sinh^2(q)}{\cosh^2(q)}\right), \tag{3.67}
 \end{aligned}$$

avec $P_n^{(\alpha,\beta)}$ est le polynôme de Jacobi, et $N_n^{(k_1,k_2)}$ est la constante de normalisation, donnée par :

$$N_n^{(k_1,k_2)} = \frac{1}{\Gamma(2k_2)} \left[\frac{2(2k-1)\Gamma(k_1+k_2-k)\Gamma(k_1+k_2+k-1)}{\Gamma(k_1-k_2+k)\Gamma(k_1-k_2-k+1)} \right], \tag{3.68}$$

où $k = k_1 - k_2 - n$, et les valeurs propres correspondantes sont données par :

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

où $E_{n,l}^{MPT}$ est l'énergie de Pöchl-Teller modifié.

En remplaçant la valeur de k_2 et on utilise le changement de coordonnée (3.33) dans la fonction d'onde précédente (3.67), on trouve la fonction d'onde suivante (*voir l'annexe N°2*) :

$$\begin{aligned}
 \chi_{n,l}^{DFPEP}(r) &= \frac{1}{r} \left[\frac{2\alpha(2k_1-1)n!\Gamma(2k_1-n-1)}{\Gamma(n+s+1)\Gamma(2k_1-s-n-1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
 &\quad \left(\frac{1}{q'}e^{2\alpha r} - 1\right)^{\frac{s}{2}} \left(\frac{1}{q'}\right)^{n-k_1-\frac{3}{4}} (e^{2\alpha r})^{n-k_1-\frac{1}{2}} \\
 &\quad (-1)^n P_n^{(s, 2k_1-2n-s-1)}(1-2q'e^{-2\alpha r}). \tag{3.70}
 \end{aligned}$$

Le spectre d'énergie est obtenu à partir des pôles de la fonction de Green, quand l'équation (3.62) est nulle, on obtient le spectre d'énergie correspond au potentiel de DFPEP:

$$E = \alpha^2 E_{n,l}^{MPT} - B + A, \tag{3.71}$$

par le remplacement de l'expression (3.69) dans (3.71), on obtient:

$$E = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} [2(k_1 - k_2 - n) - 1]^2 - B + A, \quad (3.72)$$

l'expression d'énergie devient:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{4} (s + 2n + 1)^2 + \frac{4M^2 B^2}{\alpha^4 \hbar^4 (s + 2n + 1)^2} - \frac{2MB}{\alpha^2 \hbar^2} \right] - B + A \\ &= -\left[\frac{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)^2}{8M} + \frac{2MB^2}{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)^2} \right] + A, \end{aligned} \quad (3.73)$$

avec

$$s = \sqrt{1 + \frac{8MC'}{\alpha^2 \hbar^2}}. \quad (3.74)$$

On a l'équation mentionnée précédemment dans le premier chapitre:

$$\frac{E_{n,l}^2 - M^2 c^4}{2M} = E, \quad (3.75)$$

donc l'expression d'énergie associée au potentiel DFPEP donne sous la forme suivante:

$$E_{n,l}^2 - M^2 c^4 = 2M \left\{ -\left[\frac{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)^2}{8M} + \frac{2MB^2}{\alpha^2 \hbar^2 (s + 2n + 1)^2} \right] + A \right\}. \quad (3.76)$$

3.6 Résultats et discussions

Dans nos programmes informatiques, nous avons utilisé un logiciel Maple pour l'obtention de nos résultats numériques, ces résultats ont permis de tester l'efficacité de la méthode de Duru-Kleinert sur l'équation de Klein-Gordon pour le potentiel de type exponentiel déformé à cinq paramètres (DFPEP), représentés par p_1 , p_2 , p_3 , q' et α , dans le but de déterminer les valeurs des spectres d'énergie pour différentes valeurs du moment angulaire " l " et du nombre quantique radiale " n ", tel que : $n_T = n + l + 1$, où n_T est le nombre quantique totale. Nous avons fait nos calculs dans le cas où le potentiel DFPEP réduit à potentiel de Deng-Fan généralisé déformé plus le potentiel d'Eckart déformé:

$$V(r) = V_0 c^2 - \frac{(2V_0 c b + V_1 - V_2)}{\exp(ar) - q'} + \frac{(V_0 b^2 + V_2 q')}{(\exp(ar) - q')^2}, \quad (3.77)$$

tel que: $p_1 = V_0 c^2$, $p_2 = -(2V_0 c b + V_1 - V_2)$ et $p_3 = (V_0 b^2 + V_2 q')$, avec: $b = \exp(ar_e - 1)$, $a = \frac{\alpha}{2} \cdot V_0$, V_1 et V_2 sont des profondeurs du potentiel et c est une constante réglable.

Nous avons comparé nos résultats présentées dans les deux cas relativiste et non-relativiste dans les tableaux (3.1) et (3.2) respectivement, avec ceux calculés par Hatami [37] dans le cadre de la méthode de N-U (Nikiforov-Uvarov).

À la lumière des résultats obtenus numériquement au niveau du rapport entre notre résultat et les résultats présentées dans littérature, nous pouvons affirmer que nous avons atteint des résultats excellents et intéressants du point de vue de la mécanique quantique. Deux points clés existent pour gérer l'obtention de nos résultats: le premier point est la méthode de Duru-Kleinert qui considère comme un outil efficace qui traiter les potentiels de forme exponentiel pour trouver le spectre des énergies. Le deuxième est l'approximation du terme centrifuge que nous avons utilisé a une forte influence sur l'expression du potentiel effectif du système étudié et par conséquent, sur l'énergie de tous les spectres. Les mêmes effets seront plus prononcés sur la fonction d'onde.

états	α	Nos résultats	Hatami(N-U)[37]
$2p$	0.05	4.41276	4.41272
	0.075	4.32738	4.32729
	0.1	4.31649	4.31632
	0.15	4.34586	4.34548
	0.2	4.39365	4.39297
$3p$	0.05	8.69999	8.69997
	0.075	8.64747	8.64742
	0.1	8.66464	8.66453
	0.15	8.74716	8.74691
	0.2	8.84683	8.84638
$3d$	0.05	5.97059	5.9705
	0.075	5.89994	5.89972
	0.1	5.89428	5.89388
	0.15	5.92763	5.92674
	0.2	5.97691	5.97535
$4p$	0.05	11.76984	11.7698
	0.075	11.75152	11.7515
	0.1	11.79322	11.7931
	0.15	11.91793	11.9177
	0.2	12.05695	12.0566
$4d$	0.05	9.60330	9.60322
	0.075	9.56153	9.56137
	0.1	9.58209	9.58179
	0.15	9.66619	9.66552
	0.2	9.76546	9.76426
$4f$	0.05	7.60625	7.60609
	0.075	7.54997	7.54961
	0.1	7.55097	7.55032
	0.15	7.59227	7.59081
	0.2	7.64738	7.6448

Table 3.1 : Le spectre d'énergie relativiste $E_{n,l}$ du potentiel de Deng-Fan généralisé déformé plus le potentiel d'Eckart déformé, pour plusieurs états lié, avec: $V_0 = 15eV$, $V_1 = \alpha eV$, $V_3 = 0.0001eV$, $r_e = 0.4A^\circ$ et $q' = 1$.

Pour obtenir les spectres d'énergie non-relativistes pour le DFPEP, nous utilisons les limites non-relativistes, nous fixons: $V(r) \rightarrow \frac{V(r)}{2}$, $\frac{E_{n,l}^2 - M^2c^4}{\hbar^2c^2} \rightarrow \frac{2m}{\hbar^2}E$ et $\frac{E_{n,l} + Mc^2}{\hbar^2c^2} \rightarrow \frac{2m}{\hbar^2}$.

états	α	Nos résultats	Hatami(N-U)[37]
$2p$	0.025	6.88011	6.88007
	0.05	6.70168	6.88007
	0.075	6.71086	6.7104
	0.1	6.74875	6.74792
	0.15	6.84418	6.84231
$3p$	0.025	10.33747	10.3374
	0.05	10.32689	10.3267
	0.075	10.39862	10.3982
	0.1	10.48228	10.4814
	0.15	10.65608	10.6542
$3d$	0.025	9.44254	9.44239
	0.05	9.41308	9.41246
	0.075	9.46924	9.46784
	0.1	9.53803	9.53554
	0.15	9.68337	9.67775
$4p$	0.025	12.0037	12.0073
	0.05	12.06524	12.06524
	0.075	12.16502	12.16502
	0.1	12.26956	12.26956
	0.15	12.47751	12.47751
$4d$	0.025	11.54640	11.5463
	0.05	11.59742	11.5968
	0.075	11.69020	11.6888
	0.1	11.78816	11.7857
	0.15	11.98458	11.9790
$4f$	0.025	11.22165	11.2213
	0.05	11.27097	11.2697
	0.075	11.35900	11.3562
	0.1	11.45212	11.4471
	0.15	11.63984	11.6286

Table 3.2 : Le spectre d'énergie non relativiste $E_{n,l}$ du potentiel de Deng-Fan généralisé déformé plus le potentiel d'Eckart déformé, pour plusieurs états lié en unités atomiques

($\hbar = M = 1$), avec $V_0 = 15eV$, $V_1 = \alpha eV$, $V_3 = 0.0001eV$ et $r_e = 0.4A^\circ$.

Conclusion

Dans ce travail, nous avons tenté de généraliser la méthode des intégrales de chemin pour les équations relativistes. Nous avons concerné à la résolution de l'équation de Klein-Gordon associé au potentiel de DFPEP avec un potentiel scalaire et un potentiel vecteur sont égaux, via la méthode de Duru-Kleinert, en choisissant une approximation approprié du terme centrifuge. Nous avons démontré que nous pouvons calculer le propagateur relatif aux états $l \neq 0$, où nous avons pu obtenir sa fonction d'onde et son spectre d'énergie.

L'approximation que nous avons utilisé pour le terme centrifuge est ce qui nous a permis de passer de la résolution d'un problème relatif aux états « l » à celui de l'état « s » ($l = 0$).

Par ailleurs, pour passer d'un propagateur difficile à calculer relatif au potentiel de DFPEP à celui de Pöschl-Teller modifié qui a déjà calculé, nous avons utilisé la transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert, cette dernière a montré leur pleine efficacité pour résoudre ce problème.

Nous avons déterminé l'expression des spectres d'énergie du potentiel DFPEP, pour différentes valeurs du paramètre d'écran α et des différentes nombres quantiques n et l . Nous constatons que nos résultats sont en très bon accord avec ceux donnée par la méthode de Nikiforov-Uvarov dans le cas relativiste et non- relativiste, dans ce dernier nous avons retrouvé les valeurs propres de l'énergie dans le cadre du formalisme de Schrödinger pour le potentiel du système. Sous le régime non relativiste, nous pouvons aussi étudier et calculer les propriétés thermodynamiques d'après le spectre d'énergie de potentiel DFPEP, telles que la fonction de partition, énergie interne, la chaleur spécifique, l'énergie libre, ainsi que l'entropie.

En conclusion, la méthode des intégrales de chemin présentée dans ce travail, démontre que celle-ci est un outil efficace dans la résolution de l'équation de Klein-Gordon, parce

qu'elle nous conduit à des résultats importants dans le domaine de la physique. Le formalisme des intégrales de chemin de Feynman peut être étendue et développée pour résoudre de nombreux problèmes dans diverses branches de la physique, même en chimie, pour différentes formes des potentiels dans les recherches en future.

4

Annexes

4.1 Annexe 1: L'expression du propagateur global discrète

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

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | u(t_b, t_a) | x_a \rangle, \quad (4.1)$$

tel que

$$u(t_b, t_a) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (t_b - t_a) H \right\}, \quad (4.2)$$

en effet:

$$| \Psi(t_b) \rangle = u(t_b, t_a) | \Psi(t_a) \rangle, \quad (4.3)$$

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

$$\Psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_b | u(t_b, t_a) | x_a \rangle \langle x_a | \Psi(t_a) \rangle dx_a \quad (4.4)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a, \quad (4.5)$$

on dévise l'intervalle:

- pour $t_b > t_1 > t_a$ on aura:

$$\Psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_b, t_b; x_1, t_1) \Psi(x_1, t_1) dx_1, \quad (4.6)$$

d'après les équations (4.4) et (4.5), l'équation (4.6), devient:

$$\Psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_b, t_b; x_1, t_1) \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_1, t_1; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a dx_1. \quad (4.7)$$

- Pour $t_b > t_{N-1} > \dots > t_1 > t_a$: (c.à.d on subdivisons l'intervalle $[t_a, t_b]$), on aura:

$$\Psi(x_b, t_b) = \int \dots \int \prod_{j=1}^N K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) \Psi(x_a, t_a) dx_a dx_1 dx_2 \dots dx_{j+1}. \quad (4.8)$$

où $x_N \equiv x_b$ et $x_0 \equiv x_a$.

En cas général: pour $n = 1, 2, \dots, N$

$$\Psi(x_n, t_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}) \Psi(x_{n-1}, t_{n-1}) dx_{n-1}, \quad (4.9)$$

alors, en comparant (4.5) et (4.8), on trouve:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a) \Psi(x_a, t_a) dx_a = \int \dots \int \prod_{j=1}^N K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) \Psi(x_a, t_a) dx_a dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (4.10)$$

par identification on trouve:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \text{ou} \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int \dots \int \prod_{j=1}^N K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (4.11)$$

avec

$$\prod_{j=1}^N K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) dx_1 dx_2 \dots dx_N = K(x_N, t_N; x_{N-1}, t_{N-1}) \prod_{j=1}^{N-1} K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) dx_j, \quad (4.12)$$

et on note

$$K(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) = K(x_j, x_{j-1}; \varepsilon), \quad (4.13)$$

avec

$$K(x_j, x_{j-1}; \varepsilon) = \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon^2} - V(x_n) \right] \right\}. \quad (4.14)$$

Le propagateur globale sera donné par:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \text{ou} \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int \cdots \int K(x_N, x_{N-1}; \varepsilon) \prod_{j=1}^{N-1} K(x_j, x_{j-1}; \varepsilon) dx_j, \quad (4.15)$$

le remplacement de chaque propagateur $K(x_j, x_{j-1}; \varepsilon)$ par son expression (4.14) conduit à une forme condensée:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int D[x(t)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x(t)) \right]. \quad (4.16)$$

4.2 Annexe 2: L'expression de la fonction d'onde du potentiel DFPEP

Le potentiel de Pöschl-Taller s'écrit comme:

$$V^{MPT}(q) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\eta(\eta-1)}{\sinh^2(q)} - \frac{v(v-1)}{\cosh^2(q)} \right). \quad (4.17)$$

la fonction d'onde correspond à ce potentiel est donnée par:

$$\begin{aligned} \chi_{n,l}^{(k_1, k_2)}(q) &= C_1 (\sinh^2(q))^{2k_2 - \frac{1}{2}} (\cosh^2(q))^{2n - 2k_1 + \frac{1}{2}} \\ &\quad \times P_n^{[2k_2 - 1, 2(k_1 - k_2 - n) - 1]} \left(\frac{1 - \sinh^2(q)}{\cosh^2(q)} \right), \end{aligned} \quad (4.18)$$

où:

$$C_1 = \left[\frac{2n!(2k_1 - 1)\Gamma(2k_2 - n - 1)}{\Gamma(2k_2 + n)\Gamma(2k_1 - 2k_2 - n)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.19)$$

On a :

$$\alpha y = \arg \coth(2 \coth^2(q) - 1), \quad (4.20)$$

ainsi:

$$\coth(\alpha y) = 2 \coth^2(q) - 1, \quad (4.21)$$

d'autre part, on a:

$$\coth(\alpha y) = \coth_{q'}(\alpha r), \quad (4.22)$$

donc l'équation (4.21), devient:

$$\coth_{q'}(\alpha r) = 2 \coth^2(q) - 1, \quad (4.23)$$

ceci donne:

$$\coth^2(q) = \frac{\coth_{q'}(\alpha r) + 1}{2}, \quad (4.24)$$

on sait que :

$$\coth^2(q) = \frac{\cosh^2(q)}{\sinh^2(q)} = \frac{1 + \sinh^2(q)}{\sinh^2(q)} = \frac{1}{\sinh^2(q)} + 1, \quad (4.25)$$

on remplaçons l'équation (4.25) dans l'équation (4.24), on trouve:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sinh^2(q)} &= \frac{1}{2}(\coth_{q'}^2(\alpha r) - 1) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\cosh_{q'}^2(\alpha r)}{\sinh_{q'}^2(\alpha r)} - 1 \right), \end{aligned} \quad (4.26)$$

on utilisons les relations des fonctions hyperbolique:

$$\begin{cases} \cosh_{q'}(\alpha r) = \frac{e^{\alpha r} + q'e^{-\alpha r}}{2} \\ \sinh_{q'}(\alpha r) = \frac{e^{\alpha r} - q'e^{-\alpha r}}{2} \end{cases}, \quad (4.27)$$

l'équation (4.26), devient:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sinh^2(q)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{e^{\alpha r} + q'e^{-\alpha r}}{e^{\alpha r} - q'e^{-\alpha r}} - 1 \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{2q'e^{-\alpha r}}{e^{\alpha r} - q'e^{-\alpha r}} \right] \\ &= \frac{1}{\frac{1}{q'}e^{2\alpha r} - 1}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

alors:

$$\sinh^2(q) = \frac{1}{q'}e^{2\alpha r} - 1, \quad (4.29)$$

et

$$\cosh^2(q) = \frac{1}{q'}e^{2\alpha r}, \quad (4.30)$$

donc:

$$\left(\frac{1 - \sinh^2(q)}{\cosh^2(q)} \right) = 2q'e^{-2\alpha r} - 1. \quad (4.31)$$

Pour normaliser la fonction d'onde $\chi_{n,l}^{(k_1,k_2)}(r)$, on a:

$$\int \left(\chi_{n,l}^{(k_1,k_2)}(q) \right)^2 dq = \int \left(\chi_{n,l}^{(k_1,k_2)}(r) \right)^2 r^2 dr = 1. \quad (16)$$

On pose:

$$\begin{cases} f(r) = \coth_{q'}(\alpha r) \\ \text{et} \\ g(q) = 2 \coth^2(q) - 1 \end{cases}, \quad (4.32)$$

d'après l'équation (4.23), on a donc:

$$f(r) = g(q), \quad (4.33)$$

alors

$$\frac{df(r)}{dr} = \frac{dg(q)}{dr} = \frac{dg(q)}{dq} \frac{dq}{dr}, \quad (4.34)$$

ceci donne:

$$f'(r) dr = g'(q) dq. \quad (4.35)$$

Calculons $f'(r)$:

$$\begin{aligned} f'(r) &= (\coth_{q'}(\alpha r))' \\ &= \left(\frac{\cosh_{q'}(\alpha r)}{\sinh_{q'}(\alpha r)} \right)' \\ &= \frac{-\alpha}{\sinh_{q'}^2(\alpha r)}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Calculons $g'(q)$:

$$\begin{aligned} (2 \coth^2(q) - 1)' &= \left(2 \frac{\cosh^2(q)}{\sinh^2(q)} - 1 \right)' \\ &= \frac{-4 \cosh(q)}{\sinh^3(q)}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

D'après l'équation (4.35), on a donc:

$$\frac{-\alpha}{\sinh_{q'}^2(\alpha r)} dr = \frac{-4 \cosh(q)}{\sinh^3(q)} dq \quad (4.38)$$

alors:

$$dq = \frac{\alpha}{4} \frac{\sinh^3(q)}{\sinh_{q'}^2(\alpha r) \cosh(q)} dr. \quad (4.39)$$

On a:

$$\sinh_{q'}^2(\alpha r) = \left(\frac{e^{\alpha r} - q' e^{-\alpha r}}{2} \right)^2 = \frac{q' e^{-2\alpha r}}{4} \left(\frac{1}{q'} e^{2\alpha r} - 1 \right)^2. \quad (4.40)$$

le remplacement des équations (4.29) , (4.30) et (4.40) dans l'équation (4.39), donne:

$$dq = \alpha \left(\frac{1}{q'} e^{2\alpha r} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} e^{\alpha r} dr. \quad (4.41)$$

D'après ces changements des variables, l'équation (4.17), devient en fonction de r comme suit:

$$\begin{aligned} \chi_{n,l}^{(k_1,k_2)}(r) &= \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{r} C_1 \left(\frac{1}{q'} e^{2\alpha r} - 1 \right)^{-\frac{1}{4}} e^{\frac{\alpha r}{2}} \left(\frac{1}{q'} e^{2\alpha r} - 1 \right)^{k_2 - \frac{1}{4}} \\ &\times \left(\frac{1}{q'} e^{2\alpha r} \right)^{n - k_1 - \frac{3}{4}} P_n^{[2k_2 - 1, 2(k_1 - k_2 - n) - 1]} (2q' e^{-2\alpha r} - 1). \end{aligned} \quad (4.42)$$

on sait que

$$p_n(-x) = (-1)^n p_n(x) , \quad (4.43)$$

d'après (4.43), l'équation (4.42) devient

$$\begin{aligned} \chi_{n,l}^{DFPEP}(r) &= \frac{1}{r} \left[\frac{2\alpha (2k_1 - 1) n! \Gamma(2k_1 - n - 1)}{\Gamma(n + s + 1) \Gamma(2k_1 - s - n - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\left(\frac{1}{q'} e^{2\alpha r} - 1 \right)^{\frac{s}{2}} \left(\frac{1}{q'} \right)^{n - k_1 - \frac{3}{4}} (e^{2\alpha r})^{n - k_1 - \frac{1}{2}} \\ &(-1)^n P_n^{(s, 2k_1 - 2n - s - 1)} (1 - 2q' e^{-2\alpha r}). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Bibliographie

- [1] E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.* 79 (1925) 361; 80 (1926) 437; 81 (1926) 109.
- [2] W. Heisenberg, *Zeitsch. f. Phys*, 33 (1925) 879 ; M. Born and P. Jordan, *Zeitsch. f. Phys*, 34 (1925) 858 ; M. Born , W. Heisenberg and P. Jordan, *Zeitsch. f. Phys*, 35 (1926) 557; P. M. A. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A* 109 (1925) 642.
- [3] P. M. A. Dirac, The principles of quantum mechanics (Oxford Clarindon press , London , 1958).
- [4] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys*, 20 (1948) 367.
- [5] I. H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett*, B 84 (1979) 185.
- [6] K. X. Fu, M. Wang and C. S. Jia, *Commun. Theor. Phys*, 71(2019) 103.
- [7] A. N. Ikot, B. C. Lutfuoglu, M. I. Ngwueke1, M. E. Udoh1, S. Zare, and H. Hassanabadi., *Eur. Phys. J. Plus*. 131 (2016) 419.
- [8] F. Rezvani, and M. R. Shojaei, *Int. J. Theor. Phys. Crypt*, 7 *(month 2014) 1.
- [9] C. S. Jia, Y. Zhang, X. L. Zeng, and L. T. Sun, *Commun. Theor. Phys*, 36 (2001) 641.
- [10] O. Mustafa, *Phys. Scr*, 90 (2015) 065002.
- [11] H. Boukabcha, application des intégrales de chemin et des inégalités de Bethlmann et Martin dans le domaine des basses énergies, (mémoire de Magister, université USTHB Algérie, 2005).
- [12] H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets (World scientific, Singapore, 2004).
- [13] A. Chouchaoui, *Anal. Phys*, 312 (2004) 431.

-
- [14] S. Mameri, Quantification par l'intégrale de chemin d'un ensemble de potentiels déformés, (Thèse de Doctorat, Université Mentouri Constanine, 2010).
- [15] L. Boudebza, Super-Integrabilité sur une hyperboloïde à deux dimensions, (Thèse de Magister, Université Mentouri Constanine, 2007).
- [16] A. N. Ikot, H. P. Obong, and H. Hassanabadi, *Few. Body. Syst*, 56 (2015) 185.
- [17] A. N. Ikot, B. H. Yazarloo, S. Zarrinkamar, and H. Hassanabadi, *Eur. Phys. J. Plus*, 129 (2014) 79.
- [18] U. S. Okorie, A. N. Ikot, C. O. Edet, I. O. Akpam, R. Server and G. J. Rampho, *J. Phys. Commun*, 3 (2019) 095015.
- [19] A. Tilbi, Intégrale de chemin semi-classique et théorie de Broglie-Bohm, (Thèse de Doctorat, Université Mentouri constantine, 2007).
- [20] J. Stanek, *Cent. Eur. J. Phys*, (2011) 1503.
- [21] H. Egrifes and R. Sever, *Phys. LeF. A* 344117 (2005) 126.
- [22] A. D. Alhaidari, *Phys. LeF. A* 69 (2004) 32658.
- [23] F. Cooper and B. Freedman, *Ann. Phys*, 146 (1983) 262.
- [24] M. Simsek and H. Egrifes, *J. Phys. A : Math. Gen*, 37 (2004) 4379.
- [25] J. N. Ginocchio, *Phys. Rev. C*, 69 (2004) 034318.
- [26] J. J. Pena, J. Garcia-Martinez, J. Garcia-Ravelo, and J. Morales, *Int. J. Quantum Chem*, 115 (2015) 158.
- [27] C. Y. Chen, F. L. Lu, and D. S. Sun, *Acta Phys. Sin.* 56 (2007) 0204.
- [28] Z. H. DENG and Y. P. FAN, *Shandong Univ. J.* 7 (1957) 162 ; A. Del Sol Mesa, C. Quesne and Y. F. Smirnov, *J. Phys. A: Math. Gen*, 31 (1998) 321.
- [29] F. Taşkin, G. Koçak, *Chin. Phys*, B 19 (2010) 090314.
- [30] D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, *Path integral Methods and Their Applications* (World Scientific; Singapore, 1986).
- [31] A. Arai, *J. Math. Anal. Appl*, 158 (1991) 63; *J. Phys*, A 34, (2001) 4281.

- [32] A. Frank and K. B. Wolf, *J. Math. Phys*, 26 (1985) 973.
- [33] A. O. Barut, A. Inomata and R. Wilson. *J. Phys. Math*, 20 (1987) 4083.
- [34] C. Grosche, *J. Phys. A. Math. Gen*, 22 (1989) 5073.
- [35] C. Grosche, *J. Phys. A. Math*, 36 (5), (1995) 2354.
- [36] H. Boukabcha, M. Hachama and A. Diaf, *App. Math. and Comp*, 321 (2018) 121.
- [37] N. Hatami, J. Naji, and M. Pananeh, *Eur. Phys. J. Plus*, 134 (2019) 90.
- [38] N. Candemir, *App. Math. and Comp*, 274 (2016) 531.