

*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 :

**Résolution de l'équation de Dirac pour le potentiel
de Morse, via les intégrales de chemin**

Présenté par :

 BEZZINA Amina

Soutenu le: 15 /06 /2023 devant le jury composé de :

 Mme A. Mazouz M. C. B à Université Khemis Miliana Présidente

 Mr H. Boukabcha M. C. A à Université Khemis Miliana Encadreur

 Mr M. Douici M. C. B à Université Khemis Miliana Examineur

Année Universitaire : 2022/2023

*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 :

**Résolution de l'équation de Dirac pour le potentiel
de Morse, via les intégrales de chemin**

Présenté par :

 BEZZINA Amina

Soutenu le: 15 /06 /2023 devant le jury composé de :

 Mme A. Mazouz	M. C. B	à Université Khemis Miliana	Présidente
 Mr H. Boukabcha	M. C. A	à Université Khemis Miliana	Encadreur
 Mr M. Douici	M. C. B	à Université Khemis Miliana	Examineur

Année Universitaire : 2022/2023

Résumé

Dans le cadre des intégrales de Feynman et dans le cas du potentiel de Morse, nous avons présenté des solutions approximatives à deux potentiels scalaire et vectoriel égaux de l'équation de Dirac. Ce dernier n'admet pas de solutions exactes pour les états " $\ell \neq 0$ ". Pour ce faire, une approximation du terme centrifuge a été effectuée, cela nous a permis d'obtenir l'énergie discrète et la fonction d'onde. D'après l'utilisation de la technique Duru-Kleinert par transformation spatiotemporelle.

Le propagateur de potentiel de Morse a été transformé en celui du potentiel de l'oscillateur harmonique radial. Les énergies des molécules H₂, LiH, HCl, CO, ScH, ScN, Scf et I₂ pour les états bas et haut sont calculées. Nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus numériquement, et beaucoup mieux que ceux d'autres méthodes. Nous avons utilisé une version de logiciel Maple pour donner des résultats numériques.

Les mots clés :

Intégrale de chemin, équation Dirac, potentiel de Morse, spectre d'énergie, fonction d'onde.

Abstract:

In the framework of the Feynman integrals and in the case of the Morse potential, we have presented approximate solutions to two equal scalar and vector potentials of the Dirac equation. The latter does not admit exact solutions for states with ' $\ell \neq 0$ '. To do so, an approximation of the centrifugal term was performed, allowing us to obtain the discrete energy and the wave function. According to the use of the Duru-Kleinert technique through space-time transformation.

The Morse potential propagator has been transformed into a radial harmonic oscillator potential. The energies of the molecules H₂, LiH, HCl, CO, ScH, ScN, Scf and I₂ for the low and high states are calculated. Our results are in good agreement with those obtained numerically, and much better than those of other methods. We have used a version of Maple software to give the numerical results.

Key Words:

Path integral, the Dirac equation, Morse potential, energy spectrum, wave function.

تلخيص

في اطار تكاملات Feynman و في حالة كمون Morse قدمنا حولا تقريبيية لامكانيات متوازنة ومتجهية متساوية في معادلة ديراك هذا الخير لا يقبل الحلول للحالات $\ell \neq 0$ للقيام بذلك تم اجراء تقريب لمصطلح الطرد المركزي مما سمح لنا بالحصول على الطاقة المنفصلة ووظيفة الموجة وفقا لاستخدام تقنية Duru-Kleinert من خلال التحول الزماني المكاني.

تم تحويل ناشر Morse المحتمل الى امكانيات الهزاز التوافقي الشعاعي يتم حساب طاقات جزيئات HCl, H₂, Li, ScF, ScN, ScH, CO و I₂ للحالات المنخفضة و العالية. تتوافق نتائجنا جيدا مع تلك التي تم الحصول عليها عدديا و هي افضل بكثير من نتائج الطرق الاخرى. استخدمنا برنامج Maple.

الكلمات المفتاحية :

تكامل المسارات، معادلة ديراك ، كمون مورس، دوال الموجة، طيف الطاقة .

REMERCIEMENTS

*Ce présent travail a été réalisé au département des sciences de la matière de la faculté des sciences et de la Technologie à l'université de Djilali Bounaama de Khemis Miliana, sous la direction de Monsieur **Hocine BOUKABCHA** maître de conférences A à l'université Djilali Bounaama de Khemis Miliana.*

Avant toutes choses, je remercie ALLAH, le tout-puissant, pour m'avoir donné assez de force, la volonté et de la patience pour mener à terme ce travail.

Je tiens à remercier mon promoteur d'avoir accepté d'encadrer ce travail, ainsi que pour sa disponibilité et ses précieuses remarques et ses encouragements, et ses nombreux conseils. Merci pour sa gentillesse, et son suivi pour mener à terme cette étude, merci pour tout.

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

Un remerciement particulier ira à mes parents, tous les membres de ma famille et toutes les personnes qui ont contribué à construire ce travail.

En fin, je remercie tous mes amis et mes collègues pour leurs encouragements.

DÉDICACES

Je dédie du profond de mon cœur ce modeste travail:

*À mon lien dans la vie, mon chère père **Abderrahmane**, et ma mère **Oumelkhir**. Pour leur patience, leur amour, leur soutien et leur encouragement.*

À mes frères, mes sœurs, qui ont été la source de ma force et mon encouragement.

À toute ma famille.

*À mon mari **Abdallah**, qui m'a soutenu tout au long de ce mémoire, que Dieu le protège.*

*À ma 2^{ème} mère **Houria**, que Dieu la protège*

*À mon encadreur, **Dr. Hocine Boukabcha**, qui m'a suivi tout au long de la préparation du mémoire et m'a guidé et conseillé, que Dieu le protège.*

*À tous mes amis, en particulier **Rihab, Safia et Sanaa**, que Dieu leur accorde la réussite.*

BEZZINA Amina



Table des matières

Introduction	3
1 Formalisme des intégrales de chemin en coordonnées sphériques	7
1.1 Introduction	7
1.2 Expérience de pensée de Feynman	7
1.3 Définition du propagateur de Feynman	9
1.4 Le propagateur de forme discrète	10
1.5 Passage du propagateur à la fonction de Green en fonction de l'énergie et la fonction d'onde	12
1.6 L'intégrale de chemin en coordonnées sphériques	13
1.7 L'équation de Dirac en coordonnées sphériques	18
1.8 L'équation de Dirac d'un potentiel central	23
1.8.1 Cas de spin symétrique	25
1.8.2 Cas de pseudo-spin symétrique	25
2 Les transformations de coordonnées et de temps de Duru-Kleinert dans le formalisme de Feynman	27
2.1 Introduction	27
2.2 La méthode de Duru-Kleinert	28
2.3 Les transformations d'espace-temps dans le formalisme de Feynman	28
2.4 Application:	35
3 Détermination du spectre d'énergie relative aux états "l" du potentiel de Morse via les intégrales de chemin	38
3.1 Introduction	38
3.2 Le potentiel de Morse	38
3.3 L'équation de Dirac pour le potentiel de Morse	39

3.4	L'approximation du potentiel centrifuge	40
3.5	Le potentiel effectif	40
3.5.1	Dans le cas d'un spin symétrique :	40
3.5.2	Dans le cas d'un pseudo-spin symétrique :	41
3.6	Les transformations de coordonnées et de temps de Duru-Kleinert dans le formalisme de Feynman	42
3.7	Le spectre d'énergie et les fonctions d'ondes	43
3.7.1	Cas de spin symétrique	43
3.7.2	Cas de d'un pseudo-spin symétrique :	48
3.8	Résultats et discussions	52
Conclusion		65
Annexe		70

Introduction

La physique a parfaitement réussi à donner une explication à de nombreux phénomènes physiques macroscopiques, Il est bien connu que la physique classique était décrite par les lois de Newton [1] pour la matière en 1686, et les lois d'Hamilton qui permettent de définir les équations de mouvement de plusieurs espèces en 1833, elle a également été décrite dans les équations de Maxwell pour les ondes en 1865, Cependant, des scientifiques tels que Lord Kelvin ont émis des doutes sur les limites de la physique, déclarant "Il n'y a rien de nouveau à découvrir en physique".

À la fin du 19^{ème} siècle, les physiciens experts ont commencé à découvrir la structure atomique de la matière. Ils ont trouvé que les particules de matière au plus proche de l'atome se développaient d'une manière inattendue, et que la physique classique newtonienne ne peut pas expliquer les phénomènes microscopiques, parmi ces expériences, nous pouvons citer, l'effet photoélectrique, le rayonnement du corps noir, l'effet Compton etc..... Tous ces phénomènes ont été totalement expliqués en 1926-1927 dans une théorie nommée "mécanique quantique".

La mécanique quantique créée en 1900[2], il a appelé cette diffusion spécifique la théorie de l'atome d'hydrogène de Bohr "théorie quantique", après les travaux d'un physicien Allemand, Max Planck, qui a permis de résoudre ces problèmes, et formuler la loi de quantification de l'énergie[3], et exprimer la 1^{ère} équation différentielle pouvant d'écrire les spectres énergétiques d'un atome par Schrödinger en 1925 [3]. où il découvre de façon imprévue que la matière émet de la lumière selon un mode de démission quantifié, en raison de la théorie de Planck en 1905 Einstein a donné une explication de quelques phénomènes électromagnétiques et a défini les lois des principales de la physique moderne.

Au cours du siècle passé, différents formalismes ont été développés pour comprendre la mécanique quantique, et plusieurs travaux ont réussi à décrire et à expliquer les phénomènes physiques en utilisant différents formalismes, nous pouvons citer brièvement les trois formalismes suivants comme étant les plus importants:

Le premier est la théorie des matrices (Heisenberg, 1926): Heisenberg a prouvé que les règles de quantification étaient les mêmes dans le cas d'un système séparable si les énergies sont définies par les valeurs propres de l'opérateur hamiltonien H , où le principe de l'introduction d'opérateurs non commutatifs est établi sur la base des propriétés des matrices, il a appliqué cette méthode pour calculer les valeurs propres de l'hamiltonien, cette manière de quantifier le mouvement, appelée "quantification canonique", est toujours fondamentalement liée à la formulation hamiltonienne du problème de mécanique classique concerné.

Le deuxième est la mécanique ondulatoire (Schrödinger, 1927) : librement associé à Heisenberg, Schrödinger a élaboré une nouvelle méthode fondée sur le concept de fonction d'onde.

Les deux formalismes sont établis sur la base de la connaissance de la formulation hamiltonienne [4] de la mécanique classique du système physique examiné.

Le but de l'équation de Klein-Gordon est de trouver une alternative l'équation de Schrödinger qui prenne en compte la relativité restreinte d'Einstein, mais cette dernière souffre de plusieurs problèmes, dont le premier est celui de la densité de probabilité négative, des énergies négatives.

Dirac ne reconnaissait pas la difficulté pour Schrödinger et Klein-Gordon de formuler une équation d'onde relative qui donne une densité de probabilité positive, En 1928, Dirac présente une équation permettant de résoudre le problème des densités de probabilité négatives de l'équation de Klein-Gordon en élaborant une équation linéaire du premier ordre. L'équation de Dirac est l'une des équations les plus fondamentales de la physique moderne, parce qu'elle est le résultat de la correspondance entre la relativité restreinte et la mécanique quantique, elle a interprété le spin comme un phénomène relativiste, ainsi que le moment magnétique de l'électron, la structure précise de l'atome d'hydrogène... etc. Finalement, la plus belle réalisation de l'équation de Dirac a consisté en la prise en charge des énergies négatives.

En 1933, Dirac estime que la formulation lagrangienne de la mécanique classique est plus essentielle que la formulation hamiltonienne, pour rédiger un système physique, il arrive à déduire que l'amplitude de la transition élémentaire est justement proportionnelle à la quantité $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$ où S est l'action classique du système [5].

En 1942, le physicien Richard Feynman a été en mesure de créer un troisième formalisme inspiré du principe de superposition [6, 7], la liaison entre l'action classique et la mécanique quantique, est basée sur l'amplitude totale, dénommée "propagateur". Bien que Dirac n'ait

considéré que le chemin classique, Feynman a démontré que tous les chemins convergent dans une seule direction. Cette formulation est très intéressante puisqu'elle a les mérites de faire le lien avec la mécanique quantique et la mécanique classique.

Feynman a tout d'abord pu régler certains problèmes fondamentaux de la mécanique quantique, tels que la particule libre et l'oscillateur harmonique et les systèmes physiques décrits par des lagrangiens quadratiques. Les travaux réalisés quelques années plus tard.

La méthode de Duru et Kleinert est basée sur des transformations spatio-temporelles : $x \mapsto f(q)$ et $t \mapsto s$ a permis de trouver des solutions à des problèmes qui ne pouvaient pas être traités dans le cadre du formalisme de Feynman. Le problème de l'atome d'hydrogène a depuis longtemps résisté aux nombreuses recherches des physiciens théoriciens. La solution à ce problème a été trouvée par I. Duru et H. Kleinert [8] qui a retenu toute l'attention de nombreux physiciens pendant une bonne quarantaine d'années. L'idée est d'utiliser des transformations de coordonnées et de temps semblables à celles que nous appliquons en mécanique classique pour régler le problème de Kapler. Cette idée géniale a permis d'ouvrir un large champ de recherche à la totalité de Feynman en leur permettant de développer des applications dans le domaine de la physique statistique [9], en théorie des champs [10], en géophysique et même en économie [9].

Le potentiel de Morse est un des modèles les mieux adaptés à de nombreux domaines de la physique et de ses différentes branches, (physique moléculaire, physique atomique et physique du solide) [11], et plus commode pour étudier le spectre énergétique des molécules diatomiques.

Nous allons déterminer, dans le cadre de ce mémoire, le formalisme des intégrales de chemin par rapport au potentiel de Morse en appliquant la méthode de Duru-Kleinert pour la transformation de l'espace-temps, la fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental qui sera utilisée dans le calcul de tout le spectre des énergies, en appliquant l'approximation présentée par Mustafa et Badawi [12, 13] pour répondre au problème de la centrifugation $(\frac{1}{r^2})$.

Ce mémoire est principalement constitué de trois chapitres.

Dans le premier chapitre, nous présentons certaines généralités sur le formalisme des intégrales de chemin qui est fondé sur le propagateur. A la lumière de son expérience, nous rédigeons les notions fondamentales des intégrales de chemin. Puis, l'expression discrète de la fonction de Green.

Nous allons continuer dans le deuxième chapitre, nous traitons par la méthode de Duru et Kleinert. Nous avons, en fait, par le biais de cette technique, en reprenant le calcul du

propagateur de forme compliquée, celle de forme plus maniable, nous finissons ce chapitre avec des exemples d'applications.

Le troisième chapitre est dédié à un court résumé de l'équation de Dirac en coordonnées sphériques, en raison de la présence d'un potentiel scalaire et d'un potentiel vectoriel égaux, nous étudions alors le spectre d'énergie et la fonction d'onde liés à l'état " l " de l'équation de Dirac du potentiel de Morse, en suivant la méthode Duru-Kleinert et en utilisant une approximation pour le terme centrifuge. Enfin, nous avons comparé nos résultats avec ceux obtenus par les autres méthodes.

Et enfin, une conclusion qui termine cette étude.

1

Formalisme des intégrales de chemin en coordonnées sphériques

1.1 Introduction

Le formalisme des intégrales de chemin en mécanique quantique de relativiste de Feynman [6] en 1948 est basée sur les résultats de la publication d'un travail de Dirac [5].

L'intégrale de chemin de Feynman est un outil puissant utilisé dans de nombreuses branches de la physique, aussi bien dans le cas relativiste que dans le cas non relativiste, par exemple : en physique statistique [9], en physique du solide [9], en électrodynamique quantique [14] etc. L'idée centrale du formalisme de Feynman est d'associer une amplitude de probabilité à chaque chemin. Cette formulation est particulièrement intéressante puisqu'elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique.

Nous présentons dans ce chapitre les notions fondamentales concernant les intégrales de chemin qui sont basée sur le propagateur. On définit d'abord le propagateur pour écrire une forme discrète de propagateur. De plus, nous écrivons le propagateur en coordonnées sphériques.

1.2 Expérience de pensée de Feynman

Feynman a construit un formalisme basé sur le principe de la superposition, pour illustrer son point de vue, en s'inspirant de l'expérience d'Young [17]. Feynman a imaginé un dispositif expérimental identique, dans lequel la source lumineuse a été remplacée par un faisceau d'électrons, ces dernières sont captées par un détecteur peut-être placé des distances r variées

du centre an d'enregistrer l'arrivée de chaque électron émis par le canon, cette expérience est illustrée par la figure(Fig1.1) à deux (02) fentes($F_1; F_2$). Les résultats enregistrés sur l'écran E sont différents, dans le cas des deux fentes ($F_1; F_2$) sont ouvertes, et dans les cas où l'une seulement est ouverte.

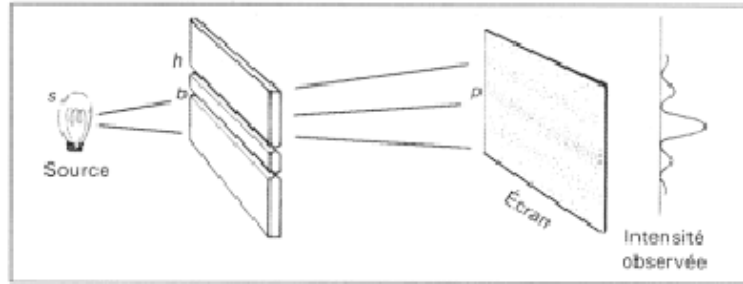


Figure 1.1 : Expérience de pensée de Feynman

La mécanique quantique prédit que:

$P(r)$ donne l'intensité enregistrée par le détecteur le long de la plaque d'enregistrement avec les deux fentes ($F_1; F_2$) ouvertes.

$P_1(r)$ représente l'intensité enregistrée sachant que la fente (F_1) est ouverte et la fente (F_2) fermée.

$P_2(r)$ représente l'intensité enregistrée sachant que la fente (F_1) est fermée et la fente (F_2) ouverte.

Tous ces résultats sont représentés sur la figure ($Fig1.2$) ci-dessous:

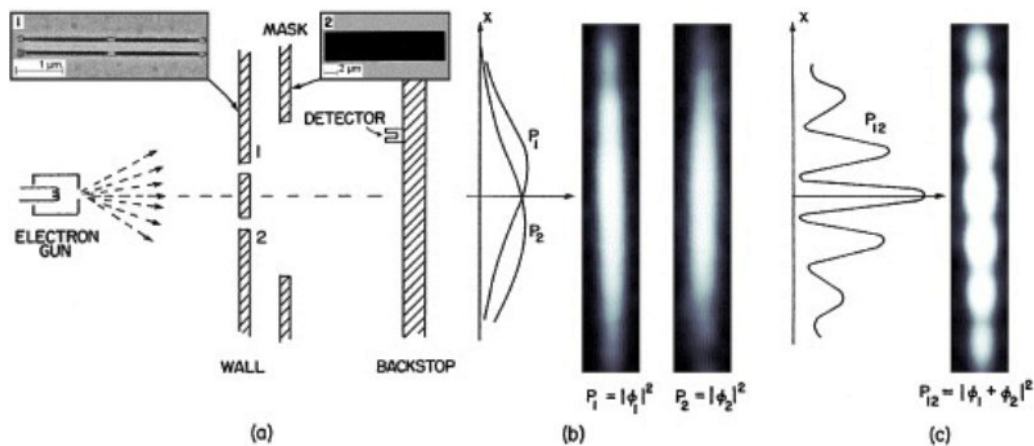


Figure 1.2 : Représentation des résultats d'expérience de Feynman

Les résultats obtenus nous permettent de constater que :

$$P(r) \neq P_1(r) + P_2(r),$$

ceci nous conduit à conclure que les électrons ont un comportement ondulatoire dans le but de donner un sens physique à ces résultats.

Feynman a introduit la notion d'amplitude de probabilité complexe $\Phi[r(t)]$ ou $P(r)$ n'est autre que son module au carré.

$$P(r) = |\Phi(r)|^2, \tag{1.1}$$

d'où

$$\begin{cases} P_1(r) = |\Phi_1(r)|^2 \\ P_2(r) = |\Phi_2(r)|^2 \end{cases},$$

l'amplitude de probabilité pour que l'électron tombe en un point situé une distance r du centre de l'écran, est donnée par la somme des deux amplitudes.

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_1 + \Phi_2 \\ |\Phi|^2 &= |\Phi_1|^2 + |\Phi_2|^2 + 2\Phi_1 \cdot \Phi_2 \end{aligned}$$

Feynman a étendu ces résultats, dans l'intervalle de temps $[t', t'']$, au cas d'une particule se déplaçant d'un point espace (r', r'') en imaginant un dispositif comportant une infinité de fentes.

1.3 Définition du propagateur de Feynman

Le propagateur qui définit l'amplitude de la probabilité d'évolution d'une particule du point \vec{r}_1 à l'instant t_1 au point \vec{r}_2 à l'instant t_2 , peut être écrit comme une somme d'une infinité d'amplitudes partielles associées à chacun des chemins d'espace-temps noté Γ qui relie les points de coordonnées $A(\vec{r}_1, t_1)$ et $B(\vec{r}_2, t_2)$, il est donné par :

$$K(B, A) = \sum_{i=0}^N \Phi_i[r(t)], \tag{1.2}$$

où

$\Phi_i [r (t)]$ est l'amplitude de probabilité pour le chemin $r (t)$.

Chaque chemin contribue au propagateur par la quantité $\exp(\frac{i}{\hbar} S_\Gamma [r (t)])$:

$$\Phi [r (t)] = N \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_\Gamma [r (t)] \right], \quad (1.3)$$

avec:

N est une constante de normalisation.

S_Γ est l'action classique évaluée le long du chemin Γ , c'est-à-dire $S_\Gamma = \int_0^T L \left(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t \right) dt$,

où $L \left(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t \right)$ est le Lagrangien de la particule.

1.4 Le propagateur de forme discrète

La difficulté dans le calcul de la fonction d'onde $\Phi [r (t)]$ relative au chemin $r (t)$, pour cela Feynman propose de discrète chaque chemin en divisant l'intervalle $[t', t'']$ sur N intervalles égaux de charge ε .

$$\begin{cases} t_0 = t' \\ t_N = t'' \end{cases} \quad \text{tels que } \varepsilon = t_{i+1} - t_i.$$

$$\begin{cases} r_B = r(t_N) \\ r_A = r(t_0) \end{cases} \quad \text{tels que } N\varepsilon = t'' - t'.$$

$\Phi(r)$ est remplacée par $\Phi(r) = \Phi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_{N-1}, r_N)$

Le propagateur relatif à une particule se mouvant à un potentiel $V(r)$ peut s'écrire comme [23]:

$$K (r_{n+1}, t_{n+1}; r_n, t_n) = K (r_{n+1}, r_n; \varepsilon) = \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{M (r_{n+1} - r_n)^2}{2\varepsilon^2} - V(r_n) \right] \right\}, \quad (1.4)$$

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

$$K(r_2, t_2; r_1, t_1) = \langle r_2 | U (t_2, t_1) | r_1 \rangle, \quad (1.5)$$

où

$U (t_2, t_1)$ est l'opérateur évolution dans le temps

$$|\Psi (t_2)\rangle = U (t_2, t_1) |\Psi (t_1)\rangle, \quad (1.6)$$

$$\langle r_2 | \Psi(t_2) \rangle = \langle r_2 | U(t_2, t_1) | \Psi(t_1) \rangle, \quad (1.7)$$

la relation de fermeture est:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |r_1\rangle \langle r_1| dr_1 = 1, \quad (1.8)$$

$$\begin{aligned} \Psi(r_2, t_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle r_2 | U(t_2, t_1) | r_1 \rangle \langle r_1 | \Psi(t_1) \rangle dr_1, \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} K(r_2, t_2; r_1, t_1) \Psi(r_1, t_1) dr_1, \end{aligned} \quad (1.9)$$

quand t_2 est voisin de t_1 c'est à dire que $t_2 = t_1 + \varepsilon$

$$\Psi(r_2, t_1 + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(r_2, t_2; r_1, t_1) \Psi(r_1, t_1) dr_1, \quad (1.10)$$

la décomposition de l'intervalle de temps $[t', t'']$ en N intervalles de temps égaux, nous permet à partir de l'équation précédente d'exprimer de propagateur global sous la forme:

$$K(r'', t''; r', t') = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int \dots \int K(r_n, r_{n-1}; \varepsilon) \prod_{n=1}^{n=N-1} K(r_n, r_{n-1}; \varepsilon) dr_n, \quad (1.11)$$

le remplacement de chaque propagateur $K(r_n, r_{n-1}; \varepsilon)$ par son expression conduit à :

$$\begin{aligned} K(r'', t''; r', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} \int \dots \int \prod_{n=1}^{N-1} dr_n \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_N[r(t)] \right], \end{aligned} \quad (1.12)$$

d'une manière condensée:

$$K(r'', t''; r', t') = D_{\vec{r}}(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_N \right], \quad (1.13)$$

avec $D_{\vec{r}}(t)$ est la mesure différentielle relative [5] à tous les chemins $\vec{r}(t)$, ce qui est donnée par:

$$D_{\vec{r}}(t) = \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} \int \prod_{n=1}^{N-1} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} d\vec{r}_n, \quad (1.14)$$

et S_N l'action totale est

$$S_N = \sum_{n=1}^N \left(\frac{M}{2\varepsilon} (r_n - r_{n-1})^2 - \varepsilon V(r_n) \right), \quad (1.15)$$

L'expression (1.12) du propagateur de Feynman, montre que tous les chemins contribuent avec la même amplitude mais avec des phases différentes. La plus grande contribution provient des chemins voisins du chemin classique. Certains propagateurs relatifs à des systèmes physiques d'écrits par des lagrangiens de formes quadratiques en r et \dot{r} , se réduisent à leurs formes classiques.

1.5 Passage du propagateur à la fonction de Green en fonction de l'énergie et la fonction d'onde

Le propagateur est exprimé en fonction de l'opérateur dévolution dans le temps comme suit [15]

$$K(r'', r'; T) = \langle r'' | U(t'', t') | r' \rangle, \quad (1.16)$$

où

$$U(t'', t') = \exp \left[-\frac{iT}{\hbar} \widehat{H} \right], \quad (1.17)$$

la relation de fermeture est:

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = 1, \quad (1.18)$$

si on remplace (1.18) dans (1.16) on obtient

$$\begin{aligned} K(r'', r'; T) &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle r'' | n \rangle \langle n | \exp \left[-\frac{iT}{\hbar} \widehat{H} \right] | r' \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle r'' | n \rangle \langle n | r' \rangle \exp \left[-\frac{iT}{\hbar} E_n \right], \end{aligned} \quad (1.19)$$

donc le propagateur (1.16) devient:

$$K(r'', r'; T) = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n(r'') \Psi_n^*(r') \exp \left[-\frac{iT}{\hbar} E_n \right], \quad (1.20)$$

avec

$$\langle r'' | n \rangle = \Psi_n(r'') \text{ et } \langle n | r' \rangle = \Psi_n^*(r')$$

Il est, par ailleurs, possible d'extraire le spectre d'énergie ainsi que la fonction d'onde correspondante d'un système physique donné, à partir de la fonction de Green cette, dernier n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur [16]. En effet:

$$G(r'', r'; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right) K(r'', r'; T), \quad (1.21)$$

en remplaçant l'expression du propagateur(1.20) dans l'équation(1.21), on trouve la fonction de Green comme suite;

$$G(r'', r'; E) = \sum_{n=0}^\infty \frac{\Psi_n^*(r') \Psi_n(r'')}{E - E_n}, \quad (1.22)$$

avec

$\Psi_n(r)$: est la fonction d'onde de système.

E_n : est l'énergie propre correspondante.

1.6 L'intégrale de chemin en coordonnées sphériques

De plupart des systèmes physiques sont inversés par rotation dans la mécanique quantique, cette propriété est 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

En fait, à la base, dans la formulation totale des intégrales de chemin en mécanique quantique, on devait partir nécessairement de coordonnées cartésiennes. La raison d'être de cette partie est essentiellement de mettre en évidence ces questions subtiles. Nous allons à présent discuter de l'intégrale de trajectoire tridimensionnelle en coordonnées sphériques. Pour ce faire, prenons en compte entre les deux instants comme le propagateur de Feynman d'une particule de masse m se déplaçant dans un espace tridimensionnel euclidien dans un potentiel $V(r)$. Ce dernier est déterminé par [9].

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) &= \int_{\vec{r}_A}^{\vec{r}_B} D_{\vec{r}}(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_A}^{t_B} \left(\frac{M}{2} (\dot{\vec{r}})^2 - V(r) \right) dt \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N-1} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\vec{r}_n \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_N \right], \end{aligned} \quad (1.23)$$

en utilisant le système des coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) défini ainsi:

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi, \\ y = r \sin \theta \sin \phi, \\ z = r \cos \theta, \end{cases} \quad (1.24)$$

avec $r > 0$, $0 \leq \theta < \pi$ et $0 \leq \phi < 2\pi$,

l'élément de volume $d\vec{r}$ en coordonnées sphériques est donné par :

$$d\vec{r} = r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr,$$

l'intégrale de chemin (1.23) peut être réécrite en coordonnées sphériques ainsi:

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} \\ &\times \prod_{n=1}^N \left[\int_0^\theta \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_n^2 \sin \theta_n \, dr_n \, d\theta_n \, d\phi_n \right] \\ &\times \prod_{n=1}^{N+1} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(n, n-1) \right], \end{aligned} \quad (1.25)$$

avec l'action élémentaire

$$S(n, n-1) = \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_n^2 + r_{n-1}^2 - 2r_n r_{n-1} \cos \theta_{n,n-1}) - \varepsilon V(r_n) \right], \quad (1.26)$$

et

$$\cos \theta_{n,n-1} = (\vec{r}_n; \vec{r}_{n-1}),$$

$$\cos \theta_{n,n-1} =_{n-1} \cos \theta_n, \cos \theta_{n-1} + \sin \theta_n \sin \theta_{n-1} \cos(\phi_n - \phi_{n-1}), \quad (1.27)$$

la mesure

$$\prod_{n=1}^{N-1} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int d\vec{r}_n \right], \quad (1.28)$$

s'écrit alors dans le système des coordonnées sphériques sous la forme :

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{M} \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^N \left[\int_0^\theta \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n \right], \quad (1.29)$$

toutefois, l'expression de propagateur précédente n'est pas appropriée pour l'intégration, en raison de la présence des termes $-(i/\hbar)(M/\varepsilon)2r_n r_{n-1} \cos \theta_{n,n-1}$ dans l'action. Cette dernière est séparable en une partie radiale et une partie angulaire. Pour une évaluation explicite de la partie angulaire du propagateur, nous allons utiliser la formule suivante [18],

$$e^{z \cos \theta} = \left(\frac{2}{z} \right)^\nu \Gamma(\nu) \sum_{l=0}^{\infty} (l + \nu) I_{l+\nu}(z) C_l^\nu(\cos \theta), \quad (1.30)$$

valable pour tout $(\nu \neq 0, -1, -2, -3, \dots)$

où $I_\mu(z)$ sont les fonctions de Bessel modifiées.

$C_l^\nu(\cos \theta)$ représentent les polynômes de Gegenbauer généralisant les polynômes de Legendre.

Pour simplifier les calculs, on prend $\nu = \frac{1}{2}$. On aura alors :

$$\begin{aligned} e^{z \cos \theta} &= \left(\frac{2}{z} \right)^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \sum_{l=0}^{\infty} \left(l + \frac{1}{2} \right) I_{l+\frac{1}{2}}(z) C_l^{\frac{1}{2}}(\cos \theta) \\ &= \left(\frac{2\pi}{z} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \left(l + \frac{1}{2} \right) I_{l+\frac{1}{2}}(z) C_l^{\frac{1}{2}}(\cos \theta) \\ &= \left(\frac{\pi}{2z} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) I_{l+\frac{1}{2}}(z) P_l(\cos \theta), \end{aligned} \quad (1.31)$$

où $P_l(\cos \theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos \theta$.

On arrive à l'expression du propagateur suivante après le remplacement de la dernière formule:

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \prod_{n=1}^N \left[\int_0^\theta \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r_n^2 \sin \theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_n^2 + r_{n-1}^2) - \varepsilon V(r_n) \right] \right\} \\ &\times \left[\prod_{n=1}^{N+1} \sqrt{\frac{\pi i \hbar \varepsilon}{2M r_n r_{n-1}}} \sum_{l_n=0}^{\infty} (2l_n + 1) \right. \\ &\left. \times I_{l_n+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_n r_{n-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_n}^{\frac{1}{2}}(\cos \theta_{n,n-1}), \right] \end{aligned} \quad (1.32)$$

tels que

$$l_n = l \quad \forall \quad n = 1, \dots, N + 1$$

ou encore

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \sum_{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N+1}=0} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j^2 dr_j \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left(\sqrt{\frac{\pi i \hbar \varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}}} \right) \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) \right. \\
 &\quad \left. C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos \theta_{j,j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\phi_j \right] \\
 &\quad \left[(2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_{N+1}}^{\frac{1}{2}}(\cos \theta_{N+1,N}) \right] \\
 &\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}, \tag{1.33}
 \end{aligned}$$

qui peut se mettre aussi sous la forme

$$\begin{aligned}
 K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{4\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{(N+1)} \sum_{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N+1}=0} \left(\frac{1}{r_B r_A} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^\infty r_j dr_j \right] \\
 &\times \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (2l_j + 1) I_{l_j + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos \theta_{j,j-1}) \sin \theta_j d\theta_j d\phi_j \right] \\
 &\times \left[(2l_{N+1} + 1) I_{l_{N+1} + \frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) C_{l_{N+1}}^{\frac{1}{2}}(\cos \theta_{N+1,N}) \right] \\
 &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}, \tag{1.34}
 \end{aligned}$$

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

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

et à l'aide du théorème d'addition pour les harmoniques sphériques [19]

on aura

$$P_l(\cos \Delta\theta_n) = \frac{4\pi}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_n, \phi_n) Y_{l,m}^*(\theta_{n-1}, \phi_{n-1}), \tag{1.35}$$

où on somme sur tous les nombres quantiques azimutaux (magnétiques) m , le développement (1.31) devient:

$$e^{z \cos \theta} = \left[2\pi \left(\sqrt{\frac{2\pi}{z}} \right) \sum_{l=0}^{\infty} I_{l+\frac{1}{2}}(z) \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta_n, \phi_n) Y_{l,m}^*(\theta_{n-1}, \phi_{n-1}), \right] \quad (1.36)$$

et en insérant cette dernière dans (1.34), on obtient

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{4\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{(N+1)} \sum_{l_1, l_2, l_3, \dots, l_{N+1}=0} \left(\frac{1}{r_B r_A} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^N \int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\ &\times \prod_{j=1}^N \left[I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{l_j, m_j}(\theta_n, \phi_n) Y_{l_j, m_j}^*(\theta_{n-1}, \phi_{n-1}) \right. \\ &\quad \left. \sin \theta_j d\theta_j d\phi_j \right] \\ &\times \left[I_{l_{N+1}+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_N r_{N+1}}{i \hbar \varepsilon} \right) \times \sum_{m=-l_{N+1}}^{l_{N+1}} Y_{l_{N+1}, m}(\theta_{N+1}, \phi_{N+1}) \right] \\ &\times Y_{l_{N+1}, m}^*(\theta_N, \phi_N) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}, \quad (1.37) \end{aligned}$$

l'orthogonalité des harmoniques sphériques décrite par la relation

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l,m}^*(\theta, \phi) Y_{l',m'}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (1.38)$$

nous permet enfin de ramener le propagateur à la forme

$$K(\vec{r}_B, t_B; \vec{r}_A, t_A) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} K(r_B, t_B; r_A, t_A) P_l(\cos \theta_{i,f}), \quad (1.39)$$

où

$$\begin{aligned} K(r_B, t_B; r_A, t_A) &= \left(\frac{M}{i \hbar \varepsilon} \right)^{N+1} \left(\frac{1}{r_B r_A} \right)^{\frac{1}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left[\int_0^{\infty} r_j dr_j \right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{M r_j r_{j-1}}{i \hbar \varepsilon} \right) \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}, \quad (1.40) \end{aligned}$$

et $\theta_{i,f} = (\vec{r}_B, \vec{r}_A)$

Le propagateur radial $K(r_B, t_B; r_A, t_A)$ peut être simplifié. En effet, compte du comportement asymptotique des fonctions de Bessel modifiées

$$I_\nu \left(\frac{z}{\varepsilon} \right) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\varepsilon}{2\pi z} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{z}{\varepsilon} - \frac{1}{2} \frac{\varepsilon}{z} \left(\nu^2 - \frac{1}{4} \right) \right\}, \quad (1.41)$$

il devient

$$\begin{aligned} K(r_B, t_B; r_A, t_A) &= K(r_B, r_A, T) = \left(\frac{1}{r_B r_A} \right) \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar} \right)^{\frac{N+1}{2}} \prod_{j=1}^N \left[\int_0^\infty dr_j \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{M}{2\varepsilon} (r_j^2 + r_{j-1}^2) - \frac{l(l+1)\hbar^2\varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}} - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}, \end{aligned}$$

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

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

1.7 L'équation de Dirac en coordonnées sphériques

L'équation de Dirac est l'une des équations les plus importantes de la physique moderne, puisqu'elle est le résultat de la corrélation de la relativité restreinte et de la mécanique quantique, cette équation relativiste contient deux potentiels, l'un scalaire $S(r)$ et l'autre vectoriel $V(r)$. Comme ce problème est à symétrie sphérique nous aimerions travailler dans un système de coordonnées sphériques. Par conséquent, nous devons transformer l'hamiltonien de l'équation de Dirac de coordonnées cartésiennes en coordonnées sphériques, ceci est fait en détail dans [19]. Ce qui donne le système d'équations de Dirac dans le cas du potentiel scalaire et du potentiel vectoriel en coordonnées sphériques.

L'hamiltonien de l'équation de Dirac de coordonnées cartésiennes s'écrit comme suite:

$$H\Psi(x) = \left(c\alpha \cdot \left(p - \frac{q}{c} \cdot A \right) + \beta (Mc^2 + S(x)) + q\phi(x) \right) \Psi(x), \quad (1.42)$$

pour un potentiel symétrie sphérique

$$A = 0, \quad q\phi(x) \rightarrow q\phi(r) \rightarrow V(r), \quad S(x) \rightarrow S(r), \quad (1.43)$$

$S(r)$ est potentiel scalaire, $q\phi(r) = V(r)$ et A sont des potentiels vectoriels, donc On obtient l'équation de Dirac indépendante du temps en coordonnées sphériques s'écrit comme suite:

$$H\Psi(\vec{r}) = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta (Mc^2 + S(r)) + V(r)) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (1.44)$$

où M est la masse de la particule.

E est présenté l'énergie de la particule.

\vec{p} opérateur du moument respective

α et β 4×4 de cette équation est présenté les matrices de Dirac,

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ \sigma^j & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta_i = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

tels que

I : est la matrice identité 2×2

σ^i ($i = 1, 2, 3$) sont les matrices de Pauli:

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Pour exprimer cet hamiltonien dans le système des coordonnées sphérique il faut de trouver l'expression de terme $(\vec{\alpha} \cdot \vec{P})$ dans ce système de coordonnées.

tout d'abord, On présente la relations suivantes [21]:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}), \quad (1.45)$$

on calculent le double produit scalaire $(\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) (\vec{\alpha} \cdot \vec{P})$

$$\begin{aligned} (\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) (\vec{\alpha} \cdot \vec{P}) &= \vec{r} \cdot \vec{P} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{r} \times \vec{P}) \\ &= \vec{r} \cdot \vec{P} + i \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \\ &= r P_r + i (\hbar + \vec{\sigma} \cdot \vec{L}), \end{aligned} \quad (1.46)$$

tell que:

$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$: représente le moment cinétique orbital

en effet, on a d'une part

$$\begin{aligned} \vec{r} \cdot \vec{P} &= -i\hbar \left(x \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + y \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + z \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{r \partial r} + y \frac{\partial}{r \partial r} + z \frac{\partial}{r \partial r} \right) \\ &= -i\hbar \left(\frac{x^2 + y^2 + z^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ &= -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned} \quad (1.47)$$

et d'autre part, si nous définissons l'impulsion radiale par $P_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right)$ [20], nous obtenons:

$$\begin{aligned} P_r &= \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \right) = P_r = \frac{1}{2} \left(\frac{\vec{P} \cdot \vec{r}}{r} + \vec{r} \cdot \left(\vec{P} \frac{1}{r} \right) + 2 \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{P} \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{3}{r} - \frac{1}{r} + 2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right), \end{aligned}$$

il s'ensuit que

$$rP_r = -i\hbar r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} - i\hbar, \quad (1.48)$$

ce qui donne

$$\vec{r} \cdot \vec{P} = rP_r + i\hbar, \quad (1.49)$$

définissons la vitesse radiale α_r par:

$$\alpha_r = \alpha \cdot \frac{\vec{r}}{r} \Rightarrow \frac{\alpha_r}{r} = \vec{\alpha} \cdot \frac{\vec{r}}{r^2},$$

ainsi, on aura :

$$\alpha_r^2 = (\vec{\alpha} \cdot \frac{\vec{r}}{r})(\vec{\alpha} \cdot \frac{\vec{r}}{r}) = \frac{r^2}{r^2} + i\sigma (\vec{r} \wedge \vec{r}) = 1, \quad (1.50)$$

en multipliant (1.46) à gauche par $\frac{\alpha_r}{r}$ on obtient

$$\begin{aligned} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} &\equiv (\vec{\alpha} \cdot \frac{\vec{r}}{r^2})(\vec{\alpha} \cdot \vec{r})(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) = \frac{\alpha_r}{r} [r \cdot p_r + i(\hbar + \vec{\sigma} \cdot \vec{L})] \\ \vec{\alpha} \cdot \vec{p} &= \alpha_r p_r + i \frac{\alpha_r}{r} (\hbar + \vec{\sigma} \cdot \vec{L}), \end{aligned} \quad (1.51)$$

on obtient l'équation de Dirac indépendante du temps en coordonnées sphériques après substitution de la dernière équation

$$\begin{aligned} E_{nk} \Psi_{nk}(\vec{r}) &= H \Psi_{nk}(\vec{r}) \\ &= \left(\alpha_r p_r + i \frac{\alpha_r}{r} (\hbar + \vec{\sigma} \cdot \vec{L}) + \beta (Mc^2 + S(r)) + V(r) \right) \Psi_{nk}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (1.52)$$

il faut d'abord calculer $(\hbar + \vec{\sigma} \cdot \vec{L}) \Psi_{nk}(\vec{r})$ et on a le moment cinétique total est donné par les termes du moment orbital \vec{L} et spin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} = \frac{3}{4} \hbar^2$ par la relation suivante

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, ou \vec{L} commute avec \vec{S} , et on définit l'opérateur spin-orbite par la relation $k = -\beta \left(1 + \frac{1}{\hbar} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}\right)$.

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad (1.53)$$

ce qui implique

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{S} \cdot \vec{L} \\ &= \vec{L}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \vec{\sigma}^2 + \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \\ &= \vec{L}^2 + \frac{3\hbar^2}{4} + \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L}, \end{aligned} \quad (1.54)$$

de telle sorte à avoir le résultat suivant :

$$\hbar + \vec{\sigma} \cdot \vec{L} = \frac{1}{\hbar} \left(J^2 - L^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right), \quad (1.55)$$

ainsi, l'hamiltonien (1.52) dans le système des coordonnées sphériques s'écrit

$$H\Psi_{nk}(\vec{r}) = \left(c\alpha_r \cdot p_r + i\frac{c\alpha_r}{r} \left(J^2 - L^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) + \beta (Mc^2 + S(r)) + V(r) \right) \Psi_{nk}(\vec{r}), \quad (1.56)$$

L'hamiltonien H commute à la fois avec l'opérateur de la parité P , le carré de l'opérateur du moment angulaire J^2 et la troisième composante J_z de \vec{J} , donc la fonction d'onde Ψ est une fonction propre de P^2 et J^2 et J_z tels que

$$J^2\Psi = \hbar^2 j(j+1)\Psi. \quad (1.57)$$

$$J_z\Psi = M\hbar\Psi. \quad (1.58)$$

$$P\Psi = (-1)^{j+\frac{\eta}{2}}\Psi. \quad (1.59)$$

où

$$\eta = \begin{cases} +1 & \text{si la parité est } (-1)^{j+\frac{1}{2}}, \\ -1 & \text{si la parité est } (-1)^{j-\frac{1}{2}}, \end{cases}$$

mettons Ψ sous la forme

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (1.60)$$

où ϕ et χ sont deux spineurs à déterminer

donc, on obtient, pour $l = j \pm \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} (\hbar + \vec{\sigma} \cdot L) Y_{j,m}^l(\theta, \phi) &= \frac{1}{\hbar} \left(J^2 - L^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(j(j+1)\hbar^2 - l(l+1)\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \\ &= \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \hbar Y_{j,m}^l(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (1.61)$$

pour $\tilde{l} = j \pm \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} (\hbar + \vec{\sigma} \cdot L) Y_{j,m}^{\tilde{l}}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\hbar} \left(J^2 - L^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) Y_{j,m}^{\tilde{l}}(\theta, \phi) \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(j(j+1)\hbar^2 - l(l+1)\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{4} \right) Y_{j,m}^{\tilde{l}}(\theta, \phi) \\ &= \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \hbar Y_{j,m}^{\tilde{l}}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (1.62)$$

on peut condenser ces deux résultats sous la forme [21]:

$$(\hbar + \vec{\sigma} \cdot L) \Psi_{nk} = \mp \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \hbar \beta \Psi_{nk},$$

finalement on peut écrire:

$$\left\{ -i\hbar \frac{c\alpha_r}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} r \pm \beta \left(j + \frac{1}{2} \right) \right] + \beta (Mc^2 + S(r)) + V(r) - E_{nk} \right\} \Psi_{nk}(r, \theta, \phi) = 0, \quad (1.63)$$

avec

E_{nk} est le niveau d'énergie du système.

$V(r)$ et $S(r)$ sont des potentiels à symétrie sphérique.

$\Psi_{nk}(r, \theta, \phi)$ est la fonction d'onde correspondante.

La symétrie sphérique de cette équation nous permet d'écrire la fonction d'onde comme [24]

$$\Psi_{nk}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F_{nk}(r) Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \\ i G_{nk}(r) Y_{j,m}^{\tilde{l}}(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \quad (1.64)$$

où

F_{nk} et G_{nk} représentent les composantes supérieure et inférieure de Dirac spineur.

$Y_{j,m}^l(\theta, \phi)$ est les harmoniques sphériques de la composante de spin.

$Y_{j,m}^{\tilde{l}}(\theta, \phi)$ est celle de la composante de pseudo spin.

j est le moment cinétique.

l et \tilde{l} : sont respectivement des nombres quantiques orbitaux et pseudo-orbitaux.

m est le nombre quantique magnétique.

k on définit l'opérateur spin-orbite

1.8 L'équation de Dirac d'un potentiel central

En remplace l'équation (1.64) dans (1.63) et on trouve le système suivant :

$$\begin{cases} \left\{ -i\hbar \frac{c\alpha_r}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} r \pm (j + \frac{1}{2}) \right] + (Mc^2 + S(r)) + V(r) - E_{nk} \right\} \frac{F_{nk}(r)}{r} Y_{j,m}^l(\theta, \phi) = 0, \\ \left\{ [-i\hbar \frac{c\alpha_r}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} r \pm (j + \frac{1}{2}) \right] + (Mc^2 + S(r)) + V(r) - E_{nk}] \right\} i \frac{G_{nk}(r)}{r} Y_{j,m}^l(\theta, \phi) = 0, \end{cases}, \quad (1.65)$$

pour $k = \pm(j + \frac{1}{2})$

$$\begin{aligned} & -i\hbar c \alpha_r \begin{pmatrix} \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{k}{r} \right] & 0 \\ 0 & \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{K}{r} \right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{F_{nk}(r)}{r} Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \\ i \frac{G_{nk}(r)}{r} Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (Mc^2 - V(r) + S(r)) + E_{nK} & 0 \\ 0 & (Mc^2 + V(r) + S(r)) - E_{nK} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \frac{G_{nk}(r)}{r} Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \\ \frac{F_{nk}(r)}{r} Y_{j,m}^l(\theta, \phi) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

le calcul des deux côtés de cette équation, conduit au système d'équations suivantes pour $F_{nk}(r)$ et $G_{nk}(r)$.

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) F_{nk}(r) = \frac{(Mc^2 + E_{nK} - V(r) + S(r))}{\hbar c} G_{nk}(r), \quad (1.66)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r} \right) G_{nk}(r) = \frac{(Mc^2 - E_{nK} + V(r) + S(r))}{\hbar c} F_{nk}(r), \quad (1.67)$$

dans l'équation de Dirac la symétrie de spin : $\Delta(r) = V(r) - S(r) = cte$, la symétrie de pseudo-spin: $\Sigma(r) = V(r) + S(r) = cte$

ce qui donne

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r}\right) F_{nk}(r) = \frac{(Mc^2 + E_{nk} - \Delta(r))}{\hbar c} G_{nk}(r), \quad (1.68)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r}\right) G_{nk}(r) = \frac{(Mc^2 - E_{nk} + \Sigma(r))}{\hbar c} F_{nk}(r), \quad (1.69)$$

en éliminant $G_{nk}(r)$ dans l'éq (1.68) et $F_{nk}(r)$ dans l'éq (1.69)

dans l'équation de (1.68) la relation suivante:

$$G_{nk}(r) = \frac{\hbar c}{(Mc^2 + E_{nk} - \Delta(r))} \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r}\right) F_{nk}(r), \quad (1.70)$$

en remplaçant $G_{nk}(r)$, dans l'équation de (1.69), et nous obtenons les deux équations différentielles du second ordre suivantes satisfaites par les composantes supérieure et inférieure du spineur de Dirac, respectivement:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 F_{nk}(r)}{dr^2} - \frac{k(k+1)}{r^2} F_{nk}(r) - \frac{(Mc^2 + E_{nk} - \Delta(r))((Mc^2 - E_{nk} + \Sigma(r)))}{\hbar^2 c^2} F_{nk}(r) \\ & + \frac{\frac{d\Delta(r)}{dr} \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r}\right) F_{nk}(r)}{(Mc^2 + E_{nk} - \Delta(r))} = 0, \end{aligned} \quad (1.71)$$

De la même façon on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 G_{nk}(r)}{dr^2} - \frac{k(k-1)}{r^2} G_{nk}(r) - \frac{(Mc^2 + E_{nk} - \Delta(r))((Mc^2 - E_{nk} + \Sigma(r)))}{\hbar^2 c^2} G_{nk}(r) \\ & + \frac{\frac{d\Sigma(r)}{dr} \left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r}\right) G_{nk}(r)}{Mc^2 - E_{nk} + \Sigma(r)} = 0. \end{aligned} \quad (1.72)$$

1.8.1 Cas de spin symétrique

Pour que la condition de la symétrie de spin $\Delta(r) = c_s$ alors que $\frac{d\Delta(r)}{dr} = 0$, ce qui donne:

$$\frac{d^2 F_{nk}(r)}{dr^2} - \frac{k(k+1)}{r^2} F_{nk}(r) - \frac{(Mc^2 + E_{nk} - c_s)((Mc^2 - E_{nK} + \Sigma(r)))}{\hbar^2 c^2} F_{nk}(r) = 0,$$

où

$$\frac{\frac{d\Delta(r)}{dr} \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) F_{nk}(r)}{(Mc^2 + E_{nk} - \Delta(r))} = 0 \quad (1.73)$$

d'où $k(k+1) = l(l+1)$.

L'équation radiale de Dirac dans le cas de spin s'écrit comme:

$$\frac{d^2 F_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[\frac{E_{nl}^2 - M^2 c^4 + c_s (Mc^2 - E_{nl})}{2Mc^2} - \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{2Mc^2} \Sigma(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right] F_{nl}(r) = 0. \quad (1.74)$$

1.8.2 Cas de pseudo-spin symétrique

Pour que la condition de la symétrie du pseudo-spin $\Sigma(r) = c_{ps}$ alors que $\frac{d\Sigma(r)}{dr} = 0$, ce qui donne:

$$\frac{d^2 G_{nk}(r)}{dr^2} - \frac{k(k-1)}{r^2} G_{nk}(r) - \frac{(Mc^2 + E_{nK} - \Delta(r))((Mc^2 - E_{nK} + c_{ps}))}{\hbar^2 c^2} G_{nk}(r) = 0,$$

où

$$\frac{\frac{d\Sigma(r)}{dr} \left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r} \right) G_{nk}(r)}{Mc^2 - E_{nk} + \Sigma(r)} = 0 \quad (1.75)$$

d'où $k(k-1) = \tilde{l}(\tilde{l}+1)$

l'équation radiale de Dirac dans le cas de pseudo-spin s'écrit comme:

$$\frac{d^2 G_{n\tilde{l}}(r)}{dr^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[\frac{E_{n\tilde{l}}^2 - M^2 c^4 + c_{ps} (mc^2 - E_{n\tilde{l}})}{2Mc^2} - \frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{2Mc^2} \Delta(r) - \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2Mr^2} \right] G_{n\tilde{l}}(r) = 0, \quad (1.76)$$

l'équation de Schrödinger s'écrit comme:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left((E - V(r)) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} \right) R(r) = 0, \quad (1.77)$$

d'où

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2M}{\hbar^2} (E - V_{eff}(r)) R(r) = 0,$$

par identification de l'équation de Schrödinger et l'équation de Dirac radial dans les deux cas:

Pour de spin symétrique

$$E = \frac{E_{nl}^2 - M^2 c^4 + c_s (M c^2 - E_{nl})}{2M c^2}, V_{eff}(r) = \frac{M c^2 + E_{nl} - c_s \Sigma(r)}{2M c^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M r^2}.$$

Pour de pseudo-spin symétrique

$$E = \frac{E_{\tilde{n}l}^2 - M^2 c^4 + c_{ps} (M c^2 - E_{\tilde{n}l})}{2M c^2}, V_{eff}(r) = \frac{M c^2 + E_{\tilde{n}l} - c_{ps} \Delta(r)}{2M c^2} + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2M r^2}.$$

2

Les transformations de coordonnées et de temps de Duru-Kleinert dans le formalisme de Feynman

2.1 Introduction

L'oscillateur harmonique et l'atome d'hydrogène sont deux problèmes bien connus en mécanique quantique, le formalisme des intégrales de chemin de Feynman a réussi à calculer leurs propagateurs. Cependant, ce formalisme a rencontré des difficultés dans l'étude de l'atome d'hydrogène à cause de la forme du propagateur qui est compliquée. Il a fallu attendre l'année 1979 pour que ce problème soit résolu, Duru et Kleinert ont élaboré une transformation spatio-temporelle appelée la transformation de Duru-Kleinert [8]. Ils ont appliqué pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stiefel (KS)[25], dans l'intégrale de chemin de potentiel de Coulomb puis ils sont réussis à trouver un traitement pour l'atome d'hydrogène car ils sont utilisés une transformation spatiale associée par une transformation locale du temps.

La technique de Duru-Kleinert repose sur une transformation de coordonnées $r \rightarrow q$ [26] suivie d'une transformation temporelle [9]

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

Transformation globale du temps : Transforme le paramètre temps (t) en un nouveau paramètre τ (τ appelé pseudo-temps).

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

Transformation locale du temps : Elle dépend de la position ou $ds = f[r(t)] dt$, avec $f[r(t)]$ est une fonction connue de la position r .

Ces deux transformations sont les plus utiles seulement lorsqu'ont les combinées avec une transformation de coordonnées appropriées.

Nous présentons dans ce chapitre les types de transformations spatio-temporelles, ensuite nous développons la méthode dans le cadre du formalisme des intégrales de chemin.

2.2 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 aux potentiels singuliers. Cette transformation remplace l'intégrale de la trajectoire de Feynman (qui n'existe donc pas) par une autre, convergent bien défini [8].

2.3 Les transformations d'espace-temps dans le formalisme de Feynman

La méthode de Duru-Kleinert peut passer d'un propagateur de départ difficile calculer une forme plus maniable. Cette technique repose sur une transformation de coordonnées $r \rightarrow q$ suivie d'une transformation temporelle $t \rightarrow \tau$. Pour mieux illustrer cette méthode, nous considérons une particule repérée par les positions a et b aux instants fixés t' et t'' respectivement. Dans l'espace des phases, le propagateur qui gouverne son évolution dans le potentiel $V(r)$ de forme compliquée [9] est défini par l'intégrale de chemin de Feynman :

$$K(r'', t''; r', t') = \int \dots \int D[r(t)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L dt \right], \quad (2.2)$$

où

$$L = \frac{M}{2} \dot{r}^2 - V(r), \quad (2.3)$$

sous une forme discrète, ce propagateur (2.3) devient :

$$K(r'', t''; r', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \int \dots \int \left[\exp \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S_j \right] \prod_{j=1}^{N-1} dr_j, \quad (2.4)$$

avec

$$S_j = \frac{M}{2\varepsilon} (r_j - r_{j-1})^2 - \varepsilon V(r_j). \quad (2.5)$$

En premier, nous commençons par la transformation de coordonnées $r = f(q)$, ensuite par la transformation locale du temps.

Transformation de coordonnée

Cette dépendance spatiale est résolue par une transformation de coordonnées suivante :

$$r = f(q). \quad (2.6)$$

Le terme $r_j - r_{j-1}$ apparaissant d'une manière explicite dans l'équation ci-dessus s'écrit :

$$\Delta r_j = r_j - r_{j-1}, \quad (2.7)$$

avec

$$\begin{cases} r_j = f(q_j) \\ r_{j-1} = f(q_{j-1}) \end{cases}, \quad (2.8)$$

nous utilisons la notion de la midi-point :

$$\tilde{q}_j = \frac{q_j + q_{j-1}}{2}, \quad (2.9)$$

et

$$\Delta q_j = q_j - q_{j-1}, \quad (2.10)$$

on peut exprimer q_j et q_{j-1} en fonction du \tilde{q}_j et Δq_j

$$\begin{cases} q_j = \tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2} \\ q_{j-1} = \tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2} \end{cases}, \quad (2.11)$$

le développement du $f(q_j)$ et $f(q_{j-1})$ en série de Taylor conduit :

$$f(q_j) = f\left(\tilde{q}_j + \frac{\Delta q_j}{2}\right) \simeq f(\tilde{q}_j) + f'(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^3}{48}, \quad (2.12)$$

de même,

$$f(q_{j-1}) = f\left(\tilde{q}_j - \frac{\Delta q_j}{2}\right) \simeq f(\tilde{q}_j) - f'(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8} - f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{48}, \quad (2.13)$$

le développement de Δr_j au 3^{eme} ordre conduit à:

$$\Delta r_j = f(q_j) - f(q_{j-1}) = f'^2(\tilde{q}_j)\Delta q_j + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^3}{24}, \quad (2.14)$$

ce qui donne :

$$(\Delta r_j)^2 = f'^2(\tilde{q}_j) (\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'^2(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right], \quad (2.15)$$

le terme énergie cinétique aura pour forme:

$$\frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 = \frac{M}{2\varepsilon} f'^2(\tilde{q}_j) (\Delta q_j)^2 \left[1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'^2(\tilde{q}_j)} (\Delta q_j)^2 \right], \quad (2.16)$$

en effet, le terme représentant l'énergie potentielle V_j se transforme comme suit :

$$\varepsilon V(r_j) = \varepsilon V[f(\tilde{q}_j)] + 0[\varepsilon]. \quad (2.17)$$

Transformation locale de temps

Effectuons, dans le but d'écrire le terme énergie cinétique sous sa forme standard, un second changement de variable $t \rightarrow s$ ou la nouvelle variable temps s est reliée à t par :

$$dt = [f'(q(s))]^2 ds, \quad (2.18)$$

le nouvel intervalle de temps σ_j est :

$$\sigma_j = s_j - s_{j-1}, \quad (2.19)$$

on a ε et σ_j sont deux paramètres infinitésimaux correspondant respectivement à t et τ , varient l'équation :

$$\varepsilon = f'(q_j) f'(q_{j-1}) \sigma_j, \quad (2.20)$$

de plus, le développement de Taylor de $f'(q_j)$ et $f'(q_{j-1})$ est :

$$f'(q_j) = f'(\tilde{q}_j) + f^{(2)}(\tilde{q}_j)\frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j)\frac{(\Delta q_j)^2}{8}, \quad (2.21)$$

et

$$f'(q_{j-1}) = f'(\tilde{q}_j) - f^{(2)}(\tilde{q}_j) \frac{\Delta q_j}{2} + f^{(3)}(\tilde{q}_j) \frac{(\Delta q_j)^2}{8}, \quad (2.22)$$

on note que :

$$f'(\tilde{q}_j) = f'_j, \quad (2.23)$$

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

$$f'(q_j) f'(q_{j-1}) = f'^2(\tilde{q}_j) \left[1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left\{ \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} - \left(\frac{f^{(2)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} \right)^2 \right\} \right], \quad (2.24)$$

après la transformation, l'expression de ε est donnée par :

$$\varepsilon = \sigma_j f_j'^2 \left[1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left\{ \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} - \left(\frac{f^{(2)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} \right)^2 \right\} \right], \quad (2.25)$$

donc l'énergie cinétique devient :

$$\begin{aligned} \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 &= \frac{M}{2} f'_j (\Delta q_j)^2 \left[\frac{f_j^{(3)} (\Delta q_j)^2}{f'_j} \right] \\ &\times \frac{1}{\sigma_j f'_j \left[1 + \frac{1}{4} (\Delta q_j)^2 \left\{ \frac{f^{(3)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} - \left(\frac{f^{(2)}(\tilde{q}_j)}{f'(\tilde{q}_j)} \right)^2 \right\} \right]}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

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

$$\frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 = \frac{M}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 + \frac{M}{8\sigma_j} (\Delta q_j)^4 \left(\frac{f_j'^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(2)}}{f'_j} \right), \quad (2.27)$$

tels que la correction quantique est:

$$\Delta V_j = \frac{3\hbar^2}{8M} \left(\frac{f_j'^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(2)}}{f'_j} \right), \quad (2.28)$$

le terme exponentiel du propagateur est donné par:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_j\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j f_j'^2 V_j + \frac{M}{8\sigma_j} (\Delta q_j)^4 \left(\frac{f_j'^2}{f_j'^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(2)}}{f'_j} \right) \right\}\right], \quad (2.29)$$

alors que le terme énergie potentielle (2.17) s'écrira comme :

$$\varepsilon V(r_j) = \sigma_j f_j'^2 V[f_j] = \sigma_j f_j'^2 V_j. \quad (2.30)$$

Transformation des mesures

Sachant que :

$$dr_j = f'(q_j) dq_j, \quad (2.31)$$

considérons la mesure :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dr_j = \prod_{j=1}^{N-1} f'(q_j) dq_j, \quad (2.32)$$

donc la relation de cette dernière devient :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dr_j = [f'(q_0) f'(q_N)]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=0}^N (f'(q_j) f'(q_{j-1}))^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j, \quad (2.33)$$

en utilisant la relation de la démocratie :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dq_j = \prod_{j=0}^N d(\Delta q_j),$$

et le résultat de l'intégrale suivant :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ar^2 - br^4) dr = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-ar^2 - \frac{3b}{4a^2}\right) dr, \quad (2.34)$$

dans notre cas :

$$\begin{cases} a = \frac{M}{2i\hbar\sigma_j} \\ b = \frac{M\Delta V_j}{8i\hbar\sigma_j} \end{cases}, \quad (2.35)$$

nous arrivons :

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

la nouvelle forme du propagateur $K(r'', t''; r', t')$ prend la forme suivante:

$$\begin{aligned} K(r'', t''; r', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} [f'(q_b) f'(q_a)]^{-\frac{1}{2}} \prod_j^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \sigma_j} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_j^{N-1} dq_j \\ &\times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M}{2\sigma_j} (\Delta q_j)^2 - \sigma_j \left[f_j'^2 V_j + \Delta V_j \right] \right\}\right], \end{aligned} \quad (2.37)$$

le pseudo temps "s" vérifie la condition :

$$T = t'' - t' = \int_{s'}^{s''} ds [f'(q(s))], \quad (2.38)$$

cette condition peut être formulée comme suit :

$$[f'(q'') f'(q')] \int_0^\infty \delta \left(T - \int_{s'}^{s''} ds [f'(q(s))] \right) = 1., \quad (2.39)$$

le propagateur après l'injection de la fonction delta de Dirac relative aux paramètres t et s , devient :

$$K(q'', q', s) = \lim_{N \rightarrow \infty} [f'(q'') f'(q')] \int_0^\infty \delta \left(T - \int_{s'}^{s''} ds [f'(q(s))] \right) K_N ds, \quad (2.40)$$

où K_N est donné [8] par :

$$K_N = [f'(q'') f'(q')]^{-\frac{1}{2}} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2\pi i \hbar \sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_j} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j, \quad (2.41)$$

la transformation de Fourier d'une fonction est :

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \bar{\Psi}(E) dE, \quad (2.42)$$

et

$$\bar{\Psi}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{+\infty} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \Psi(t) dt. \quad (2.43)$$

Nous pouvons montrer que :

$$\delta(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad (2.44)$$

et

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dE, \quad (2.45)$$

d'où alors :

$$\begin{aligned} \delta \left(T - \int_0^{s''} ds f'^2 \right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E \left(T - \int_0^{s''} ds f'^2 \right) \right\} \delta(E) dE \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E \left(T - \int_0^{s''} ds f'^2 \right) \right\} dE, \end{aligned} \quad (2.46)$$

le propagateur devient :

$$K(q'', q', s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{[f'(q'')f'(q')]^{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \int_0^\infty ds \times \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \exp\left(\frac{-i}{\hbar}TE\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}E \int_0^{s''} ds f'^2\right) K_N \right\} dE, \quad (2.47)$$

l'expression globale du propagateur après le développement s'écrit comme :

$$K(q'', q', s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{[f'(q'')f'(q')]^{\frac{1}{2}}}{2\pi\hbar} \left(\frac{M}{2\pi\hbar\delta_j}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty ds \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left(-\frac{iET}{\hbar}\right) \times \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp\left(\sum_{j=1}^N \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j\right), \quad (2.48)$$

avec

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

Nous pouvons tirer la fonction de Green $G(q'', q'; E)$ transformée de Fourier du propagateur :

$$K(q'', q', s) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{iET}{\hbar}\right) G(q'', q'; E) dE, \quad (2.50)$$

où

$$G(q'', q'; E) = \sqrt{f'(q'')f'(q')} \int_0^\infty ds P(q'', q', s), \quad (2.51)$$

nous écrivons l'expression de promotor en fonction du propagateur converti comme suit

:

$$P(q'', q'; s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^N \left(\frac{M}{2\pi\hbar\delta_j}\right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dq_j \exp\left(\sum_{j=1}^N \frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j\right), \quad (2.52)$$

d'où

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

à la limite continue ($N \rightarrow \infty$)

$$\tilde{S}(q(s)) = \int_0^s ds \left[\frac{M}{2} \left(\frac{dq}{ds}\right)^2 - \tilde{V}(q) \right], \quad (2.54)$$

avec :

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

notons que le potentiel quantique ΔV la forme d'une dérivée de Schwarz de f .

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

2.4 Application:

Exemple 1: Le potentiel de Morse

Le potentiel de Morse est donné par:

$$V(r) = V_0(1 - e^{-\alpha r})^2, \quad (2.57)$$

nous avons utilisé les changements de variables suivants pour trouver le potentiel transformé $\tilde{V}(q)$;

$$r \equiv f(q) = -\frac{2}{\alpha} \ln q, \quad (2.58)$$

transformation de temps:

$$\frac{dt}{ds} = [f'(q)]^2,$$

on calcule le terme correction quantique ΔV_j :

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

ce qui donne

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

donc

$$ds = \frac{\alpha^2 q^2}{4} dt, \quad (2.61)$$

et

$$\Delta V_j = -\frac{1}{3q^2}, \quad (2.62)$$

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

$$\tilde{V}(q) = \frac{4}{\alpha^2 q^2} \left[V_0(1 - q^2)^2 - E - \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{M} \left\{ -\frac{1}{3q^2} \right\} \right], \quad (2.63)$$

alors le potentiel transformé s'écrit comme suit:

$$\tilde{V}(q) = \left[\frac{4(V_0 - E)}{\alpha^2 q^2} - \frac{8V_0}{\alpha^2} + \frac{4V_0 q^2}{\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{8Mq^2} \right], \quad (2.64)$$

on pose :

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

ce qui donne

$$\tilde{V}(q) = \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 + \hbar^2 \frac{(4\nu^2 - \frac{1}{4})}{2Mq^2} - M\omega^2, \quad (2.65)$$

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

Exemple 2: Potentiel du coulomb

Le potentiel du coulomb est donné par:

$$V(r) = \frac{A}{2Mr^2} + \frac{e^2}{r}, \quad (2.66)$$

avec A et e sont des constants.

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

Transformation des coordonnées:

$$r \equiv h(q) = q^2. \quad (2.67)$$

Transformation du temps:

$$\frac{dt}{ds} = [h'(q)]^2. \quad (2.68)$$

Calculons le terme correction quantique:

$$\Delta V_j = \left[\frac{h''}{h'} \right]^2 - \frac{2}{3} \frac{h^{(3)}}{h'}, \quad (2.69)$$

ce qui donne

$$h' = 2q, \quad h'' = 2, \quad h^{(3)} = 0, \quad (2.70)$$

donc

$$\Delta V_j = \frac{1}{q^2}, \quad (2.71)$$

et

$$ds = 4q^2 dt, \quad (2.72)$$

l'expression du potentiel transformé devient:

$$\begin{aligned} \tilde{V}(q) &= (2q)^2 \left[\left(\frac{A}{2Mq^4} + \frac{e^2}{q^2} \right) - E \right] + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{M} \frac{1}{q^2} \\ &= \left(\frac{2A}{M} + \frac{3}{8} \frac{\hbar^2}{M} \right) \left(\frac{1}{q^2} \right) - 4Eq^2 + 4e^2. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Nous avons ramené le problème lié au potentiel du coulomb celui de l'oscillateur harmonique radial qui est déjà connu.

3

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

3.1 Introduction

L'étude des solutions de l'équation de Dirac avec des techniques récentes a fait l'objet de plusieurs travaux. Ces solutions jouent un rôle primordial en mécanique quantique, car elles contiennent toutes les informations nécessaires concernant le système quantique étudié. La plupart des potentiels sont exactement résolus pour les états s , en particulier dans l'espace tridimensionnel lorsque le moment cinétique $l \neq 0$.

L'équation de Dirac dans le cas des états de moment orbital " l " non nul ($l \neq 0$) n'admet aucune solution exacte du fait du terme centrifuge. Pour solutionner ces problèmes rigoureusement, il est nécessaire d'utiliser des méthodes approximatives.

Le but de ce chapitre est de rechercher et de déterminer en mécanique quantique standard le spectre d'énergie et la fonction d'onde pour les états, ($l \neq 0$) relatives d'une particule pour le potentiel de Morse par la méthode de Duru-Kleinert basée sur la transformation spatio-temporelle via le formalisme des intégrales de chemin.

3.2 Le potentiel de Morse

Le potentiel de Morse, dû au nom du physicien américain Philip M. Morse [27] est un modèle pratique de l'énergie potentielle d'une molécule diatomique. C'est une meilleure

approximation pour décrire la structure vibrationnelle des molécules que l'oscillateur harmonique quantique car il inclut clairement les effets de la rupture des liaisons chimiques et des existences non corrélées . Il explique également l'anharmonicité des liaisons réelles et la probabilité non nulle de transition pour les états harmoniques et les bandes de combinaison. Il peut être aussi utilisé pour la modélisation des interactions entre l'atome et sa surface et il est l'un des modèles, les plus utiles et pratiques pour étudier le spectre d'énergie.

Dans cette étude, le potentiel de Morse est proposé comme suite [9]:

$$V(r) = v_1 e^{-2\alpha r} + v_2 e^{-\alpha r} + v_3, \quad (3.1)$$

où v_1 , v_2 et v_3 sont des paramètres positifs qui déterminent l'amplitude du potentiel de morse. α : représente la gamme du potentiel de Morse.

3.3 L'équation de Dirac pour le potentiel de Morse

La solution de l'équation de Dirac pour les états l d'une particule dans des potentiels scalaire et vecteur du type exponentiel donne d'après la substitution de l'expression(3.1) dans l'équation (1.74) et l'équation (1.76) :

La partie radiale de l'équation de Dirac pour le potentiel de Morse dans le cas d'un spin symétrie lorsque, $V(r) = S(r)$ est:

$$\frac{d^2 F_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[\frac{E_{nl}^2 - M^2 c^4 + c_s (Mc^2 - E_{nl})}{2Mc^2} - \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{\hbar^2 l(l+1)} - \frac{Mc^2}{2Mr^2} \right] F_{nl}(r) = 0, \quad (3.2)$$

La partie radiale de l'équation de Dirac pour le potentiel de Morse dans le cas d'un pseudo-spin symétrie, lorsque: $V(r) = S(r)$ est:

$$\frac{d^2 G_{nl}(r)}{dr^2} - \frac{2M}{\hbar^2} \left[\frac{E_{nl}^2 - M^2 c^4 + c_{ps} (Mc^2 - E_{nl})}{2Mc^2} - \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_{ps}}{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)} - \frac{Mc^2}{2Mr^2} \right] G_{nl}(r) = 0, \quad (3.3)$$

nous savons bien que cette équation n'admet pas de solutions analytiques pour ($l \neq 0$) à cause du potentiel centrifuge. Mais, à défaut de la résolution rigoureuse de cette équation, nous pouvons utiliser la méthode d'approximation qui permet d'obtenir analytiquement des solutions approchées de cette dernière équation.

3.4 L'approximation du potentiel centrifuge

En réalité, l'équation de Dirac dans le cas ($l \neq 0$) est trop compliquée et ne se laisse pas traiter exactement. Il faut alors avoir recours à une résolution basée sur une méthode d'approximation qui permet d'obtenir analytiquement une solution approchée de l'équation.

Nous utilisons l'approche proposée par Mustafa pour surmonter le problème [28]:

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{r_e^2} \left(c_0 + \frac{c_1}{(e^{\alpha r} - q')} + \frac{c_2}{(e^{\alpha r} - q')^2} \right), \quad (3.4)$$

avec r_e représente la longueur de la liaison d'équilibre. q' est représenté un paramètre

de déformation.

$$\text{avec: } \begin{cases} c_0 = 1 - \frac{3}{\alpha r_e} + \frac{3}{\alpha^2 r_e^2} \\ c_1 = \frac{4e^{\alpha r_e}}{\alpha r_e} - \frac{6e^{\alpha r_e}}{\alpha^2 r_e^2} \\ c_2 = -\frac{(e^{\alpha r_e})^2}{\alpha r_e} + \frac{3(e^{\alpha r_e})^2}{\alpha^2 r_e^2} \end{cases},$$

dans le cas de $q' = 0$ [29], on a

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{r_e^2} (c_0 + c_1 e^{-\alpha r} + c_2 e^{-2\alpha r}), \quad (3.5)$$

pour les détails (voir l'annexe).

3.5 Le potentiel effectif

Nous écrivons l'expression du potentiel effectif pour les deux cas spin symétrique et pseudo-spin symétrique.

3.5.1 Dans le cas d'un spin symétrique :

Le potentiel effectif donnée par:

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{2Mc^2} \Sigma(r),$$

d'où

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} V(r),$$

d'après l'expression approximative du terme centrifuge (3.5) l'expression du potentiel effectif devient:

$$V_{eff}(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr_e^2} (c_0 + c_1e^{-\alpha r} + c_2e^{-2\alpha r}) + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} (v_1e^{-2\alpha r} + v_2e^{-\alpha r} + v_3), \quad (3.6)$$

ce qui donne:

$$\begin{aligned} V_{eff}(r) = & \left[\left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c_2 + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} v_1 \right) e^{-2\alpha r} \right] \\ & + \left[\left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c_1 + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} v_2 \right) e^{-\alpha r} \right] \\ & + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c_0 + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} v_3 \right], \end{aligned} \quad (3.7)$$

pour simplifier les calculs on pose:

$$\begin{cases} A' = \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c_2 + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} v_1 \right) \\ B' = \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c_1 + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} v_2 \right) \\ C' = \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr_e^2} c_0 + \frac{Mc^2 + E_{nl} - c_s}{Mc^2} v_3 \right) \end{cases}, \quad (3.8)$$

alors que le potentiel effectif dans le cas d'un spin symétrique donné par :

$$V_{eff}(r) = A'e^{-2\alpha r} + B'e^{-\alpha r} + C'. \quad (3.9)$$

3.5.2 Dans le cas d'un pseudo-spin symétrique :

Le potentiel effectif donnée par:

$$\begin{aligned} V_{eff}(r) &= \frac{Mc^2 + E_{nl\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \Delta(r) + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2Mr^2} \\ &= \frac{Mc^2 + E_{nl\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} (V(r) - S(r)) + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2Mr^2}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

d'après l'expression approximative du terme centrifuge (3.5)

l'expression du potentiel effectif devient:

$$V_{eff}(r) = \frac{Mc^2 + E_{nl\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} (v_1e^{-2\alpha r} + v_2e^{-\alpha r} + v_3) + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2Mr_e^2} (c_0 + c_1e^{-\alpha r} + c_2e^{-2\alpha r}), \quad (3.11)$$

ce qui donne:

$$\begin{aligned}
 V_{eff}(r) &= \left[\left(\left(\frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \right) v_1 + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1)}{2Mr_e^2} c_2 \right) e^{-2\alpha r} \right] \\
 &= \left[\left(\left(\frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \right) v_2 + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1)}{2Mr_e^2} c_1 \right) e^{-\alpha r} \right] \\
 &= \left[\left(\frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \right) v_3 + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1)}{2Mr_e^2} c_0 \right], \tag{3.12}
 \end{aligned}$$

pour simplifier les calculs on pose que :

$$\begin{aligned}
 D' &= \left(\left(\frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \right) v_1 + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1)}{2Mr_e^2} c_2 \right), \\
 E' &= \left(\left(\frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \right) v_2 + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1)}{2Mr_e^2} c_1 \right), \\
 F' &= \left(\left(\frac{Mc^2 + E_{n\tilde{l}} - c_{ps}}{Mc^2} \right) v_3 + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l} + 1)}{2Mr_e^2} c_0 \right), \tag{3.13}
 \end{aligned}$$

donc le potentiel effectif dans le cas d'un pseudo-spin symétrique donné par

$$V_{eff}(r) = D'e^{-2\alpha r} + E'e^{-\alpha r} + F'. \tag{3.14}$$

Pour trouver l'expression de l'énergie et la fonction d'onde correspondante de ce potentiel, nous utilisons la méthode Duru-Kleinert, basée sur une transformation de l'espace-temps.

3.6 Les transformations de coordonnées et de temps de Duru-Kleinert dans le formalisme de Feynman

Nous présentons dans ceux se suivent les deux types de transformations spatio-temporelles, ensuite nous développons la méthode.

Nous utilisons dans notre étude une transformation de coordonnées d'espace-temps de Duru-Kleinert pour faciliter la forme d'un propagateur, nous effectuons le changement d'espace et du temps suivant [9]:

$$\begin{cases} r = f(q) \\ dt = [f'(q)]^2 ds \end{cases}, \quad (3.15)$$

où $(q; s)$ sont les nouvelles coordonnées espace-temps

La transformation de coordonnée choisie est:

$$r = f(q) = -\frac{2}{\alpha} \ln q, \quad (3.16)$$

avec :

$$f'(q) = -\frac{2}{\alpha q}, \quad f''(q) = \frac{2}{\alpha q^2}, \quad f'''(q) = -\frac{4}{\alpha q^3}, \quad (3.17)$$

où les fonctions f' , f'' et f''' sont les dérivées successives de la fonction f

alors que la transformation locale de temps est:

$$dt = \frac{4}{\alpha^2 q^2} ds, \quad (3.18)$$

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

L'expression de propagateur est donnée par :

$$\widetilde{K}_l = (q'', q'; s'') = \int Dq(S) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - (f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q)) \right\} ds \right], \quad (3.19)$$

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

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8M} \left[3 \frac{[f''(q)]^2}{[f'(q)]^2} - 2 \frac{f'''(q)}{f'(q)} \right], \quad (3.20)$$

on injecte les dérivées (3.17) dans l'expression(3.20) ; nous obtenons:

$$\Delta V(q) = \frac{\hbar^2}{8M} \left\{ \frac{3-4}{q^2} \right\} = -\frac{\hbar^2}{8Mq^2}. \quad (3.21)$$

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

3.7.1 Cas de spin symétrique

D'une part, nous remplaçons l'expression (3.16) dans l'expression du potentiel effectif (3.9), on obtient :

$$V_{eff}(q) = A'e^{-2\alpha(-\frac{2}{\alpha}\ln q)} + B'e^{-\alpha(-\frac{2}{\alpha}\ln q)} + C', \quad (3.22)$$

ce qui donne:

$$V_{eff}(q) = A'q^4 + B'q^2 + C', \quad (3.23)$$

d'un autre côté, nous avons :

$$[f'(q)]^2 V_{eff}(q) = \frac{4}{\alpha^2}A'q^2 + \frac{4}{\alpha^2}B' + \frac{4}{\alpha^2q^2}C', \quad (3.24)$$

$$[f'(q)]^2 E = \frac{4}{\alpha^2q^2}E, \quad (3.25)$$

en utilisant les relations (3.21), (3.24) et (3.25), nous pouvons écrire l'équation :

$$f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q) = \frac{4}{\alpha^2}A'q^2 + \frac{4}{\alpha^2}B' + \frac{4(C' - E)}{\alpha^2q^2} - \frac{\hbar^2}{8Mq^2}, \quad (3.26)$$

en posant :

$$\omega^2 = \frac{8A'}{M\alpha^2}, \quad (3.27)$$

$$\lambda^2 = \frac{8M(C' - E)}{\alpha^2\hbar^2}. \quad (3.28)$$

En substituant (3.27) dans (3.26), nous obtenons:

$$f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q) = \frac{1}{2}M\omega^2q^2 + \frac{4}{\alpha^2}B' + \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right), \quad (3.29)$$

en tenant compte de (3.29), le propagateur (3.19) devient :

$$\widetilde{K}_l(q'', q'; s'') = \int Dq(S) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2}M\omega^2q^2 - \frac{4}{\alpha^2}B' - \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right) \right\} ds \right], \quad (3.30)$$

ce qui donne:

$$\begin{aligned} \widetilde{K}_l(q'', q'; s'') &= \int Dq(S) \times \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ -\frac{4}{\alpha^2} B' \right\} ds \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 - \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right) \right\} \right] ds, \end{aligned} \quad (3.31)$$

alors que le propagateur radial est:

$$\begin{aligned} \widetilde{K}_l(q'', q'; s'') &= \exp \frac{i}{\hbar} s'' \left[-\frac{4}{\alpha^2} B' \right] \times \int Dq(S) \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 - \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right) \right\} \right] ds, \end{aligned} \quad (3.32)$$

le propagateur (3.32) est le propagateur du potentiel de l'oscillateur harmonique, qui est un problème résolu est connu.

L'expression de potentiel de l'oscillateur harmonique radial est[30]:

$$V^{OHR}(q) = \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 + \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right), \quad (3.33)$$

dans ce qui suit, on donne l'expression du propagateur de potentiel de l'oscillateur harmonique radial:

$$K_l^{OHR}(q'', q'; s'') = \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} s'' E_n^{OHR} \right) \Phi_{n,l}(q'') \Phi_{n,l}^*(q'), \quad (3.34)$$

où:

N_m :Le nombre maximal des états excités.

E_n^{OHR} : est l'énergie de l'oscillateur harmonique radial, s'écrit comme suite [31, 32]

$$E_n^{OHR} = \hbar \omega (2n + \lambda + 1). \quad (3.35)$$

$\Phi_{n,l}(q)$: la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique radial, s'écrit comme suite [31, 32]:

$$\Phi_{n,l}(q) = \left(\frac{4M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\lambda+n+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} q^2 \right)^{\frac{2\lambda+1}{4}} \exp \left(\frac{-M\omega}{2\hbar} q^2 \right) L_n^\lambda \left(\frac{M\omega q^2}{\hbar} \right), \quad (3.36)$$

L_n^λ : polynômes de Legendre

donc le propagateur du potentiel de Morse est donnée par:

$$\widetilde{K}_l(q'', q'; s'') = \exp \frac{i}{\hbar} s'' \left[-\frac{4}{\alpha^2} B' \right] K_l^{OHR}(q'', q'; s''), \quad (3.37)$$

la substitution de (3.71) dans (3.37) donne L'expression de propagateur comme suite :

$$\widetilde{K}_l(q'', q'; s'') = \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' \left(-\frac{4}{\alpha^2} B' - E_n^{OHR} \right) \right] \Phi_{n,l}(q'') \Phi_{n,l}^*(q'). \quad (3.38)$$

La fonction de Green

La fonction de Green nous donnera le spectre d'énergie à partir de ses pôles, et les fonctions d'ondes correspondantes à partir des résidus aux pôles cette fonction n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur comme suite [34]:

$$G(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f'(q') f''(q'')]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \exp \left(\frac{i E s''}{\hbar} \right) \widetilde{K}_l(q'', q'; s'') ds''. \quad (3.39)$$

En remplaçant (3.38) dans (3.39) on obtient:

$$G(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f'(q') f''(q'')]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \Phi_{n,l}(q'') \Phi_{n,l}^*(q') \int_0^{s''} ds'' \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' \left(-\frac{4}{\alpha^2} B' - E_n^{OHR} \right) \right], \quad (3.40)$$

en posant :

$$Z = -\frac{4}{\alpha^2} B' - E_n^{OHR}, \quad (3.41)$$

ce qui donne:

$$G(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f'(q') f''(q'')]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \Phi_{n,l}(q'') \Phi_{n,l}^*(q') \int_0^{s''} ds'' \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' Z \right], \quad (3.42)$$

par intégration on trouve

$$G(r'', r'; E) = \frac{i}{\hbar} [f'(q') f''(q'')]^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{N_m} \Phi_{n,l}(q'') \Phi_{n,l}^*(q') \left(\frac{\hbar}{iZ} \right) \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' Z \right], \quad (3.43)$$

ce qui donne

$$G(r'', r'; E) = \sum_{n=0}^{N_m} \Psi_{n,l}(q') \Psi_{n,l}^*(q'') \frac{1}{Z} \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' Z \right], \quad (3.44)$$

d'où $F_{n,l}^{Morse}(q) = [f'(q)]^{\frac{1}{2}} \Phi_{n,l}(q)$

Les fonctions d'ondes du potentiel de Morse:

En utilisant la relation (3.36); nous pouvons écrire l'expression de la fonction d'onde du potentiel de l'oscillateur harmonique radial comme suite:

$$F_{n,l}^{Morse}(q) = [f'(q)]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\lambda+n+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} q^2 \right)^{\frac{2\lambda+1}{4}} \exp\left(\frac{-M\omega}{2\hbar} q^2 \right) L_n^\lambda \left(\frac{M\omega q^2}{\hbar} \right), \quad (3.45)$$

on à déjà

$$r = f(q) = -\frac{2}{\alpha} \ln q, \quad (3.46)$$

ce qui donne :

$$q = \exp\left(-\frac{\alpha r}{2} \right), \quad (3.47)$$

on remplace (3.46) et (3.47) dans (3.45), et on trouve l'expression de la fonction d'onde du potentiel de Morse:

$$F_{n,l}^{Morse}(q) = \left[\frac{2}{\alpha \exp\left(-\frac{\alpha r}{2} \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\lambda+n+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \exp\left(-\frac{\alpha r}{2} \right)^2 \right)^{\frac{2\lambda+1}{4}} \times \exp\left(\frac{-M\omega}{2\hbar} \exp\left(-\frac{\alpha r}{2} \right)^2 \right) L_n^\lambda \left(\frac{M\omega \exp\left(-\frac{\alpha r}{2} \right)^2}{\hbar} \right), \quad (3.48)$$

donc l'expression de la fonction d'onde du potentiel de Morse est:

$$F_{n,l}^{Morse}(q) = \left(\frac{2}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\lambda+n+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \exp(-\alpha r) \right)^{\frac{2\lambda+1}{4}} \times \exp\left(\frac{-M\omega}{2\hbar} \exp(-\alpha r) \right) L_n^\lambda \left(\frac{M\omega \exp(-\alpha r)}{\hbar} \right). \quad (3.49)$$

Le spectre d'énergie du potentiel du Morse

Le spectre d'énergie du potentiel du Morse est obtenu à partir des pôles de la fonction de Green lorsque l'équation (3.41) est nulle:

$$-\frac{4}{\alpha^2} B' - E_n^{OHR} = 0, \quad (3.50)$$

la substitution de (3.35) dans (3.50) donne:

$$-\frac{4}{\alpha^2}B' - \hbar\omega(2n + \lambda + 1) = 0, \quad (3.51)$$

$$\lambda^2 = \left(-\frac{4B'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1 \right)^2, \quad (3.52)$$

par identification de l'expression(3.52) et (3.28) on obtient :

$$\left(-\frac{4B'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1 \right)^2 = \frac{8M(C' - E)}{\alpha^2\hbar^2}, \quad (3.53)$$

ceci donne:

$$C' - E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4B'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1 \right)^2, \quad (3.54)$$

donc le spectre d'énergie du potentiel du Morse donnée par:

$$E = C' - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4B'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1 \right)^2, \quad (3.55)$$

et

$$E = \frac{E_{nl}^2 - M^2c^4 + c_s(Mc^2 - E_{nl})}{2Mc^2}, \quad (3.56)$$

les résultats(3.55) et (3.56) peuvent être combinés l'expression :

$$C' - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4B'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1 \right)^2 = \frac{E_{nl}^2 - M^2c^4 + c_s(Mc^2 - E_{nl})}{2Mc^2}, \quad (3.57)$$

cela nous amène au spectre d'énergie suivant:

$$E_{nl}^2 - M^2c^4 + c_s(Mc^2 - E_{nl}) = 2Mc^2 \left(C' - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4B'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1 \right)^2 \right), \quad (3.58)$$

3.7.2 Cas de d'un pseudo-spin symétrique :

D'une part, nous remplaçons l'expression (3.16) dans l'expression du potentiel effectif (3.14), on obtient :

$$V_{eff}(q) = D'e^{-2\alpha(-\frac{2}{\alpha}\ln q)} + E'e^{-\alpha(-\frac{2}{\alpha}\ln q)} + F', \quad (3.59)$$

ce qui donne:

$$V_{eff}(q) = D'q^4 + E'q^2 + F', \quad (3.60)$$

d'un autre côté, nous avons :

$$[f'(q)]^2 V_{eff}(q) = \frac{4}{\alpha^2} D'q^2 + \frac{4}{\alpha^2} E' + \frac{4}{\alpha^2 q^2} F', \quad (3.61)$$

$$[f'(q)]^2 E = \frac{4}{\alpha^2 q^2} E, \quad (3.62)$$

en utilisant les relations (3.59), (3.61) et (3.62), nous pouvons écrire l'équation :

$$f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q) = \frac{4}{\alpha^2} D'q^2 + \frac{4}{\alpha^2} E' + \frac{4(F' - E)}{\alpha^2 q^2} - \frac{\hbar^2}{8Mq^2}, \quad (3.63)$$

en posant :

$$\omega^2 = \frac{8D'}{M\alpha^2}, \quad (3.64)$$

$$\lambda^2 = \frac{8M(F' - E)}{\alpha^2 \hbar^2}, \quad (3.65)$$

en substituant (3.64) dans (3.63), nous obtenons:

$$f'^2(q) [V_{eff}(f(q)) - E] + \Delta V(q) = \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 + \frac{4}{\alpha^2} E' + \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right), \quad (3.66)$$

en tenant compte de (3.66), le propagateur (3.19) devient :

$$\widetilde{K}_l(q'', q'; s'') = \int Dq(S) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 - \frac{4}{\alpha^2} E' - \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right) \right\} ds \right], \quad (3.67)$$

ce qui donne:

$$\begin{aligned} \widetilde{K}_l(q'', q'; s'') &= \int Dq(S) \times \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ -\frac{4}{\alpha^2} E' \right\} ds \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 - \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right) \right\} ds \right], \end{aligned} \quad (3.68)$$

alors que le propagateur radial est:

$$\begin{aligned} \widetilde{K}_l(q'', q'; s'') &= \exp \frac{i}{\hbar} s'' \left[-\frac{4}{\alpha^2} E' \right] \times \int Dq(S) \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{s''} \left\{ \frac{M}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 - \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right) \right\} ds \right], \end{aligned} \quad (3.69)$$

le propagateur (3.69) est le propagateur du potentiel de l'oscillateur harmonique, qui est un problème résolu est connu.

L'expression de potentiel de l'oscillateur harmonique radial est[30]:

$$V^{OHR}(q) = \frac{1}{2} M \omega^2 q^2 + \frac{\hbar^2}{2Mq^2} \left(\lambda^2 - \frac{1}{4} \right), \quad (3.70)$$

dans ce qui suit, on donne l'expression du propagateur de potentiel de l'oscillateur harmonique radial:

$$K_l^{OHR}(q'', q'; s'') = \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} s'' E_n^{OHR} \right) \Phi_{n,l}(q'') \Phi_{n,l}^*(q'), \quad (3.71)$$

où N_m : est le nombre maximal des états excités.

E_n^{OHR} : est l'énergie de l'oscillateur harmonique radial, s'écrit comme suite [31, 32]

$$E_n^{OHR} = \hbar \omega (2n + \lambda + 1). \quad (3.72)$$

$\Phi_{n,l}(q)$:la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique radial, s'écrit comme suite [31, 32]:

$$\Phi_{n,l}(q) = \left(\frac{4M\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\lambda+n+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} q^2 \right)^{\frac{2\lambda+1}{4}} \exp \left(\frac{-M\omega}{2\hbar} q^2 \right) L_n^\lambda \left(\frac{M\omega q^2}{\hbar} \right), \quad (3.73)$$

L_n^λ : polynômes de Legendre

donc le propagateur du potentiel de Morse est donnée par:

$$\widetilde{K}_{\tilde{l}}(q'', q'; s'') = \exp \frac{i}{\hbar} s'' \left[-\frac{4}{\alpha^2} E' \right] K_{\tilde{l}}^{OHR}(q'', q'; s''), \quad (3.74)$$

la substitution de (3.71) dans (3.74) donne l'expression de propagateur comme suite :

$$\widetilde{K}_{\tilde{l}}(q'', q'; s'') = \sum_{n=0}^{N_m} \exp \left[\frac{i}{\hbar} s'' \left(-\frac{4}{\alpha^2} E' - E_n^{OHR} \right) \right] G_{n,\tilde{l}}(q'') G_{n,\tilde{l}}^*(q'). \quad (3.75)$$

De ce qui précède nous déduirons la fonction d'onde du potentiel de Morse:

$$G_{n,\tilde{l}}^{Morse}(q) = \left(\frac{2}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4M\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\lambda+n+1)}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M\omega}{\hbar} \exp(-\alpha r)\right)^{\frac{2\lambda+1}{4}} \times \exp\left(\frac{-M\omega}{2\hbar} \exp(-\alpha r)\right) L_n^\lambda\left(\frac{M\omega \exp(-\alpha r)}{\hbar}\right). \quad (3.76)$$

Le spectre d'énergie du potentiel du Morse

$$-\frac{4}{\alpha^2}E' - E_n^{OHR} = 0, \quad (3.77)$$

la substitution de (3.72) dans (3.77) donne:

$$-\frac{4}{\alpha^2}E' - \hbar\omega(2n + \lambda + 1) = 0, \quad (3.78)$$

par identification de l'expression (3.78) et (3.65), on obtient:

$$\left(-\frac{4E'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1\right)^2 = \frac{8M(F' - E)}{\alpha^2\hbar^2}, \quad (3.79)$$

ceci donne:

$$F' - E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4E'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1\right)^2, \quad (3.80)$$

donc le spectre d'énergie du potentiel du Morse donnée par:

$$E = F' - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4E'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1\right)^2, \quad (3.81)$$

et aussi s'écrit comme:

$$E = \frac{E_{n\tilde{l}}^2 - M^2c^4 + c_{ps}(Mc^2 - E_{n\tilde{l}})}{2Mc^2}, \quad (3.82)$$

donc

$$\frac{E_{n\tilde{l}}^2 - M^2c^4 + c_{ps}(Mc^2 - E_{n\tilde{l}})}{2Mc^2} = F' - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4E'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1\right)^2,$$

ceci donne

$$E_{n\tilde{l}}^2 - M^2c^4 + c_{ps}(Mc^2 - E_{n\tilde{l}}) = 2Mc^2 \left(F' - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8M} \left(-\frac{4E'}{\hbar\omega\alpha^2} - 2n - 1\right)^2\right). \quad (3.83)$$

Remarque:

La limite de symétrie de spin non relativiste exacte ($Cs = 0$) de l'équation de Dirac restitue des résultats en accord avec ceux de l'équation de Schrödinger. Dans cette limite, l'application

$mc^2 + E_{nk} \rightarrow 2mc^2, E_{nk} - mc^2 \rightarrow E_{nl}$ est utilisée sur (1.73) pour obtenir l'énergie ro-vibrationnelle non relativiste du potentiel de Morse pour le cas du spin non aligné ($k = l$).

3.8 Résultats et discussions

Nous avons calculé le spectre d'énergie par la méthode du Duru-Kleinert sur l'équation de Dirac, pour le potentiel de Morse avec différents paramètres v_1, v_2, v_3, α le potentiel de Morse dans cette étude donnée par:

$$\begin{aligned}
 U_M(r) &= D_e e^{-2\lambda x} - 2e^{-\lambda x} \\
 &= D_e e^{-2\lambda \frac{r-r_e}{r_e}} - 2e^{-\frac{r-r_e}{r_e}} \\
 &= D_e e^{-2\lambda} e^{-2\frac{\lambda}{r_e} r} - 2e^{\lambda} e^{-\frac{\lambda}{r_e} r},
 \end{aligned} \tag{3.84}$$

ou,

$$x = \frac{r-r_e}{r_e}$$

D_e : est l'énergie de dissociation; r_e est la longueur de liaison d'équilibre, et α est un paramètre qui contrôle la largeur du potentiel.

tels que: $v_1 = D_e e^{-2\lambda}, v_2 = -2e^{\lambda}, v_3 = 0, \alpha = \frac{\lambda}{r_e}$.

Nous avons utilisé le logiciel Maple pour obtenir nos résultats numériques.

Ces résultats ont permis de tester l'efficacité des intégrales de chemin de Feynman avec les transformations spatio-temporelles de Duru-Kleinert dans l'équation de Dirac pour le potentiel de Morse.

Dans le tableau 01: les paramètres des molécules utilisées dans cette étude sont présentés. Le choix des molécules H_2, LiH, HCl et CO a été éclairé par la nécessité de comparer les résultats de cette étude avec la littérature, et aussi nous avons choisi des autres molécules ScH, ScN, ScF et I_2 en raison de la disponibilité des paramètres spectroscopiques de ces molécules et du fait que les énergies de ces molécules n'ont pas été rapportées auparavant dans la littérature avec le potentiel Morse par la méthode numérique.

Molécule	$\alpha(\text{\AA}^{-1})$	$D_e(\text{eV})$	$r_e(\text{\AA})$	M (amu)
H_2 [38]	1.440558	4.7446	0.7416	0.50391
CO [38]	2.59441	11.2256	1.1283	6.8606719
LiH [38]	1.7998368	2.515287	1.5956	0.8801221
HCl [38]	2.38057	4.61907	1.2746	0.9801045
ScH [39]	1.41113	2.25	1.776	0.986040
ScN [39]	1.5068	4.56	1.768	10.682771
ScF [39]	1.46102	5.85	1.794	13.358942
I_2 [39]	1.8643	1.5556	2.662	63.45223502

Tableau 01: Les paramètres des molécules H_2 , LiH , HCl , CO , ScH , ScN , ScF et I_2 .

Dans les tableaux 02 jusqu'à 05: les valeurs propres d'énergie non relativiste $E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour $l = 0$ et différents états liés, $n = 0; 1; 2$ sont présentées pour les molécules H_2 , LiH , HCl et CO en comparaison avec les méthodes suivantes : la méthode Numérique [37], «the formula method» [38]. Les résultats de la présente étude sont en bon accord avec le cas exact et meilleur avec le cas que «the formula method» [38].

n	Nos résultats H_2	Résultats [38]	Résultats exacts [37]
0	4.476013133183633	4.476013598	4.476013136943926
1	3.962315348344437	3.962316658	3.962315358958260
2	3.479918828563294	3.479920870	3.479918845141241
3	3.028823573840211	3.028826240	3.028823595492867
4	2.609029584175184	2.609032764	2.609029610013140
5	2.220536859568212	2.220540446	2.220536888702059
6	1.863345400019298	1.863349282	1.863345431559624
7	1.537455205528439	1.537459277	1.537455238585836
8	1.242866276095637	1.242870422	1.242866309780693
9	0.979578611720919	0.9795827260	0.979578645144197
10	0.747592212404226	0.7475961845	0.747592244676347
11	0.546907078145590	0.5469107995	0.546907108377143
12	0.377523208945010	0.3775265692	0.377523236246586
13	0.239440604802486	0.2394434952	0.239440628284674
14	0.132659265718018	0.1326615763	0.132659284491409

Tableau 02: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_n$ du potentiel de Morse pour la molécule H_2 , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	Nos résultats LiH	Résultats [38]	Résultats exacts [37]
0	2.428863214302927	2.428863364	2.428863215520037
1	2.260548054572586	2.260548488	2.260548058095136
2	2.098276110393992	2.098276806	2.098276116050265
3	1.942047381767142	1.942048320	1.942047389385426
4	1.791861868692040	1.791863028	1.791861878100618
5	1.647719571168683	1.647720928	1.647719582195841
6	1.509620489197072	1.509622023	1.509620501671094
7	1.377564622777207	1.377566315	1.377564636526379
8	1.251551971909089	1.251553800	1.251551986761694
9	1.131582536592716	1.131584479	1.131582552377041
10	1.017656316828089	1.017658352	1.017656333372418
11	0.909773312615204	0.9097754210	0.909773329747826
12	0.807933523954075	0.8079356845	0.807933541503265
13	0.712136950844683	0.7121391405	0.712136968638735
14	0.622383593287040	0.6223857925	0.622383611154236

Tableau 03: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour la molécule LiH , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	Nos résultats <i>HCl</i>	Résultats [38]	Résultats exacts [37]
0	4.435563940772001	4.435564260	4.435563943352696
1	4.079710064329036	4.079710980	4.079710071754069
2	3.738733843903451	3.738735303	3.738733855750079
3	3.412635279495245	3.412637231	3.412635295340728
4	3.101414371104419	3.101416759	3.101414390526015
5	2.805071118730973	2.805073897	2.805071141305941
6	2.523605522374906	2.523608636	2.523605547680504
7	2.257017582036219	2.257020980	2.257017609649706
8	2.005307297714911	2.005310928	2.005307327213546
9	1.768474669410983	1.768478479	1.768474700372025
10	1.546519697124435	1.546523636	1.546519729125141
11	1.339442380855267	1.339446394	1.339442413472896
12	1.147242720603478	1.147246758	1.147242753415289
13	0.969920716369050	0.9699247260	0.969920748952320
14	0.807476368152022	0.8074802980	0.807476400083989

Tableau 04: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_n$ du potentiel de Morse pour la molécule *HCl*, pour plusieurs états liés en unités atomiques (*ev*).

n	Nos résultats CO	Résultats [38]	Résultats exacts [37]
0	11.091535321510231	11.09153556	11.09153532340921
1	10.825822067661394	10.82582276	10.82582207328966
2	10.563330284653491	10.56333142	10.56333029391951
3	10.304059972486521	10.30406154	10.30405998529875
4	10.048011131160484	10.04801314	10.04801114742739
5	9.795183760675366	9.795186175	9.795183780305433
6	9.545577861031194	9.545580680	9.545577883932868
7	9.299193432227960	9.299196630	9.299193458309699
8	9.056030474265655	9.056034070	9.056030503435929
9	8.816088987144287	8.816092945	8.816089019311555
10	8.579368970863848	8.579373290	8.579369005936579
11	8.345870425424343	8.345875100	8.345870463310998
12	8.115593350825775	8.115598345	8.115593391434814
13	7.888537747068137	7.888543070	7.888537790308028
14	7.664703614151436	7.664709245	7.664703659930638

Tableau 05 : Le spectre d'énergie non relativiste $-E_n$ du potentiel de Morse pour la molécule CO , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev)

Dans les tableaux 06 et 07: de nouveaux résultats sont présentés pour les énergies vibrationnelles des molécules ScH , ScN , ScF et I_2 , et ont été comparé avec «the formula method» [38]

n	Nos résultats ScH	Résultats [38]	Nos résultats ScN	Résultats [38]
0	2.19546271393577	2.195462808	4.53457923106146	4.534579276
1	2.08839542047587	2.088395698	4.48395085865551	4.483950992
2	1.98400449857411	1.984004950	4.43360670687775	4.433606926
3	1.88228994823048	1.882290562	4.38354677572823	4.383547082
4	1.78325176944498	1.783252539	4.33377106520693	4.333771455
5	1.68688996221761	1.686890876	4.28427957531390	4.284280050
6	1.59320452654837	1.593205576	4.23507230604906	4.235072862
7	1.50219546243726	1.502196638	4.18614925741246	4.186149897
8	1.41386276988428	1.413864063	4.13751042940409	4.137511150
9	1.32820644888943	1.328207850	4.08915582202398	4.089156622
10	1.24522649945272	1.245227998	4.04108543527207	4.041086315
11	1.16492292157413	1.164924510	3.99329926914840	3.993300228
12	1.08729571525368	1.087297382	3.94579732365295	3.945798359
13	1.01234488049135	1.012346618	3.89857959878577	3.898580708
14	0.940070417287158	0.9400722155	3.85164609454678	3.851647279
15	0.870472325641091	0.8704741755	3.80499681093603	3.804998072
16	0.803550605553159	0.8035524975	3.75863174795354	3.758633082
17	0.739305257023357	0.7393071825	3.71255090559924	3.712552310
18	0.677736280051687	0.6777382290	3.66675428387318	3.666755760
19	0.618843674638147	0.6188456375	3.62124188277535	3.621243430
20	0.562627440782737	0.5626294085	3.57601370230579	3.576015318
21	0.509087578485458	0.5090895415	3.53106974246441	3.531071426
30	0.147665537925827	0.1476670372	3.13936403216258	3.139366286
100	4.73677258069348		0.878634100207158	0.8786380265

Tableau 06 : Le spectre d'énergie non relativiste $-E_n$ du potentiel de Morse pour les deux molécules ScH et ScN , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	Nos résultats ScF	Résultats [38]	Nos résultats I_2	Résultats [38]
0	5.82538785201714	5.825387895	1.55059084323840	1.550590852
1	5.77631920616999	5.776319330	1.54059676357827	1.540596791
2	5.72745809381432	5.727458305	1.53063499573547	1.530635038
3	5.67880451495015	5.678804815	1.52070553970999	1.520705600
4	5.63035846957742	5.630358860	1.51080839550184	1.510808474
5	5.58211995769616	5.582120430	1.50094356311100	1.500943660
6	5.53408897930639	5.534089530	1.491111104253750	1.491111154
7	5.48626553440808	5.486266165	1.48131083378132	1.481310962
8	5.43864962300123	5.438650335	1.47154293684246	1.471543082
9	5.39124124508588	5.391242040	1.46180735172093	1.461807514
10	5.34404040066197	5.344041265	1.45210407841672	1.452104256
11	5.29704708972954	5.297048030	1.44243311692984	1.442433311
12	5.25026131228860	5.250262330	1.43279446726028	1.432794678
13	5.20368306833911	5.203684165	1.42318812940804	1.423188357
14	5.15731235788109	5.157313535	1.41361410337312	1.413614346
15	5.11114918091457	5.111150435	1.40407238915554	1.404072647
16	5.06519353743949	5.065194865	1.39456298675527	1.394563261
17	5.01944542745591	5.019446830	1.38508589617233	1.385086186
18	4.97390485096377	4.973906326	1.37564111740672	1.375641422
19	4.92857180796310	4.928573358	1.36622865045843	1.366228971
20	4.88344629845393	4.883447918	1.35684849532746	1.356848832
21	4.83852832243621	4.838530006	1.34750065201382	1.347501002
30	4.44360554539297	4.443607840	1.26482409397062	1.264824577
100	1.94581405008500	1.945819048	0.711126372980586	0.7111275640

Tableau 07: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_n$ du potentiel de Morse pour les deux molécules ScF et I_2 , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

Dans les tableaux 08 et 09: les valeurs propres d'énergie basse des molécules H_2 , LiH , HCl et CO pour cette étude sont comparées à la littérature pour les états avec $n = 0, 1, 2$ et avec des valeurs arbitraires de l , et ont été comparés avec les méthodes suivantes «the formula method» [38] et the generalized pseudo spectral (GPS) method [36].

n	l	Nos résultats	Résultats [38]	Résultats [36]
		<u>H_2</u>		
0	0	4.476013133183633	4.476013598	4.47601313
	1	4.461228089063352	4.461228606	4.46122852
	2	4.431792208618007	4.431792829	4.43179975
1	0	3.962315348344437	3.962316658	3.96231534
	1	3.948080992040510	3.948082349	3.94811647
	2	3.919740250529274	3.919741703	3.91986423
2	0	3.479918828563294	3.479920870	3.47991882
	1	3.466235160075721	3.466237248	3.46633875
	2	3.438989557498597	3.438991735	3.43932836
		<u>LiH</u>		
0	0	2.428863214302927	2.428863364	2.42886321
	1	2.427022056072211	2.427022212	2.42702210
	2	2.423342274860359	2.423342443	2.42334244
1	0	2.260548054572586	2.260548488	2.26054805
	1	2.258754782379658	2.258755223	2.25875559
	2	2.255170723931579	2.255171175	2.25517324
2	0	2.098276110393992	2.098276806	2.09827611
	1	2.096530724238850	2.096531426	2.09653304
	2	2.093042388554546	2.093043101	2.09304950

Tableau 08: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour les deux molécules H_2 et LiH , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	l	Nos résultats	Résultats [38]	Résultats [36]
		<u>HCl</u>		
0	0	4.435563940772001	4.435564260	4.43556394
	1	4.432977438820876	4.432977767	4.43297753
	2	4.427806006535940	4.427806355	4.42780630
1	0	4.079710064329036	4.079710980	4.07971006
	1	4.077200555310799	4.077201481	4.07720144
	2	4.072183093472092	4.072184035	4.07218579
2	0	3.738733843903451	3.738735303	3.73873384
	1	3.736301327818101	3.736302795	3.73630382
	2	3.731437836425624	3.731439319	3.73144539
		<u>CO</u>		
0	0	11.091535321510231	11.09153556	11.09153532
	1	11.091058756844487	11.09105900	11.09105875
	2	11.090105645685850	11.09010588	11.09010565
1	0	10.825822067661394	10.82582276	10.82582206
	1	10.825349577058944	10.82535028	10.82534959
	2	10.824404613994167	10.82440532	10.82440465
2	0	10.563330284653491	10.56333142	10.56333028
	1	10.562861868114336	10.56286303	10.56286190
	2	10.561925053143417	10.56192620	10.56192516

Tableau 09: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour les deux molécules HCl et CO, pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

Dans les tableaux 10 et 13: Nous avons calculé le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse, pour $\{n, l\} = 0, 1, 2$ états de certaines molécules diatomiques ainsi que des données de la littérature, pour ScH , ScN , ScF , I_2 sont présentés et comparables avec «the formula method» [38] dans les tableaux suivants:.

n	l	Nos résultats ScH	Résultats [38]	Nos résultats ScN	Résultats [38]
0	0	2.19546271393577	2.195462808	4.53457923106146	4.534579276
	1	2.19412922361431	2.194129324	4.53445428384213	4.534454331
	2	2.19146463367158	2.191464744	4.53420439846548	4.534204442
1	0	2.08839542047587	2.088395698	4.48395085865551	4.483950992
	1	2.08708222452314	2.087082507	4.48382637940349	4.483826514
	2	2.08445817566603	2.084458466	4.48357742992373	4.483577561
2	0	1.98400449857411	1.984004950	4.43360670687775	4.433606926
	1	1.98271159699010	1.982712052	4.43348269559307	4.433482918
	2	1.98012808921863	1.980128554	4.43323468201020	4.433234901

Tableau 10: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour les deux molécules ScH et ScN , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	l	Nos résultats ScF	Résultats [38]	Nos résultats I_2	Résultats [38]
0	0	5.82538785201714	5.825387895	1.55059084323840	1.550590852
	1	5.82529076089439	5.825290795	1.55058155770921	1.550581566
	2	5.82509658318328	5.825096631	1.55056298674668	1.550562995
1	0	5.77631920616999	5.776319330	1.54059676357827	1.540596791
	1	5.77622238035606	5.776222510	1.54058750040025	1.540587527
	2	5.77602873324778	5.776028861	1.54056897413989	1.540568999
2	0	5.72745809381432	5.727458305	1.53063499573547	1.530635038
	1	5.72736153330921	5.727361745	1.53062575490861	1.530625799
	2	5.72716841680372	5.727168631	1.53060727335043	1.530607317

Tableau 11: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour les deux molécules ScF et I_2 , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	l	Nos résultats ScH	Résultats [38]	Nos résultats ScN	Résultats [38]
0	5	2.17554355771452	2.175543723	4.53270533987524	4.532705387
	10	2.12327551908824	2.123275862	4.52771161551814	4.527711683
	15	2.04083316823037	2.040833783	4.51960708701438	4.519607183
	20	1.93134705907815	1.931348023	4.50840635722624	4.508406491
3	5	1.86327905927393	1.863279737	4.38169393910477	4.381694249
	10	1.81338201478412	1.813382860	4.37675631871886	4.376756645
	15	1.73464145751831	1.734642558	4.36874283056366	4.368743187
	20	1.62999442790351	1.629995851	4.35766789454840	4.357668289
5	5	1.66848458477085	1.668485559	4.28244077506565	4.282441254
	10	1.62016820303870	1.620169336	4.27754055732716	4.277541053
	15	1.54389550816759	1.543896882	4.26958776273767	4.269588289
	20	1.44247453157774	1.442476217	4.25859668923767	4.258597251
6	5	1.57510190485651	1.575103014	4.23324052398842	4.233241087
	10	1.52757585450318	1.527577118	4.22835900757362	4.228359587
	15	1.45253709082942	1.452538589	4.22043655976702	4.220437167
	20	1.35272914075206	1.352730941	4.20948741752467	4.209488062

Tableau 12: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour les deux molécules ScH et ScN , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

n	l	Nos résultats ScF	Résultats [37]	Nos résultats I_2	Résultats [37]
0	5	5.82393164385240	5.823931695	1.55045156365487	1.550451573
	10	5.82005008331746	5.820050150	1.55008018656643	1.550080198
	15	5.81374769365847	5.813747779	1.54947680776852	1.549476821
	20	5.80503180208234	5.805031922	1.54864158284881	1.548641599
3	5	5.67736024412393	5.677360555	1.52056726591212	1.520567329
	10	5.67736024412393	5.673510815	1.52019857074323	1.520198635
	15	5.66725976191388	5.667260094	1.51959954952003	1.519599614
	20	5.65861528452485	5.658615652	1.51877035705262	1.518770424
5	5	5.58068364509564	5.580684120	1.50080595983692	1.500806057
	10	5.57685511220510	5.576855600	1.50043905261438	1.500439151
	15	5.57063880820818	5.570639304	1.49984293644100	1.499843036
	20	5.56204194027720	5.562042467	1.49901776560845	1.499017866
6	5	5.53265664581872	5.532657200	1.49097377452530	1.490973888
	10	5.52883871845703	5.528839295	1.49060776127595	1.490607875
	15	5.52263963159251	5.522640219	1.49001309762747	1.490013214
	20	5.51406656839060	5.514067177	1.48918993761235	1.489190056

Tableau 13: Le spectre d'énergie non relativiste $-E_{n,l}$ du potentiel de Morse pour les deux molécules ScF et I_2 , pour plusieurs états liés en unités atomiques (ev).

Nos résultats ont été comparés avec ceux obtenus numériquement par Lucha et par la méthode de 'the formula method' par Njoku à l'aide du logiciel Mathematica, Afin de montrer la précision de notre méthode, Nous avons comparé nos résultats présentés dans les tableaux (02) jusqu'à (13), et en utilisant une approximation du terme centrifuge. Nos résultats sont très proches de la valeur exacte et ils montrent que les valeurs propres obtenues sont très bon accord avec ceux données littérature, donc que nos résultats sont en parfaite adéquation avec ceux publiés par d'autres auteurs.

Les résultats que nous avons obtenus sont très intéressants et excellents par comparaison avec ceux publiés par d'autres chercheurs. Cela pourrait se justifier par deux points : le premier est que l'approximation du terme centrifuge utilisé a une forte importance sur l'expression du potentiel effectif du système examiné et par conséquent sur l'énergie de tous les spectres, pour le second point, la méthode Duru-Klienert, qui est une des meilleures et

des principales méthodes d'approximation pour les potentiels de forme exponentielle et pour la détermination des spectres d'énergie.

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons traité certains problèmes de la mécanique quantique relativiste au moyen de l'approche des intégrales de chemins de Feynman, Nous nous sommes intéressés à la résolution de l'équation de Dirac associée au potentiel de Morse avec des potentiels scalaire et vectoriel sont égaux, Nous notons que l'équation de Dirac n'est pas soluble pour les états " $l \neq 0$ ", ce qui nous a fallu d'appliquer une approximation du terme centrifuge, nous avons pu ramener le problème des états " l " du potentiel étudié à celui similaire des états " s ". Ce dernier a été traité plus précisément l'utilisation de la méthode de Duru-Kleinert dite technique des transformations spatio-temporelles dans le cadre de résoudre ce problème, cette méthode pour passer d'un propagateur difficile calculer, un propagateur de forme plus maniable.

Afin de montrer l'efficacité de l'approximation qu'on a utilisée. Nous avons calculé les spectres d'énergies relatives au potentiel de Morse pour différentes valeurs des paramètres de potentiel et des nombres quantique n dans l'état $l = 0$ et $l \neq 0$.

Les résultats obtenus, pour les molécules H_2 , LiH , CO , HCl , et ScH , ScN , ScF , I_2 , sont comparables avec des méthodes numériques et avec autre méthode "the Formula method" et "the generalized pseudospectral (GPS) method". Nos résultats montrent que les valeurs propres exprimées sont très proches des valeurs calculées numériquement et sont meilleures que celles calculées par la méthode "the Formula method", même si nous avons utilisé la même approximation du terme centrifuge.

On peut donc conclure que le type d'approximation choisie pour substituer le terme centrifuge au potentiel de Morse est une méthode simple et efficace qui donne les valeurs propres de l'énergie avec une exactitude suffisante.

Au vu de la pertinence des résultats obtenus, on peut dire que le formalisme de Feynman représente une alternative sérieuse aux différents formalismes de la mécanique quantique.

Bibliographie

- [1] B. Boudjedaa, Fondements mathématiques des intégrales de chemin "Feynman path integrals", (Thèse de Doctorat, université Mentouri Constantine, 2010).
- [2] H. Boukabcha, Application des intégrales de chemin et des inégalités de Bertlmann et Martin dans le domaine des basses énergies, (Mémoire de Magister, université USTHB Algérie, 2005).
- [3] H.E. Ji-Huan. Some asymptotic methods for strongly nonlinear equations. *International journal of Modern physics B*, 20 (10) (2006) 1141.
- [4] E. Schrodinger, Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen der physik*, 385 (13) (1926) 437.
- [5] P.A.M. Dirac, The principles of quantum mechanics. (Oxford university press, 1981).
- [6] R.P. Feynman, Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Reviews of modern physics* 20(2) (1948) 367.
- [7] R.P. Feynman and A. R. Hibbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. (McGraw-Hill New-York,1965).
- [8] I. H. Duru and H. Kleinert. Solution of the path integral for the H-atom. *Physics Letters B* 84 (2) (1979) 185.
- [9] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Mathematics. (River Edge, 2004).
- [10] M. Aizenman, The intersection of Brownian paths as a case study of a renormalization group method for quantum field theory. *Quantum Field Theory: A Selection of Papers in Memoriam Kurt Symanzik* (1985) 91.

-
- [11] M.G. Garcia, et al. New solutions of the D-dimensional Klein–Gordon equation via mapping onto the nonrelativistic one-dimensional Morse potential. *Annals of Physics* 378 (2017) 88.
- [12] O. Mustafa, A new deformed Schiöberg-type potential and ro-vibrational energies for some diatomic molecules. *Physica Scripta* 90 (6) (2015) 065002.
- [13] M. Badawi, N. Bessis and G. Bessis. On the introduction of the rotation-vibration coupling in diatomic molecules and the factorization method. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 5(8) (1972) L157.
- [14] A.O. Barut and I.H. Duru. Path integral formulation of quantum electrodynamics from classical particle trajectories. *Physics Reports* 172(1) (1989) 1.
- [15] S. Mameri, Quantification par l'intégrale de chemin d'un ensemble de potentiels déformés, (Thèse de Magister, Université Mentouri-Constantine, 2010).
- [16] L. Boudebza, Super-Intégrabilité sur une hyperboloïde à deux dimensions, (Thèse de Magister, Université Mentouri Constantine, 2007).
- [17] H. Cheriaf and I. Alliche, Application de la méthode de Duru-Kleinert sur un système physique d'un potentiel de Deng-Fan. (Mémoire de Master, Université de khemis Miliana, 2017).
- [18] F. Constantinescu et E. Magyari, Problems in quantum mechanics (Pergamon press, Oxford, 2013).
- [19] P. Strange, Relativistic quantum mechanics : with applications in condensed matter and atomic physics. (Cambridge New York, Cambridge University Press, 1998).
- [20] C. Aslangul, Application de la mécanique quantique, de l'atome au solide. (MIPI-16, Paris 6, 2004).
- [21] A.Z. Capri, Relativistic Quantum Mechanics And Introduction to Quantum Field Theory, (World Scientific, 2002).
- [22] R.A.M. Dirac, the principles of quantum mechanics (oxford university press, 1985).
- [23] W. R. Johnsona, K. T. Cheng and M. H. Chenb, Accurate relativistic calculations including QED contributions for few-electron systems. *Theoretical and Computational Chemistry* 14 (2004)120.

-
- [24] A. Wachter and H. Henning. Compendium of theoretical physics. (Springer Science & Business Media, 2006).
- [25] A. Tilbi, Intégrale de chemin semi-classique et théorie de Broglie-Bohm, (Thèse de Doctorat, Université Mentouri constantine, 2007).
- [26] C. Grosche, Conditionally solvable path integral problems. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 28(20) (1995) 5889.
- [27] M.P. Morse, Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. *Physical review* 34(1) (1929) 57.
- [28] O. Mustafa, A new deformed Schiöberg-type potential and ro-vibrational energies for some diatomic molecules. *Physica Scripta* 90 (6) (2015) 065002.
- [29] T.A. Akanbi, C.A. Onate and O.Y. Oludoun. Eigensolutions and thermodynamic properties of deformed and modified Morse potential model. *AIP Advances* 11(4) (2021) 045213.
- [30] C. Grosche and F. Steiner, Table of Feynman path integrals (Springer, Berlin, 1998).
- [31] P. Camiz, A. Gerardi, C. Marchioro, E. Presutti and E. Scacciatelli. Exact Solution of a Time-Dependent Quantal Harmonic Oscillator with a Singular Perturbation. *Journal of Mathematical Physics* 12 (1971) 2040.
- [32] F. Calogero, Ground State of a One-Dimensional N-Body System. *Journal of Mathematical Physics* 10(12) (1969) 2197.
- [33] I. Leghrib, Intégrale de chemin en mécanique quantique, (Mémoire de Magister, Université constantine I, 2013).
- [34] A. Frank and K. B. Wolf, Lie algebras for systems with mixed spectra. I. The scattering Pöschl–Teller potential. *Journal of mathematical physics* 26 (1985) 973-983.
- [35] H. Hamdi, Formalisme de Feynman pour Particule non Relativiste dans un Champ Magnétique non Homogène avec la Distance Minimale, (Mémoire de Master, Université Kasdi Merbah Ouargla, 2017).
- [36] A.K. Roy, Accurate ro-vibrational spectroscopy of diatomic molecules in a Morse oscillator potential. *Results in physics* 3 (2013) 103.

- [37] I. Nasser, M.S. Abdelmonem, H. Bahlouli and A.D. Alhaidari, The rotating Morse potential model for diatomic molecules in the tridiagonal J-matrix representation: I. Bound states, *Journal of Physics B* 40 (2007) 4245.
- [38] I.J. Njoku, Relativistic solutions of the morse potential via the formula method, *Chemical Physics Impact* 5 (2022) 100113.
- [39] O.J. Oluwadare and K.J. Oyewumi, Energy spectra and the expectation values of diatomic molecules conned by the shifted Deng-Fan potential, *The European Physical Journal Plus* 133 (2018) 422.
- [40] H. Boukabcha, M. Hachama and A. Diaf, Ro-vibrational energies of the shifted Deng-Fan oscillator potential with Feynman path integral formalism, *Applied Mathematics and Computation* 321 (2018) 121.
- [41] S.E. Aid, H. Boukabcha and D. Benzaid, Non-relativistic treatment of generalised inverse quadratic Yukawa potential via path integral approach, *Indian Journal of Physics* 97 (2023) 1989.
- [42] S. Khelifi and M. Zeffanine, Représentation des intégrales de chemin pour l'équation de Klein-Gordon, (Mémoire de Master, Université de khemis Miliana, 2021).

Annexe: Approximation de Pekeris

L'approximation de Pekeris [40, 41, 42] est fondée sur le passage du terme centrifuge dans une série des exponentielles en fonction de la distance internucléaire r . Premièrement, nous appliquons le changement de coordonnées $x = \frac{r-r_e}{r_e}$ dans le terme en $\frac{1}{r^2}$ dans la limite centrifuge, ce qui donne :

$$V(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r_e^2} \frac{1}{(x+1)^2} = c \frac{1}{(x+1)^2} \quad (3.85)$$

où $c = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r_e^2}$.

Le terme $\frac{1}{(x+1)^2}$ peut aussi être élaborée sous la forme d'une série de Taylor d'ordre 3, autour de $x = 0$ ($r = r_e$) comme suit:

$$\frac{1}{(x+1)^2} \simeq 1 - 2x + 3x^2 - 4x^3, \quad (3.86)$$

deuxièmement, son évolution en termes sur les exponentielles provoquées:

$$\frac{1}{(x+1)^2} = (c_0 + c_1 e^{-\alpha x} + c_2 e^{-2\alpha x}), \quad (3.87)$$

avec

$$e^{-\alpha x} \simeq 1 - \alpha x + \frac{\alpha^2 x^2}{2} - \frac{\alpha^3 x^3}{3}, \quad (3.88)$$

qui aboutit à cette nouvelle forme de $\frac{1}{(x+1)^2}$

$$\frac{1}{(x+1)^2} \simeq (c_0 + c_1 + c_2) - (c_1 + 2c_2) \alpha x + \left(\frac{c_1}{2} + 2c_2\right) \alpha^2 x^2 - \left(\frac{c_1}{6} + \frac{4c_2}{3}\right) \alpha^3 x^3. \quad (3.89)$$

En ne tenant pas compte des conditions de deuxième ordre de cette expansion, nous déterminerons les paramètres suivants c_0, c_1 et c_2 , en comparant l'équation (3.86) avec l'équation (3.89)

$$\begin{aligned}c_0 &= 1 - \frac{3}{\alpha r_e} + \frac{3}{\alpha^2 r_e^2}. \\c_1 &= \frac{4e^{\alpha r_e}}{\alpha r_e} - \frac{6e^{\alpha r_e}}{\alpha^2 r_e^2}. \\c_2 &= -\frac{(e^{\alpha r_e})^2}{\alpha r_e} + \frac{3(e^{\alpha r_e})^2}{\alpha^2 r_e^2}.\end{aligned}$$

Résumé

Dans le cadre des intégrales de Feynman et dans le cas du potentiel de Morse, nous avons présenté des solutions approximatives à deux potentiels scalaire et vectoriel égaux de l'équation de Dirac. Ce dernier n'admet pas de solutions exactes pour les états " $\ell \neq 0$ ". Pour ce faire, une approximation du terme centrifuge a été effectuée, cela nous a permis d'obtenir l'énergie discrète et la fonction d'onde. D'après l'utilisation de la technique Duru-Kleinert par transformation spatiotemporelle.

Le propagateur de potentiel de Morse a été transformé en celui du potentiel de l'oscillateur harmonique radial. Les énergies des molécules H₂, LiH, HCl, CO, ScH, ScN, Scf et I₂ pour les états bas et haut sont calculées. Nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus numériquement, et beaucoup mieux que ceux d'autres méthodes. Nous avons utilisé une version de logiciel Maple pour donner des résultats numériques.

Les mots clés :

Intégrale de chemin, équation Dirac, potentiel de Morse, spectre d'énergie, fonction d'onde.

Abstract:

In the framework of the Feynman integrals and in the case of the Morse potential, we have presented approximate solutions to two equal scalar and vector potentials of the Dirac equation. The latter does not admit exact solutions for states with ' $\ell \neq 0$ '. To do so, an approximation of the centrifugal term was performed, allowing us to obtain the discrete energy and the wave function. According to the use of the Duru-Kleinert technique through space-time transformation.

The Morse potential propagator has been transformed into a radial harmonic oscillator potential. The energies of the molecules H₂, LiH, HCl, CO, ScH, ScN, Scf and I₂ for the low and high states are calculated. Our results are in good agreement with those obtained numerically, and much better than those of other methods. We have used a version of Maple software to give the numerical results.

Key Words:

Path integral, the Dirac equation, Morse potential, energy spectrum, wave function.

تلخيص

في اطار تكاملات Feynman و في حالة كمون Morse قدمنا حلولا تقريبية لامكانيات متوازنة ومتجهية متساوية في معادلة ديراك هذا الخير لا يقبل الحلول للحالات $\ell \neq 0$ للقيام بذلك تم اجراء تقريب لمصطلح الطرد المركزي مما سمح لنا بالحصول على الطاقة المنفصلة ووظيفة الموجة وفقا لاستخدام تقنية Duru-Kleinert من خلال التحول الزماني المكاني.

تم تحويل ناشر Morse المحتمل الى امكانيات الهزاز التوافقي الشعاعي يتم حساب طاقات جزيئات HCl، H₂، Li ، ScF ، ScN، ScH، CO و I₂ للحالات المنخفضة و العالية. تتوافق نتائجنا جيدا مع تلك التي تم الحصول عليها عدديا و هي افضل بكثير من نتائج الطرق الاخرى. استخدمنا برنامج Maple.

الكلمات المفتاحية :

تكامل المسارات، معادلة ديراك ، كمون مورس، دوال الموجة، طيف الطاقة .