REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE LENSEIGNEMENT SUPERIEURE
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE MEDEA
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE



MEMOIRE

présenté pour obtenir le diplôme de

Master Physique

Option : Physique Théorique

Par

GHORFA leila

OTMANI Hamida

THEME

Détermination du spectre d' énergie du potentiel multi-paramétres via le formalisme de Feynman

---

Evalué par le jury composé de :

Président	M. K. Bouchachia	M.C.B	Univ. Médéa
Examinatrice	Mme. S. Hattou	M.A.A	Univ. Médéa
Examinateur	M. O. Cherroud	M.C.B	Univ. Médéa
Encadreur	Mme. A. Amrouche	M.C.B	Univ. Médéa

2019/2020

Résumé

Dans le cadre des intégrales de Feynman et dans le cas du potentiel multi-paramètres déformé, nous déterminons le spectre dĕnergie des états $''\ell''$ et les fonctions dònde, en utilisant une approximation du terme centrifuge de Pekeris puis une transformation dèspace-temps de Duru -Kleinert pour des valeurs positives et négatives du paramètre de déformation « q» . Celle-ci nous a permis de passer dùn propagateur dont la forme est complique au propagateur de propagateur de Pöschl –Teller dont lèxpression est bien connue,

Par ailleurs, Nous avons la fonction de green relative à un propagateur donné, Nous permet de tirer à partir de ses pôles le spectre dĕnergie et les fonctions dòndes correspondantes.

Les potentiels sont obtenus comme cas particuliers du potentiel multi paramètres de type exponentiel, leurs spectres dĕnergie et leurs fonctions propres sont déduites directement. Nos résultats sont en très bon accord avec ceux obtenus par dàutres méthodes.

Mots clés Intégrales de Feynman, potentiel multi-paramètres déformé, approximations de Pekeris, Ikhdair et Green Aldrich, transformation dèspace-temps de Duru –Kleinert, spectre dĕnergie.

Abstract

In the Framework of the Feynman path integrals, we have determined the$''\ell''$ energy spectrum and the associated wave functions, related to the deformed multi-parameters potential.

Using an approximation for the centrifugal term and Duru–Kleinert space–time transformation for both positive and negative deformation parameters. This approximation allowed us to move form the relative propagator to the complicated form of potential and to the modified Poschl-Teller whose expression is well known.

the poles of the Green's function that will be obtained lead us to the discrete energy spectrum, while the corresponding wave function will be extracted from the residues at the poles. Several potentials are obtained as special cases of the general exponential-type potential. Thus, their eigenvalues and eigenfunctions are deduced straightforwardly.

Our results are in very good agreement with those obtained with other methods.

Keywords Paths integral, propagator, Green function, Spectrum, Energy, multi-Parameters potential, Pekeris , Ikhdair and Green Aldrich approximations.

ملخص

في سياق تكاملات المسار قمنا بتحديد طيف الطاقة للحالات « ℓ » وكذا دوال الموجة الموافقة لها باستخدام كمون متعدد الوسائط

وذلك باستخدام تقريب الحد المركزي يتبعه تقنية التحويل الفضائي- الزماني لديرو-كلينر من اجل قيم سالبة وموجبة لمعامل التشويه

وذلك باستخدام تقريب الحد المركزي يتبعه تقنية التحويل الفضائي-الزماني ل ديرو-كلينر من اجل قيم سالبة وموجبة لمعامل التشويه

كما يمكننا هذا الحساب التقريبي من الانتقال من المنتشر النسبي الصعب إلى المنتشر بوشل- تيلر الذي نعرف عبارته

أقطاب هذه الأخيرة تؤدي بنا إلى استخراج طيف الطاقة ودوال الموجة المرافقة من الرواسب عند القطبين

علاوة على ذلك ، تم الحصول على كممونات كحالات خاصة للكمون العام للنوع ألأسي و يتم استنتاج طيف طاقتهم مباشرة.

قدمنا نتائجنا على شكل جداول وهي تتوافق مع نتائجنا بشكل جيد جدًا مع تلك المحسوبة بطرق أخرى

الكلمات المفتاحية : تكاملات المسار, الناشر, دالة غرين, طيف الطاقة, كمون متعدد الوسائط

Remerciements

En tout premier lieu, nous remercions le Bon Dieu, tout puissant, de nous avoir donné la force pour survivre, ainsi que l'audace pour dépasser toutes les difficultés.

Ce travail a fait l'objet d'un mémoire de master élaboré au Département des sciences de la matière, faculté des sciences, spécialité physique théorique. à l'université de Médéa.

Nous tenons à exprimer toute nos gratitude et notre profonde reconnaissance à notre Directeur de mémoire Madame AMROUCHE ASSIA. Nous la remercions de nos avoir encadrée, orientée, aidée et conseillée et pour sa disponibilité et la confiance qu'elle nous a accordée.

Nous adressons nos remerciements à Mr K. BOUCHACHIA Maître de conférences à l'université de Médéa de nous ont honoré en acceptant de présider le jury de ce mémoire.

Nous exprimons également notre profonde gratitude à Madame S.HATTOU, et Monsieur O. CHERROUD Maîtres de conférences à l'université de Médéa pour avoir bien voulu examiner ce mémoire en faisant partie du Jury.

Enfin, nous remercions nos parents, nos amis, pour leur soutien constant et leurs encouragements et tous ceux qui nous ont aidées durant la réalisation de ce travail, même par un petit sourire d'encouragement.

GHORFA - OTMANI

Dédicace

Je dédie ce travail

À mes chers parents,

À ma grand-mère,

À mes chères sœurs Nour, Aya, Khawla,

À mon unique frère Mohamed el Amin,

À Mon ami Aimene Fathi,

À mes Amies Amira, Fatima, Noura, Sajiya et Chrifa,

À mes cousines et cousins, mes tantes et oncles

Et spécialement à mon binôme de ce travail Hamida.

Merci d'être toujours la pour moi.

Ghorfa Leila .

Dédicace

J*e dédie ce travail*

À mon père,

À ma mère,

À mes sœurs Nadia, Heyet, Houria, Bahia, Lina,

À mes frères : Karim, Brahim, Nabil,

À toutes mes Amies : Karima, Fatima, Assmà, Amani et Chahra,

Et spécialement à mon binôme de ce travail Leila.

Otmani Hamida.

Table des matières

Introduction 10

1 Notions fondamentales sur les intégrales de chemin **13**

1.1 Introduction 13

1.2 Idée de Feynman : expérience de Young 13

1.2.1 Généralisation 15

1.3 L'action classique 16

1.4 La forme discrète du propagateur 17

1.5 Propagateur dans l'espace de phase 18

1.6 Application 20

1.6.1 Expression du Propagateur d'une particule libre 20

2 Les transformations de coordonnées et de temps de Duru-Kleinert dans le formalisme de Feynman **22**

2.1 Introduction 22

2.2 Concept de « promotor » 23

2.3 Procédure de transformations d'espace-temps dans le formalisme de Feynman 24

2.4 Application : 32

2.4.1 Potentiel du coulomb 32

3 Détermination du spectre des énergies du potentiel multi-paramètres via les intégrales de chemin de Feynman **34**

3.1 Introduction 34

3.2 Traitement du potentiel multi-paramètres par le formalisme de Feynman 35
3.3 L'intégrale de chemin pour le potentiel multi-paramètres q-déformé 36
3.3.1 1^{er} Cas :$q > 0$ 36
3.3.2 $2^{ème}$ Cas :$q < 0$ 44
3.3.3 1^{er} cas : Potentiel de Rosen-Morse modifié 48
3.3.4 $2^{ème}$ cas : Potentiel d'Eckart 49
3.3.5 $3^{ème}$ cas : Potentiel de Coulomb écranté 49
3.3.6 Résultats et discussion 50

Conclusion **51**

Bibliographie **55**

Introduction

Il est bien connu que la physique classique était décrite par les lois de Newton pour la matière et les équations de Maxwell pour les ondes, où la physique a eu un succés remarquable dans l'explication de plusieurs phénomènes physiques au niveau macroscopique, mais à la fin du $19^{ème}$ siècle, les physiciens expérimentateurs ont fait connaissance avec la structure atomique de la matière. Ils ont découvert que les unités de la matière au niveau atomique se comportaient d'une façon imprévue, incontrôlable et que la physique classique newtonienne était incapable d'en rendre compte [1], nous pouvons citer comme exemples : le rayonnement du corps noir, l'effet Compton et l'effet photoélectrique.

Grâce aux idées de quantification de l'énergie (la théorie des quanta) de Bohr en 1900, elle fut développée à la fin du $19^{ème}$ siècle et le début du $20^{ème}$ siècle par une dizaine de physiciens européens. Ce problème fut entièrement résolu en $1926-1927$ dans une théorie qui fut appelée mécanique quantique. Cette nouvelle théorie permit de découvrir que les lois de probabilités en mécanique quantique différaient des lois classiques de Laplace [2].

Ce merveilleux événement historique est apparu au début du $20^{ème}$siècle que la mécanique quantique moderne ait commencé à la fois avec deux formulations mathématiques très différentes : l'équation différentielle de Schrödinger et l'algèbre matricielle de Heisenberg. Les deux approches, apparemment dissemblables, se sont avérées mathématiquement équivalentes. Ces deux points de vue étaient destinés à se compléter et à être finalement assemblés dans la théorie de la transformation de Dirac.

En effet, la mécanique des matrices est apparue en 1925, elle a fait un grand pas et a été réalisée par Heisenberg dans son article [3], qui sera appelé la "*mécanique matricielle*" et la seconde formulation, mécanique ondulatoire proposée par Schrödinger en1926, dans son article intitulé " *Quantification et valeurs propres* [4]". Ces deux formalismes sont basés sur la

connaissance de la formulation hamiltonienne [5] de la mécanique classique du système physique étudié.

En 1948, c'est en s'inspirant des travaux de Dirac [6], que Feynman a pu dériver une troisième formulation de la mécanique quantique basée sur le principe de la superposition [7, 8], la relation entre l'action classique et la mécanique quantique, et basée sur l'amplitude totale, appelée "*propagateur*" est proportionnelle à $\exp(\frac{i\mathcal{S}}{\hbar})$ ou $\mathcal{S}$ est l'action classique évaluée le long du chemin classique et donnée par $\mathcal{S} = \int Ldt$, où L est le lagrangien correspondant à tous les chemins possibles entre les points initials et finals. Alors que Dirac considérait seulement le chemin classique, Feynman a prouvé que tous les chemins contribuent dans un sens, la particule quantique prend tous les chemins, et les amplitudes relatives à tous les chemins s'ajoutent. Cette formulation est particulièrement intéressante puisqu'elle a le mérite d'établir le lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique. On doit noter qu'à la limite $\hbar \to 0$, la contribution essentielle au propagateur provient des chemins qui obéissent au principe vibrationnel classique $\delta\mathcal{S} = 0$. La formulation Lagrangienne de la mécanique quantique présente de nombreux avantages. A titre d'exemple, elle se prête aisément à une généralisation relativiste puisque le raisonnement est directement inscrit dans l'espace-temps.

A cet époque ce formalisme a traité des problèmes simples comme la particule libre et l'oscillateur harmonique mais trouve des difficultés dans le traitement de l'atome d'hydrogène. Ce problème a été résolu par l'introduction de transformation de Durut-Kleinert en 1979. Dès lors, cette transformation a sauvé le formalisme de Feynman dans l'étude de l'atome d'hydrogène et d'autres problèmes.

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 solides [10], en cosmologie [11] en électrodynamique quantique [12], etc.

Ce mémoire comporte trois chapitres. Le premier chapitre expose des notions fondamentales sur les intégrales de chemin de Feynman qu'est basée sur le propagateur et son application aux cas de la particule libre. Nous présenterons dans le second chapitre, la technique des transformations espace-temps de Duru-Kleinert. Nous pouvons en effet, via cette technique, ramener le calcul du propagateur de forme compliquée, à celui d'une forme connue. Nous l'appliquerons,

par la suite, aux cas du potentiel de Colomb. Dans le troisième chapitre, nous allons étudier le potentiel multi-paramétres dépendant d'un paramètre réel q de déformation via le formalisme des intégrales de chemin de Feynman afin de déterminer son spectre d'énergie relative aux états $''\ell''$, et ses fonctions d'onde. Nous présenterons également les approximations du terme centrifuge de pekeris [13], Ikhdair [14] et Green et Aldrich [15]. Un traitement du potentiel étudié sera fait en utilisant la méthode de Duru-Kleinert pour obtenir les fonctions d'onde et le spectre d'énergie, seront extraits à partir de la fonction de Green pour des valeurs positives et négatives du paramètre de déformation q, et on trouve les spectres des énergies des potentiels : Rosen-Morse modifié [16], Eckart [17] et Coulomb écranté.

Nos résultats seront présentés et discutés en les comparants à d'autres travaux.

Enfin, Nous terminons ce travail par une conclusion générale.

Chapitre 1

Notions fondamentales sur les intégrales de chemin

1.1 Introduction

L'intégrale de chemin est une intégrale fonctionnelle, c'est-à-dire que l'intégrant est une fonctionnelle et que la somme est prise sur des fonctions, et non sur des nombres réels ou complexes comme pour les intégrales ordinaires. Elle est bien adaptée à l'étude de systèmes à grand nombre de degrés de liberté où un formalisme basé sur l'équation de Schrödinger perd toute son utilité. Elle permet ainsi une analyse aisée de la théorie quantique des champs et de la mécanique statistique.

Nous présentons dans ce chapitre les notions fondamentales concernant les intégrales de chemin. On commence par l'idée de Feynman pour écrire la forme générale de propagateur, puis nous représentons l'action classique qui joue un rôle essentiel dans le formalisme de Feynman. Ensuite, nous donnons le propagateur en forme discrète. De plus, nous écrivons le propagateur dans l'espace de phase.

1.2 Idée de Feynman : expérience de Young

Pour construire son formalisme [18], Feynman [8] a imaginé un dispositif expérimental identique à celui de Young, dans lequel la source lumineuse a été remplacée par un faisceau

d'électrons. Considérons une expérience à deux fentes représentée sur la *figure* 1.1, chacune des particules (électrons) émise par la source à gauche a une certaine probabilité $P(x)$ de passer la double fente et d'être détectée à la position x à droite. Supposons qu'on ferme la fente F_2 et en laissant la fente F_1 ouverte, la probabilité de détection est alors changée, est notée par $P_1(x)$.

De même, la probabilité de détection avec la seule fente F_2 ouverte est donnée par $P_2(x)$.

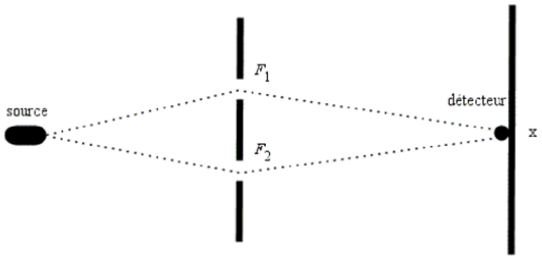


Fig 1.1 : Expérience de double fente.

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

$$P \neq P_1(x) + P_2(x). \tag{1.1}$$

D'après la théorie classique, il existe deux moyens possibles pour que la particule atteigne le détecteur : soit elle passe par la fente F_1, soit par la fente F_2.

Classiquement on s'attend alors à ce que la probabilité totale de détection soit égale à la somme des probabilités associés à chacune de ces voies.

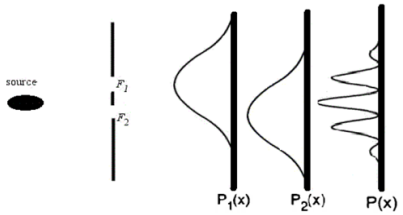


Figure 1.2 : Les probabilités$P_1(x)$, $P_2(x)$ et P(x) pour qu'une particule soit détectée à la position x.

En mécanique quantique, la densité de probabilité de trouver à l'instant t , la particule à la position x est donnée par :

$$\begin{aligned} P(x) &= |\Phi(x,t)|^2 \\ &= |\Phi_1(x,t) + \Phi_2(x,t)|^2 , \end{aligned} \tag{1.2}$$

où $\Phi(x,t)$ est une amplitude de probabilité complexe relative à sa position $x(t)$, elle est donnée par :

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2. \tag{1.3}$$

1.2.1 Généralisation

Feynman a généralisé ces résultats au cas d'une particule se déplaçant d'un point (x_a, t_a) à un autre point (x_b, t_b) dans l'intervalle de temps $[t_a, t_b]$. Supposons que la source des particules soit bien localisée à la position x_a et que le détecteur enregistre seulement les particules qui arrivent précisément au point x_b ; avec t_a est l'instant d'émission et t_b est l'instant de détection. Donc les amplitudes de détection $\Phi(x), \Phi_1(x)$ et $\Phi_2(x)$ sont des propagateurs de Feynman $K(x_b; t_b; x_a; t_a)$; on obtient :

$$K(x_b; t_b; x_a; t_a) = K_1(x_b; t_b; x_a; t_a) + K_2(x_b; t_b; x_a; t_a). \tag{1.4}$$

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

L'amplitude de probabilité totale et alors la somme de toutes les amplitudes partielles de probabilités relatives à tous les chemins possibles $x(t\ )$ suivis par la particule. Elle est appelée «*propagateur*», ce dernier est donné par :

$$K\left(x_b, t_b; x_a, t_a\right) = \sum_n K_n(x_b; t_b; x_a; t_a) \tag{1.5}$$

$$= \sum_{\substack{tous \\ les \\ che\min s \\ possible}} \Phi[x(t)], \tag{1.6}$$

avec

$$\Phi[x(t)] = const \exp \frac{i}{\hbar} \mathcal{S}\left[x(t)\right]. \tag{1.7}$$

Où la contribution de chaque chemin possède une phase proportionnelle à l'action $\mathcal{S}$.

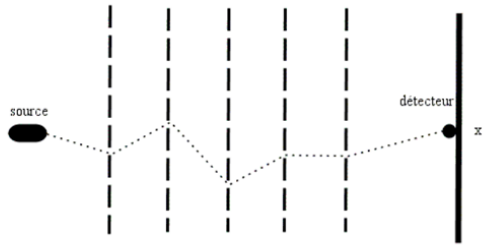


Fig 1.3 : plusieurs plans opaques, chacun percé de plusieurs fentes.

En résumé, la quantité physique importante dans le formalisme de Feynman, est le propagateur K représentant l'amplitude de probabilité pour une particule de se mouvoir d'un point espace-temps à un autre. Classiquement, il n'y a qu'un seul parcours ou une seule trajectoire suivie par la particule entre ces deux points, c'est celle qui correspond à une action minimale. En mécanique quantique par contre, tous les parcours contribuent de la même façon à l'amplitude, seule la phase varie en passant d'un chemin à un autre. Il est clair que les parcours qui contribuent le plus sont ceux qui se trouvent dans le voisinage immédiat du parcours classique.

1.3 L'action classique

Considérons une particule, à une dimension, en mouvement sous l'action d'un potentiel $V(x)$ allant du point $A\ (x_a, t_a)$ au point $B\ (x_b, t_b)$. Le mouvement de la particule est régi par le Lagrangien suivant :

$$L = \frac{1}{2}\mu\dot{x}^2 - V\left(x\right). \tag{1.8}$$

Avec μ représente la masse réduite de la molécule.

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

$$\mathcal{S} = \int_{t_a}^{t_b} L\left(x, \dot{x}, t\right) dt\ . \tag{1.9}$$

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

$$\delta\mathcal{S} = \mathcal{S}\left(x+\delta x\right) - \mathcal{S}\left(x\right) = 0. \tag{1.10}$$

Au premier ordre en δx .

Or

$$\begin{aligned}\mathcal{S}\left(x+\delta x\right) &= \int_{t_a}^{t_b} L\left(x+\delta x, \dot{x}+\delta\dot{x}, t\right) dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left(L\left(x,\dot{x},t\right) + \delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x}\right) dt \\ &= \mathcal{S}\left(x\right) + \int_{t_a}^{t_b} \left(\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x\frac{\partial L}{\partial x}\right) dt \ .\end{aligned} \tag{1.11}$$

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

$$\delta\mathcal{S} = \delta x \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\bigg|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \delta x \left(\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x}\right) dt \ . \tag{1.12}$$

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

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \tag{1.13}$$

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

1.4 La forme discrète du propagateur

Considérons deux points espace-temps(x_a, t_a) et(x_b, t_b) et divisons l'intervalle de temps $[t_a, t_b]$ en N intervalles égaux de largeur ε, avec $\varepsilon = t_i - t_{i-1}$ pour $i = 1, 2, 3..., N$. Posons $x_a = x(t_a)$ et $x_b = x(t_b)$. Vu que x_a et x_b sont fixes, dx_a et dx_b sont nulles.

D'une part, le propagateur relatif à une particule se mouvant entre deux points très voisins et soumise à un potentiel $V(x)$ peut s'écrire comme [19, 20] :

$$\begin{aligned}K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) &= K(x_{n+1}, x_n; \varepsilon) \\ &\equiv \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{\mu}\right]^{-1/2} \exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{\mu}{2}\frac{\left(x_{n+1}-x_n\right)^2}{\varepsilon^2} - V(x_n)\right]\right\}.\end{aligned} \tag{1.14}$$

Nous pouvons ainsi construire de proche en proche le propagateur global via les propagateurs partiels correspondants aux N intervalles de temps infinitésimaux ε où la sommation peut être évaluée par une fonctionnelle de la forme [21] :

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right) = \int \mathfrak{D}x\left(t\right)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\left(x\left(t\right)\right)\right], \tag{1.15}$$

où la mesure de Weiner $\mathfrak{D}$ [21] et l'action totale $\mathcal{S}$ sont respectivement données par :

$$\mathfrak{D}x\left(t\right) = \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{\mu}\right]^{-1/2}\prod_{n=1}^{N-1}\frac{dx_n}{\left[\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{-\frac{1}{2}}}, \tag{1.16}$$

et

$$\mathcal{S}\left(x\left(t\right)\right) = \sum_{n=1}^{N}\mathcal{S}\left(x_n,x_{n-1};\varepsilon\right) \equiv \sum_{n=1}^{N}\left[\frac{\mu}{2}\frac{\left(x_n-x_{n-1}\right)^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(x_n)\right]. \tag{1.17}$$

Notons que le chemin classique ($\hbar \to 0$) est minimise l'action et tous les chemins $x(t)$ sont possibles, alors est une intégrale fonctionnelle.

D'autre part, la formulation lagrangienne du propagateur présente des avantages certains par rapport aux autres formulations mathématiques de la mécanique quantique. Elle trouve, en effet, un vaste domaine d'application allant de la mécanique quantique standard à la théorie des champs .

1.5 Propagateur dans l'espace de phase

L'évolution d'une particule soumise à un potentiel $V(x)$ et repérée par les positions x_a et x_b aux instants fixés t_a et t_b respectivement, peut être décrite en définissant le propagateur de Feynman qui est l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution dans le temps $\mathbf{U}(t_b,t_a)$ entre deux états $|x_b\rangle$ et $|x_a\rangle$ de l'espace des configurations

$$\begin{aligned} K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right) &= \left\langle x_b\left|\mathbf{U}(t_b,t_a)\right|x_a\right\rangle \\ &= \left\langle x_b\left|e^{-\frac{iT}{\hbar}H}\right|x_a\right\rangle, \qquad T=t_b-t_a \quad . \end{aligned} \tag{1.18}$$

$[t_a, t_b]$ est l'intervalle de temps dans lequel se produit le passage de l'état $|x_a, t_a\rangle$ à l'éta $|x_b, t_b\rangle$.

En divisant l'opérateur d'évolution dans le temps en un produit de

N opérateurs infinitésimaux, par le produit de Lie-Trotter [22]. Nous aurons :

$$e^{-\frac{iT}{\hbar}H} = \lim_{N\to\infty}\left\{\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]\exp\left[-\frac{iT}{\hbar N}V(x_n)\right]\right\}^N. \tag{1.19}$$

Où p représente l'impulsion.

Alors on peut réécrire le propagateur comme :

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right) = \lim_{N\to\infty}\left\langle x_b\left|\left\{\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]\exp\left[-\frac{iT}{\hbar N}V(x_n)\right]\right\}^N\right|x_a\right\rangle. \tag{1.20}$$

En insérant $(N-1)$ fois la relation de fermeture $\int |x_n\rangle\, dx_n\, \langle x_n| = 1$, entre les N nouveaux opérateurs d'évolution dans le propagateur, on a donc :

$$\begin{aligned} K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right) = \lim_{N\to\infty}\int\ldots\int\prod_{n=1}^{N}\exp\left[-\frac{iTV(x_n)}{\hbar N}\right] \\ \times\left\langle x_n\left|\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]\right|x_{n-1}\right\rangle\prod_{n=1}^{N-1}dx_n. \end{aligned} \tag{1.21}$$

Nous injectons la relation de fermeture de l'espace des impulsions $\int |p_n\rangle\, dp_n\, \langle p_n| = 1$, dans l'expression de l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique,

$$\left\langle x_n\left|\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]\right|x_{n-1}\right\rangle = \int\langle x_n|\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]|p_n\rangle\,\langle p_n|x_{n-1}\rangle\, dp_n, \tag{1.22}$$

et les fonctions propres de l'opérateur p sont données par :

$$\left\langle x_n\left|\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]\right|x_{n-1}\right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{T}{2\mu N}p_n^2 - p_n(x_n - x_{n-1})\right]\right]\, dp_n, \tag{1.23}$$

et après intégration sur la variable p_j on a :

$$\left\langle x_n\left|\exp\left[-\frac{iTp^2}{2\hbar\mu N}\right]\right|x_{n-1}\right\rangle = \sqrt{\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon}}\exp\left[\frac{i\mu}{2\hbar\varepsilon}\left(x_n - x_{n-1}\right)^2\right], \tag{1.24}$$

où $\varepsilon = \frac{T}{N}$.

En insérant cette équation dans l'équation de propagateur $K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)$, on trouve

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=\lim_{N\to\infty}\int...\int\prod_{n=1}^{N}\sqrt{\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\mu}{2\varepsilon}(x_n-x_{n-1})^2-\varepsilon V(x_n)\right]\right]\prod_{n=1}^{N-1}dx_n. \tag{1.25}$$

Nous pouvons changer l'expression de terme $\prod_{n=1}^{N}e^{\omega_n}$ par $exp(\sum_{n=1}^{N}\omega_n)$ qui donne après

$$\begin{aligned}K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=&\lim_{N\to\infty}\left[\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{N/2}\\&\times\int...\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{\mu}{2\varepsilon}(x_n-x_{n-1})^2-\varepsilon V(x_n)\right]\right]\prod_{n=1}^{N-1}dx_n.\end{aligned} \tag{1.26}$$

Nous pouvons également mettre le propagateur sous une forme hamiltonienne :

$$\begin{aligned}K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=&\lim_{N\to\infty}\int...\int\exp\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\left[p_n(x_n-x_{n-1})-\varepsilon(\frac{p_n^2}{2\mu}-V(x_n))\right]\\&\times\left[\frac{1}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{N}\prod_{n=1}^{N-1}dx_n\prod_{n=1}^{N}dp_n.\end{aligned} \tag{1.27}$$

En utilisant les variables continues $x(t)$ et $p(t)$, nous pouvons réécrire cette équation sous la forme :

$$K\left(x_b,t_b;x_a,t_a\right)=\int...\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}\left(p\dot{x}\ -H(x,p)\right)dt\right]\ \mathfrak{D}x\left(t\right)\mathfrak{D}p\left(t\right). \tag{1.28}$$

C'est l'expression du propagateur de Feynman dans l'espace des phases.

1.6 Application

Afin d'illustrer le formalisme de Feynman, nous présentons cette application :

1.6.1 Expression du Propagateur d'une particule libre

A une dimension, Le lagrangien relatif d'une particule libre de masse μ, dans un potentiel $V(x)$ nul, qui est donné par

$$L=\frac{\mu}{2}\dot{x}^2. \tag{1.29}$$

L'action classique du système est définie par :

$$\mathcal{S}_{cl}(x(t)) = \int_{t_a}^{t_b} \frac{\mu}{2}\dot{x}^2 dt = \lim_{\varepsilon \to o} \sum_{n=1}^{N} \varepsilon \left\{ \frac{\mu}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 \right\}. \tag{1.30}$$

Et l'expression du propagateur est donnée par :

$$\begin{aligned} K &= \int \exp(i\frac{\mathcal{S}_{cl}(x(t))}{\hbar}) Dx(t). \\ &= \lim_{N\to\infty} \left[\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{N}{2}} \int \exp(i\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^{N} \left\{ \frac{\mu}{2} \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\varepsilon} \right)^2 \right\}) dx_1 dx_2 ... dx_{N-1} \end{aligned} \tag{1.31}$$

Ce qui revient à un simple calcul de la limite sur les intégrales gaussiennes de la forme :

$$\int (\sqrt[2]{\frac{\alpha\beta}{\pi^2}}) \exp[-\alpha(x_1 - x_0)^2 - \beta(x_2 - x_1)^2] dx_1 = (\sqrt[2]{\frac{\alpha\beta}{\pi(\alpha+\beta)}}) \exp[\frac{-\alpha\beta}{(\alpha+\beta)}(x_2 - x_0)^2]. \tag{1.32}$$

$$\int (\frac{\mu}{2\pi i\hbar\varepsilon}) \exp[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_1 - x_0)^2 + \frac{im}{2\hbar\varepsilon}(x_2 - x_1)^2] dx_1 = (\frac{\mu}{2\pi i\hbar 2\varepsilon})^{\frac{1}{2}} \exp[\frac{im}{2\hbar 2\varepsilon}]. \tag{1.33}$$

Ainsi de suite, si on continue les intégrations successives dans (1.33), on aura finalement :

$$K = (\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)})^{\frac{1}{2}} \exp[\frac{im}{2\hbar 2\varepsilon}(x_b - x_a)^2] \tag{1.34}$$

Cette expression représente le propagateur de la particule libre.

Il est possible de montrer que ce propagateur vérifie l'équation de Schrödinger, et reste donc une solution de nature quantique.

L'évaluation du propagateur est souvent confronté au problème de singularité, ce dernier a été surmonter par l'introduction de la méthode des transformations d'espace-temps du Duru-Kleinert qui est une combinaison d'une reparamétrisation des trajectoires et d'une transformation spatiale.

Chapitre 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. La formulation des intégrales du chemin a connu un succès remarquable dans le calcul du propagateur de l'oscillateur harmonique [8] et de la particule libre [22], mais pose des difficultés considérables dans l'étude de l'atome d'hydrogène [23, 24], car son potentiel représente un problème dans l'intégrale de chemin euclidien. Duru et Kleinert ont invoqué pour la première fois la transformation de Kustaanheimo-Stifel dans l'intégrale de chemin de potentiel de Coulomb puis ils sont réussis à trouver un traitement pour l'atome d'hydrogène en 1979 car ils sont utilisées une transformation spatiale associée par une transformation locale du temps. Dès lors, de nombreux potentiels ont été étudiés exactement [25, 26, 27] via les transformations de coordonnées et de temps.

La technique de Duru-Kleinert repose sur une transformation de coordonnées $x \rightarrow z$ [28] suivie d'une transformation temporelle $t \rightarrow \tau$ [29]. Nous notons qu'il existe deux types de transformations temporelles :

Transformation locale du temps : Elle dépend de la position où $d\tau = f[\overrightarrow{z}(t)]dt$, avec $f[\overrightarrow{z}(t)]$ est une fonction connue de la position $\overrightarrow{z}$.

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

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

Ces deux transformations sont les plus utiles seulement lorsqu'on les combinées avec une transformation de coordonnées appropriée [18].

Duru et Kleinert ont élaboré une transformation spatio-temporelle appelé *" transformation de Duru-Kleinert"*. Cette technique a permis de résoudre plusieurs problèmes non relativistes, très compliqués dans divers systèmes de coordonnées.

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

2.2 Concept de « promotor »

La fonction de Green $G(z_b, z_a; E)$ joue un rôle important dans le formalisme de Feynman, car elle nous donne le spectre des énergies à partir de ces pôles et les fonctions d'onde correspondantes à partir des résidus aux pôles. En outre, la fonction de Green n'est autre que la transformé de Fourier du propagateur, elle est donnée par :

$$G(z_b, z_a; E) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\infty e^{\frac{iE\tau}{\hbar}} K_\ell(z_b, z_a\,; \tau)\, dV. \tag{2.2}$$

Nous pouvons écrire cette équation comme suit :

$$G(z_b, z_a; E) = \frac{1}{i\hbar}\int P(z_b, z_a; \tau)\, d\tau. \tag{2.3}$$

Où le promotor $P(z_b, z_a; \tau)$ n'est autre que $e^{\frac{iE\tau}{\hbar}} K_\ell(z_b, z_a\,; \tau)$.

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

$$P(z_b, z_a; \tau) = \int e^{\frac{iw}{\hbar}} \mathfrak{D}z(\tau). \tag{2.4}$$

Où

$$\begin{aligned} w &= \int_{t_a}^{t_b} (L+E)\, dt \\ &= \mathcal{S} + E\,(t_b - t_a)\,, \end{aligned} \tag{2.5}$$

est appelée fonction caractéristique de Hamilton [10].

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

Dans cette section, on va exposer la méthode de Duru-Kleinert pour un système unidimensionnel [29].

Grace à cette méthode, nous pouvons passer d'un propagateur de départ difficile à calculer à une forme plus maniable. Cette technique repose sur une transformation de coordonnées $x \longrightarrow z$ suivie d'une transformation temporelle $t \longrightarrow \tau$. Pour mieux illustrer cette méthode, considérons une particule repérée par les positions a et b aux instants fixés t_a et t_b respectivemment. Dans l'espace des phases, le propagateur qui gouverne son évolution dans le potentiel$V(x)$ de forme compliquée [29] est défini par l'intégrale de chemin de Feynman :

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

Sous une forme discrète, ce propagateur (2.6) devient :

$$K_\ell\,(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \int ... \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\mathcal{S}_j\right] \prod_{j=1}^{N-1} dx_j, \tag{2.7}$$

avec

$$\mathcal{S}_j = \frac{\mu}{2\varepsilon}(x_j - x_{j-1})^2 - \varepsilon V(x_j). \tag{2.8}$$

Introduisons l'opérateur identité donné par :

$$\frac{1}{H-E} = f_r\,(x,t)\,\frac{1}{f_l\,(x,t)\,(H-E)\,f_r\,(x,t)}\,f_l\,(x,t)\,. \tag{2.9}$$

Où H et E sont respectivement, l'opérateur hamiltonien et l'opérateur de l'énergie du système alors que f_l et f_r sont deux fonctions arbitraires appelées les fonctions régulatrices.

Le pseudo-temps τ nouvel introduit à la place de t doit satisfaire la condition :

$$\int_0^{s_b} d\tau f_l\left(f\left(z\left(\tau\right)\right),\tau\right) f_r\left(f\left(z\left(\tau\right)\right);\tau\right) = T \equiv t_b - t_a. \tag{2.10}$$

La solution unique ($s_b > 0$) de l'équation(2.10) est :

$$s_b = \int_{t_a}^{t_b} \frac{dt}{f_l\left(x,t\right) f_r\left(x,t\right)} = \int_{t_a}^{t_b} \frac{dt}{f'^2(z)}. \tag{2.11}$$

Pour simplifier les calculs, nous avons choisi :

$$f_l\left(x,t\right) = f_r\left(x,t\right) = f'(z). \tag{2.12}$$

En outre, il existe une relation entre le propagateur $K_\ell(z_b,t_b;z_a,t_a)$ et la fonction de Green $G(z_b,z_a;E)$:

$$\begin{aligned} G(z_b,z_a;E) &= \langle z_b|\frac{1}{H-E-i\varepsilon}|z_a\rangle \\ &\equiv \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty dT e^{i(E+i\varepsilon)T/\hbar} K_\ell\left(z_b,z_a;T\right), \end{aligned} \tag{2.13}$$

où $\varepsilon > 0$

de même,

$$K_\ell\left(z_b,z_a;T\right) = \int_0^\infty \frac{dE}{2\pi i} e^{-iET/\hbar} G(z_b,z_a;E). \tag{2.14}$$

Nous remarquons que la fonction de Green $G(z_b,z_a;E)$ n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur$K_\ell(z_b,t_b;z_a,t_a)$.

Après l'introduction du double changement de variables , nous examinons dans ce qui suit, comment se transforme l'expression générale du propagateur(2.7).

L'énergie cinétique de la molécule de masse μ dans un intervalle de temps infinitésimal ε est défini par :

$$\varepsilon T_j = \frac{\mu}{2}\frac{\left[x_j - x_{j-1}\right]^2}{\varepsilon} = \frac{\mu}{2}\frac{\left[f\left(z_j\right) - f\left(z_{j-1}\right)\right]^2}{\varepsilon}. \tag{2.15}$$

Le terme $(x_j - x_{j-1})$ apparaissant d'une manière explicite dans l'équation ci-dessus s'écrit :

$$\triangle x_j = x_j - x_{j-1} \ , \tag{2.16}$$

où

$$\begin{cases} x_j = f\left(z_j\right) \\ x_{j-1} = f\left(z_{j-1}\right) \end{cases} . \tag{2.17}$$

Nous utilisons la notion de la mid-point :

$$\widetilde{z}_j = \frac{z_{j-1} + z_j}{2}, \tag{2.18}$$

et

$$\Delta z_j = z_j - z_{j-1}. \tag{2.19}$$

On pouvons exprimer z_j et z_{j-1} en fonction de $\widetilde{z}_j$ et Δz_j :

$$\begin{cases} z_j = \widetilde{z}_j + \frac{\Delta z_j}{2} \\ z_{j-1} = \ \widetilde{z}_j - \frac{\Delta z_j}{2} \end{cases} . \tag{2.20}$$

Le développement de $f(z_j)$ et $f(z_{j-1})$ en série de Taylor conduit à :

$$f(z_j) = f\left(\widetilde{z}_j + \frac{\Delta z_j}{2}\right) \equiv f(\widetilde{z}_j) + f'(\widetilde{z}_j)\frac{\Delta z_j}{2} + f^{(2)}(\widetilde{z}_j)\frac{\left(\Delta z_j\right)^2}{8} + f^{(3)}(\widetilde{z}_j)\frac{\left(\Delta z_j\right)^3}{48} + ..., \tag{2.21}$$

de même,

$$f(z_{j-1}) = f\left(\widetilde{z}_j - \frac{\Delta z_j}{2}\right) \equiv f(\widetilde{z}_j) - f'(\widetilde{z}_j)\frac{\Delta z_j}{2} + f\ ^{(2)}(\widetilde{z}_j)\frac{\left(\Delta z_j\right)^2}{8} - f^{(3)}(\widetilde{z}_j)\frac{\left(\Delta z_j\right)^3}{48} + ... \tag{2.22}$$

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

$$\Delta x_j = f\left(z_j\right) - f\left(z_{j-1}\right) \equiv f'(\widetilde{z}_j)\Delta z_j + f^{(3)}(\widetilde{z}_j)\frac{\left(\Delta z_j\right)^3}{24}, \tag{2.23}$$

ce qui donne :

$$(\Delta x_j)^2 = f'^2(\widetilde{z}_j)(\Delta z_j)^2\left[1 + \frac{1}{12}\frac{f^{(3)}(\widetilde{z}_j)}{f'(\widetilde{z}_j)}(\Delta z_j)^2\right], \tag{2.24}$$

nous avons utilisé ici le développement $(1+\varepsilon)^2 \approx 1 + 2\varepsilon$.

Le terme énergie cinétique aura pour forme :

$$\varepsilon T_j = \frac{\mu \left(\triangle z_j\right)^2 f'^2 \left(\widetilde{z}_j\right)}{2\varepsilon} \left[1 + \frac{1}{12} \left(\triangle z_j\right)^2 \frac{f''' \left(\widetilde{z}_j\right)}{f' \left(\widetilde{z}_j\right)}\right]. \tag{2.25}$$

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

$$\varepsilon V(x_j) = \varepsilon V \left\{f(\widetilde{z}_j\right\} + 0(\varepsilon^2) \equiv \varepsilon V(f_j). \tag{2.26}$$

Effectuons, dans le but d'écrire le terme T_j sous sa forme standard, un second changement de variable $t \longrightarrow \tau$ où la nouvelle variable temps τ est reliée à t par :

$$dt = \left[f^{'}(z(\tau))\right]^2 d\tau. \tag{2.27}$$

Le nouvel intervalle de temps est :

$$\sigma_j = s_j - s_{j-1}. \tag{2.28}$$

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

$$\varepsilon = \sigma_j f'(z_j) f'(z_{j-1}). \tag{2.29}$$

De plus, le développement de Taylor de $f'(z_j)$ et $f'(z_{j-1})$ est :

$$f' \left(z_j\right) = f' \left(\widetilde{z}_j\right) + f^{(2)}(\widetilde{z}_j) \frac{\Delta z_j}{2} + f^{(3)}(\widetilde{z}_j) \frac{\left(\Delta z_j\right)^2}{8} + ..., \tag{2.30}$$

et

$$f' \left(z_{j-1}\right) = f' \left(\widetilde{z}_j\right) - f^{(2)}(\widetilde{z}_j) \frac{\Delta z_j}{2} + f^{(3)}(\widetilde{z}_j) \frac{\left(\Delta z_j\right)^2}{8} + ... \tag{2.31}$$

On note que :

$$f \left(\widetilde{z}_j\right) = f_j \tag{2.32}$$

Le développement de $f' \left(z_j\right)$ et $f' \left(z_{j-1}\right)$ en série des puissances de $\widetilde{z}_j$ et Δz_j conduit à :

$$f'(z_j) f'(z_{j-1}) = \left[f'(\widetilde{z}_j)\right]^2 \left[1 + \frac{\left(\Delta z_j\right)^2}{4} \left\{\frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left(\frac{f_j^{(2)}}{f_j'}\right)^2\right\}\right]. \tag{2.33}$$

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

$$\varepsilon = \sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{1}{4} (\Delta z_j)^2 \left[\frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \left(\frac{f_j''}{f_j'} \right)^2 \right] \right\}. \tag{2.34}$$

Donc l'énergie cinétique devient :

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{\mu}{2} f_j'^2 (\Delta z_j)^2 \left(1 + \frac{1}{12} \frac{f^{(3)}(\widetilde{z}_j)}{f'(\widetilde{z}_j)} (\Delta z_j)^2 \right) \\ \times \frac{1}{\sigma_j f_j'^2 \left\{ 1 + \frac{1}{4} (\Delta z_j)^2 \left(\frac{f_j^{(3)}}{f_j'} - \frac{f_j''^2}{f_j^2} \right) \right\}}. \end{aligned} \tag{2.35}$$

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

$$\frac{\mu}{2\varepsilon} (\Delta x_j)^2 = \frac{\mu}{2\sigma_j} (\Delta z_j)^2 + \frac{\mu}{8\sigma_j} (\Delta z_j)^4 \left(\frac{f_j''^2}{f_j^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} \right). \tag{2.36}$$

Le terme exponentiel du propagateur est donné par :

$$e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_j} = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{\mu}{2\sigma_j} (\Delta z_j)^2 - \sigma_j \, f_j'^2 V_j + \frac{\mu}{8\sigma_j} \left(\frac{f_j''^2}{f_j^2} - \frac{2}{3} \frac{f_j^{(3)}}{f_j'} \right) (\Delta z_j)^4 \right\} \right], \tag{2.37}$$

alors que le terme énergie potentielle (2.26) s'écrira comme :

$$\varepsilon V(x_j) = \sigma_j f_j'^2 V(f_j) \equiv \sigma_j f_j'^2 V_j. \tag{2.38}$$

Sachant que :

$$dx_j = f'(z_j) \, dz_j. \tag{2.39}$$

Considérons la mesure :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \prod_{j=1}^{N-1} f'(z_j) \, dz_j. \tag{2.40}$$

Donc la relation (2.40) devient :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dx_j = \left[f'(z_N) \, f'(z_0) \right]^{-\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N} \sqrt{f'(z_j) \, f'(z_{j-1})} \prod_{j=1}^{N-1} dz_j. \tag{2.41}$$

En utilisant la relation de la démocratie :

$$\prod_{j=1}^{N-1} dz_j = \prod_{j=1}^{N} d\left(\triangle z_j\right). \tag{2.42}$$

Et le résultat de l'intégrale suivant :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-ax^2 - bx^4\right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-ax^2 - \frac{3b}{4a^2}\right), \tag{2.43}$$

Dans notre cas :

$$\begin{cases} a = \frac{\mu}{2i\hbar\sigma_j} \\ b = \frac{\mu\lambda_j}{8i\hbar\sigma_j} \end{cases}, \tag{2.44}$$

avec

$$\lambda_j = \left(\frac{f_j''^2}{{f_j}^2} - \frac{2}{3}\frac{f_j^{(3)}}{f_j'}\right). \tag{2.45}$$

Nous arrivons à :

$$e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_j} = \exp\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\mu}{2\sigma_j}\left(\Delta z_j\right)^2 - \sigma_j\left[f_j'^2 V_j + \triangle V_j\right]\right\}, \tag{2.46}$$

avec

$$\triangle V_j = \frac{3\hbar^2}{8\mu}\lambda_j. \tag{2.47}$$

La nouvelle forme du propagateur $K_\ell(z_b, z_a; s_b)$ prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} K_\ell(z_b, z_a; s_b) = \lim_{N\to\infty}\left[f'\left(z_b\right) f'\left(z_a\right)\right]^{\frac{-1}{2}} \prod_j^N \left[\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_j}\right]^{\frac{1}{2}} \prod_j^{N-1} dz_j \\ \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\mu(\Delta z_j)^2}{2\sigma_j} - \sigma_j\left[f_j'^2 V_j + \triangle V_j\right]\right\}\right]. \end{aligned} \tag{2.48}$$

Le pseudo temps "τ " vérifie la condition :

$$T = t_b - t_a \equiv \int_{s_a}^{s_b} d\tau\left[f'\left(z(\tau)\right)\right]^2. \tag{2.49}$$

Cette condition peut être formulée comme suit :

$$\left[f'\left(z_b\right) f'\left(z_a\right)\right] \int_0^\infty ds\delta\left[T - \int_{s_a}^{s_b} d\tau\left[f'\left(z(\tau)\right]^2\right] = 1. \tag{2.50}$$

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

$$K_\ell\left(f\left(z_b\right),t_b;f\left(z_a\right),t_a\right)=\lim_{N\to\infty}f'\left(z_b\right)f'\left(z_a\right)\times\int_0^\infty\delta\left(T-\int_{s_z}^{s_b}d\tau\left[f'\left(z(\tau)\right]^2\right)K_N\;ds. \tag{2.51}$$

Où K_N est donné [23] par :

$$K_N=\left[f'\left(z_b\right)f'\left(z_a\right)\right]^{-\frac{1}{2}}\int\prod_{j=1}^{N}\left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\;\sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_j}\prod_{j=1}^{N-1}dz_j\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\mu(\Delta z_j)^2}{2\sigma_j}-\sigma_j\left[f_j'^2V_j+\triangle V_j\right]\right\}\right]. \tag{2.52}$$

La transformation de Fourier d'une fonction est :

$$\Psi\left(t\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\;\bar{\Psi}(E)dE, \tag{2.53}$$

et

$$\bar{\Psi}\left(E\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^{+\infty}e^{\frac{iEt}{\hbar}}\Psi\left(t\right)dt. \tag{2.54}$$

Nous pouvons montrer que :

$$\delta\left(E\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \tag{2.55}$$

et

$$\delta\left(t\right)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}dE. \tag{2.56}$$

D'où alors :

$$\delta\left(T-\int_{s_a}^{s_b}d\tau\left[f'(z(\tau))\right]^2\right)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{iE}{\hbar}\left(T-\int_{s_a}^{s_b}d\tau f'\left[(z(\tau))\right]^2\right)}\;dE. \tag{2.57}$$

Le propagateur devient :

$$K_\ell\left(f\left(z_b\right),t_b;f\left(z_a\right),t_a\right)=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}f'\left(z_a\right).f'\left(z_b\right)\left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_j}\right)^{\frac{N}{2}}\int_0^\infty ds\times\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{iTE}{\hbar}}dEe^{\frac{i}{\hbar}E\int_0^{s_b}d\tau f'^2}K_N. \tag{2.58}$$

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

$$K_\ell\left(f\left(z_b\right),t_b;f\left(z_a\right),t_a\right)=\lim_{N\to\infty}\frac{\sqrt{f'\left(z_b\right)f'\left(z_a\right)}}{2\pi\hbar}\left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_j}\right)^{\frac{N}{2}}\int_0^\infty ds \times\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{iET}{\hbar}}dE\int_{-\infty}^{+\infty}...\int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{j=1}^{N-1} dz_j\exp\left(\sum_{j=1}^{N}\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_j\right). \tag{2.59}$$

Avec

$$\mathcal{S}_j=\frac{\mu}{2\sigma_j}\left(\Delta z_j\right)^2-\sigma_j\left(f_j'^2V_j+\triangle V_j-Ef_j'^2\right). \tag{2.60}$$

Nous pouvons tirer la fonction de Green $G\left(z_b,z_a;E\right)$ transformée de Fourier du propagateur :

$$K_\ell\left(z_b,z_a;T\right)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{iTE}{\hbar}}G\left(z_b,z_a;E\right)dE\ . \tag{2.61}$$

Où

$$G\left(z_b,z_a;E\right)=\sqrt{f'\left(z_b\right)f'\left(z_a\right)}\int_0^\infty dsP\left(z_b,\ z_a;\mathbf{S}\right), \tag{2.62}$$

avec $\mathbf{S}=s_b-s_a$

Après identification :

$$P\left(z_b,z_a;\mathbf{S}\right)=\lim_{N\to\infty}\int...\int\prod_{j=1}^{N}\left(\frac{\mu}{2i\pi\hbar\ \sigma_j}\right)^{\frac{1}{2}}\prod_{j=1}^{N-1}dz_j\exp\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\widetilde{\mathcal{S}}_j\ , \tag{2.63}$$

où

$$\sum_{j=1}^{N}\widetilde{\mathcal{S}}_j=\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{\mu}{2\sigma_j}\left(\Delta z_j\right)^2-\sigma_j\left[f_j'^2\left(V_j-E\right)+\triangle V_j\right]\right\}. \tag{2.64}$$

A la limite continue ($N\mapsto\infty$)

$$\widetilde{\mathcal{S}}\left[z(s)\right]=\int_0^\infty\left[\frac{\mu}{2}\left(\frac{dq}{d\sigma}\right)^2-\widetilde{V}\left(z\right)\right]d\sigma, \tag{2.65}$$

avec

$$\widetilde{V}(z)=f'^2\left(z\right)\left[V(f\left(z\right))-E\right]+\triangle V_j. \tag{2.66}$$

Notons que le potentiel quantique ΔV_j à la forme d'une dérivée de Schwarz de f.

La fonction de Green donnée par (2.13) s'écrit finalement :

$$G(z_b, z_a; E) = \lim_{N\to\infty} \left[f'(z_a)\, f'(z_b)\right]^{1/2} \int_0^\infty ds_b \prod_J^N \left[\frac{\mu}{2i\pi\hbar\sigma_j}\right]^{1/2} \prod_J^{N-1} dz_j \times \prod_J^{N-1} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{\frac{\mu\left(\triangle z_j\right)^2}{2\sigma_j} - \sigma_j f_j'^2\left(V_j - E\right) + \sigma_j\lambda_j\right\}\right]. \tag{2.67}$$

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

2.4 Application :

2.4.1 Potentiel du coulomb

le potentiel de coulomb donnée par :

$$V(r) = \frac{A}{2mr^2} + \frac{e^2}{r}. \tag{2.68}$$

Nous avons utilisé les changements de variables suivants pour trouver le potentiel transformé $\widetilde{V}(z)$

$$f(z) = r = z^2 \text{ et } \frac{dt}{ds} = [f'(z)]^2, \tag{2.69}$$

ce qui donne

$$f'(z) = 2z; \qquad f''(z) = 2, \qquad f''' = 0; ds = \frac{dt}{4z^2}, \tag{2.70}$$

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

$$\tilde{V}(q) = (2z)^2\left[\frac{A}{2mz^4} + \frac{e^2}{z^2} - E\right] + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{mz^2}, \tag{2.71}$$

ou oncore

$$\widetilde{V}(q) = (\frac{4A}{\hbar^4} + \frac{3}{4})\frac{\hbar^2}{2mz^2} + 4e^2 - 4Ez^2. \tag{2.72}$$

Donc

$$\varphi^2 = (4A + \frac{3}{4}) \text{ et } \varkappa^2 = \frac{8E}{\mu} \tag{2.73}$$

le nouveau potentiel prend la forme :

$$\widetilde{V}(q) = -\frac{1}{2}\mu\ \varkappa^2 z^2 + \varphi^2 \frac{\hbar^2}{2mz^2} + 4e^2. \tag{2.74}$$

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

Dans ce chapitre, nous avons présenté la technique des transformations spatio-temporelles dans le formalisme de Feynman dans le cas de potentiel compliqué.

Chapitre 3

Détermination du spectre des énergies du potentiel multi-paramètres via les intégrales de chemin de Feynman

3.1 Introduction

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

Par ailleurs, à l'exception de l'onde $''s''$ seulement quelques potentiels sont exactement solubles pour $''\ell \neq 0''$comme le potentiel de l'oscillateur harmonique [30], le potentiel de Coulomb [31] et d'autres [32] . Par contre, la majorité des potentiels décrivant des systèmes physiques ne sont pas exactement soluble pour $''\ell \neq 0''$. Pour ce faire, différentes approximations du terme centrifuge ont été proposées, notamment celles relatives aux potentiels de type exponentiel [33]. Nous pouvons citer le potentiel de Morse [34], Manning-Rosen, Pöschl-Teller et Rosen Morse [35,36]. De plus, les potentiels à symétrie sphérique jouent un rôle très important en physique microscopique car ils sont largement utilisés comme une bonne approximation du potentiel d'interaction dans de nombreux domaines de la physique et de la chimie notamment en physique nucléaire [37], physique atomique [38] et moléculaire [39] et en chimie quantique [40]. Parmi

les méthodes proposées pour résoudre de tels problèmes, nous citons la méthode de Nikiforov-Uvarov N-U [41], la méthode de factorisation [42] et la méthode d'itération asymptotique [43] .

Dans ce chapitre, nous allons déterminer le spectre d'énergie des états $''\ell \neq 0''$du potentiel multi-paramètres de type exponentiel obtenue dans [44] via le formalisme des intégrales de chemin.

3.2 Traitement du potentiel multi-paramètres par le formalisme de Feynman

Le potentiel multi-paramètres de type exponentiel [45,46] est un modèle physique décrivant les interactions entre les noyaux et les structures des molécules diatomiques et polyatomiques. Il a la forme suivante :

$$V(r) = \frac{Aqe^{\frac{-r}{a}}}{1-qe^{\frac{-r}{a}}} + \frac{Bqe^{\frac{-r}{a}}}{\left(1-qe^{\frac{-r}{a}}\right)^2} + \frac{Cq^2e^{\frac{-2r}{a}}}{\left(1-qe^{\frac{-r}{a}}\right)^2}, \tag{3.1}$$

avec A,B,C sont des paramètres réels, $1/a$ désigne le rayon du potentiel et q représente le paramètre de déformation, il peut prendre des valeurs positives ou négatives.

Nous avons choisi les paramètres de potentiel multi-paramètres identique aux potentiels de la forme exponentielle de Rosen-Morse modifié [16], d' Eckart [17] er de Coulomb écranté. Nous utilisons l'approximation de Pekeries [13] du terme centrifuge adapté aux potentiels déformés pour résoudre les problèmes.

Enfin, nos résultats sont présentés et discutés en les comparants avec d'autres travaux.

3.3 L'intégrale de chemin pour le potentiel multi-paramètres q-déformé

En fonction du signe de q nous pouvons considérer deux cas correspondants au potentiel multi-paramètres déformé. Si on pose : $\alpha' = \frac{1}{a}$ et $\alpha' = 2\alpha$,$V(r)$ devient :

$$V(r) = \frac{Aqe^{-\alpha' r}}{1 - qe^{-\alpha' r}} + \frac{Bqe^{-\alpha' r}}{(1 - qe^{-\alpha' r})^2} + C\left(\frac{qe^{-\alpha' r}}{1 - qe^{-\alpha' r}}\right)^2. \tag{3.2}$$

3.3.1 1^{er} Cas :$q > 0$

Pour ramener le problème des états $''\ell''$ du potentiel (3.2)de cas général à un problème des états plus simple $''s''$, nous effectuons le changement de variable suivant :

$$qe^{-2\alpha r} = qe^{-\alpha' r} = \frac{t}{t+1}. \tag{3.3}$$

Donc $V(r)$ est donné par :

$$V(r) = \frac{A\frac{t}{t+1}}{1 - \frac{t}{t+1}} + \frac{B\frac{t}{t+1}}{\left(1 - \frac{t}{t+1}\right)^2} + C\left(\frac{\frac{t}{t+1}}{1 - \frac{t}{t+1}}\right)^2. \tag{3.4}$$

Ce qui donne :

$$V(r) = (A + B)t + (B + C)t^2. \tag{3.5}$$

On outre, le potentiel multi-paramètres n'est pas soluble pour $''\ell \neq 0''$, dans le but de résoudre ce problème, nous utilisons, pour le terme centrifuge l'approximation de pekeris [13] suivante :

$$\frac{1}{r^2} \simeq \frac{1}{r_e^2}\left(C_0 + C_1\frac{qe^{-\alpha' r}}{1 - qe^{-\alpha' r}} + C_2\frac{e^{-2\alpha' r}}{(1 - qe^{-\alpha' r})^2}\right). \tag{3.6}$$

Où r_e est la distance d'équilibre et C_0, C_1et C_2 sont des constantes définies comme [13] :

$$\begin{cases} C_0 = 1 + \frac{1}{\alpha'^2 r_e^2}\left[\begin{array}{c} 3 - 3\alpha' r_e + 6q\exp\left(-\alpha' r_e\right) + 3q^2\exp\left(-2\alpha' r_e\right) \\ -2q\alpha' r_e\exp\left(-\alpha' r_e\right) + q^2\alpha' r_e\exp\left(-2\alpha' r_e\right) \end{array}\right] \\ C_1 = \frac{2}{\alpha'^2 r_e^2}\left[\begin{array}{c} -9q + 3q\alpha' r_e - 3\exp\left(\alpha' r_e\right) + 2\alpha' r_e\exp\left(\alpha' r_e\right) \\ -9q^2\exp\left(-\alpha' r_e\right) - 3q^3\exp\left(-2\alpha' r_e\right) - q^3\alpha' r_e\exp\left(-2\alpha' r_e\right) \end{array}\right] \\ C_2 = \frac{1}{\alpha'^2 r_e^2}\left[\begin{array}{c} 18q^2 + 12q\exp\left(\alpha' r_e\right) + 3\exp\left(2\alpha' r_e\right) \\ -2q\alpha' r_e\exp\left(\alpha' r_e\right) - \alpha' r_e\exp\left(2\alpha' r_e\right) + 12q^3\exp\left(-\alpha' r_e\right) \\ +3q^4\exp\left(-2\alpha' r_e\right) + 2q^3\alpha' r_e\exp\left(-\alpha' r_e\right) + q^4\alpha' r_e\exp\left(-2\alpha' r_e\right) \end{array}\right] \end{cases}, \tag{3.7}$$

qui peut écrire comme :

$$\frac{1}{r^2} \simeq \frac{1}{r_e^2}\left(C_0 + C_1\frac{t}{q} + C_2\frac{t^2}{q^2}\right). \tag{3.8}$$

On remplace(3.5) et(3.8) dans la relation suivante :

$$V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\right); \qquad r^2 = r_i.r_{i-1}. \tag{3.9}$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned} V_{eff} &= (A+B)t + (B+C)t^2 + \gamma\left(C_0 + C_1\frac{t}{q} + C_2\frac{t^2}{q^2}\right) \\ &= (B + C + \frac{C_2}{q^2}\gamma)t^2 + (A + B + \frac{C_1}{q}\gamma)t + \gamma C_0 \\ &= Dt^2 + Et + F. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Où

$$\begin{cases} D = B + C + \frac{C_2}{q^2}\gamma \\ E = A + B + \frac{C_1}{q}\gamma \\ F = \gamma C_0 \end{cases}, \tag{3.11}$$

et

$$\gamma = \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu}\frac{1}{r^2}. \tag{3.12}$$

Les fonctions hyperboliques déformées, définies pour la première fois par Arai [47] comme suit :

$$\begin{cases} \cosh_q(\alpha r) = \frac{e^{\alpha r}+qe^{-\alpha r}}{2} \\ \sinh_q(\alpha r) = \frac{e^{\alpha r}-qe^{-\alpha r}}{2} \\ \coth_q(\alpha r) = \frac{\cosh_q(\alpha r)}{\sinh_q(\alpha r)} = \frac{1+qe^{-2\alpha r}}{1-qe^{-2\alpha r}} = \frac{1+\frac{t}{t+1}}{1-\frac{t}{t+1}} = 2t+1 \\ \tanh_q(\alpha r) = \frac{\sinh_q(\alpha r)}{\cosh_q(\alpha r)} = \frac{1-qe^{-2\alpha r}}{1+qe^{-2\alpha r}} = \frac{1-\frac{t}{t+1}}{1+\frac{t}{t+1}} = \frac{1}{2t+1}. \end{cases}, \tag{3.13}$$

donc

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

et

$$t^2 = \frac{\coth_q^2(\alpha r)}{4} + \frac{1}{4} - \frac{\coth_q(\alpha r)}{2}. \tag{3.15}$$

En injectant(3.14) et(3.15) dans(3.10) :

$$\begin{aligned} V_{eff} &= D(\frac{\coth_q^2(\alpha r)}{4} + \frac{1}{4} - \frac{\coth_q(\alpha r)}{2}) + E(\frac{\coth_q(\alpha r) - 1}{2}) + F \\ &= D\frac{\coth_q^2(\alpha r)}{4} + \coth_q(\alpha r)(\frac{E-D}{2}) + (F + \frac{D}{4} - \frac{E}{2}). \end{aligned} \tag{3.16}$$

On a la propriété suivante :

$$\cosh_q^2(\alpha r) - \sinh_q^2(\alpha r) = q. \tag{3.17}$$

Pour simplifier, on utilise :

$$\coth_q^2(\alpha r) = \frac{\cosh_q^2(\alpha r)}{\sinh_q^2(\alpha r)} = \frac{q + \sinh_q^2(\alpha r)}{\sinh_q^2(\alpha r)} = \frac{q}{\sinh_q^2(\alpha r)} + 1. \tag{3.18}$$

V_{eff} prend la forme suivante :

$$V_{eff}(r) = \frac{D}{4}\frac{q}{\sinh_q^2(\alpha r)} + \coth_q(\alpha r)(\frac{E-D}{2}) + (F + \frac{D}{2} - \frac{E}{2}). \tag{3.19}$$

Par conséquent :

$$\begin{cases} N = -(\frac{E-D}{2}) \\ L = \frac{D}{4}q \\ M = (F + \frac{D}{2} - \frac{E}{2}) \end{cases}. \tag{3.20}$$

L'expression finale de $V_{eff}(r)$ est :

$$V_{eff}(r) = -N \coth_q(\alpha r) + \frac{L}{\sinh_q^2(\alpha r)} + M. \tag{3.21}$$

Où

$$\begin{cases} N = \frac{-A+C}{2} + \frac{\gamma}{2q}\left(-C_1 + \frac{C_2}{q}\right) \\ L = (\frac{B+C}{4})q + \frac{C_1\gamma}{4q}\frac{1}{r_e^2} \\ M = (\frac{C-A}{2}) + \frac{\gamma}{2}\left(\frac{C_2}{q^2} - \frac{C_1}{q} + 2C_0\right) \end{cases}. \tag{3.22}$$

Nous utilisons le changement suivant [48], pour simplifier la forme compliquée de $\sinh_q(\alpha r)$ et $\cosh_q(\alpha r)$:

$$\begin{cases} \sinh_q(\alpha r) = \sqrt[2]{q}\sinh(\alpha y) \\ \cosh_q(\alpha r) = \sqrt[2]{q}\cosh(\alpha y) \end{cases}, \tag{3.23}$$

où

$$r = y + \frac{1}{\alpha}\ln(\sqrt[2]{q}). \tag{3.24}$$

Ceci conduit à :

$$V_{eff}(y) = -N\coth(\alpha y) + \frac{L'}{\sinh^2(\alpha y)} + M. \tag{3.25}$$

$$\begin{cases} N = \frac{-A+C}{2} + \frac{\gamma}{2q}\left(-C_1 + \frac{C_2}{q}\right) \\ L' = (\frac{B+C}{4}) + \frac{C_1\gamma}{4q^2} \\ M = (\frac{C-A}{2}) + \frac{\gamma}{2}\left(\frac{C_2}{q^2} - \frac{C_1}{q} + 2C_0\right) \end{cases}, \tag{3.26}$$

où $L' = \frac{L}{q}$

Transformation des coordonnées d'espace et du temps

Nous effectuons le changement de temps suivante [49, 50] :

$$r = f(z) = 2a \arg\coth(2\coth^2(z) - 1), \tag{3.27}$$

$$dt = f'^2(z)d\tau \tag{3.28}$$

où (z, τ) sont les nouvelles coordonnées espace-temps et

$$\begin{cases} f'(z) = \frac{2a}{\coth(z)} \\ f'^2(z) = \frac{(2a)^2}{\coth^2(z)} \\ f''(z) = \frac{2a(\coth^2(z)-1)}{\coth^2(z)} \\ f'''(z) = -\frac{4a(\coth^2(z)-1)}{\coth^3(z)} \end{cases} . \tag{3.29}$$

Où les fonctions $f^{'}, f^{''}$ et$f^{'''}$ sont les dérivées successives de la fonction f.

Cette transformation nous permet de passer d'un propagateur difficile à calculer à une forme de propagateur que l'on sait calculer.

Nous savons, par ailleurs, que la fonction de Green relative à un propagateur donné nous permet de tirer à partir de ses pôles le spectre des énergies et les fonctions d'onde correspondantes à partir des résidus aux pôles.

L'intégrale de chemin pour V_{eff} est :

$$K_\ell(r_b, r_a; T) = \int \mathfrak{D}r(t) \exp\left[\int_{t_a}^{t_b} (\frac{\mu}{2}\dot{r}^2 - V_{eff}(r))dt\right]. \tag{3.30}$$

Cette fonction est obtenue à partir de la transformée de Fourier du propagateur comme suit :

$$K_\ell(r_b, r_a; T) = \int \frac{dE}{2\pi i} e^{\frac{-iET}{\hbar}} G(r_b, r_a; T). \tag{3.31}$$

Avec

$$G(r_b, r_a; T) = \frac{i}{\hbar}[f'(z_a)f'(z_b)]^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\tau_b K_\ell(r_b, r_a; T). \tag{3.32}$$

L'expression de propagateur est donnée par :

$$K_\ell(z_b, z_a; \tau_b) = \int \mathfrak{D}z(\tau) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \left\{\frac{\mu}{2}\dot{z}^2 - f'^2(z)(V(f(z)) - E) - \Delta V(z)\right\} d\tau\right]. \tag{3.33}$$

Et le potentiel quantique $\Delta V(z)$ est définie par :

$$\Delta V(z) = \frac{\hbar^2}{8\mu}\left[3\frac{[f''(z)]^2}{[f'(z)]^2} - 2\frac{f'''(z)}{f'(z)}\right]. \tag{3.34}$$

On injecte les dérivées (3.29)dans l'expression (3.34), nous obtenons :

$$\Delta V(z)=\left(\frac{3}{\sinh^2 z}+\frac{1}{\coth^2 z}\right)\frac{\hbar^2}{8\mu}, \tag{3.35}$$

avec

$$\begin{cases}\tanh^2 z=-\frac{1}{\coth^2 z}+1\\ \coth^2 z=1+\frac{1}{\sinh^2 z}\end{cases}. \tag{3.36}$$

D'une part, nous remplaçons l'expression (3.36) dans l'expression du potentiel (3.25), on obtient :

$$V_{eff}(f(z))=V_{eff}(r)=-N(2\coth^2 z-1)+2L'(2\coth^2 z-2)\coth^2 z+M. \tag{3.37}$$

Ensuite on multiplie par f'^2 :

$$\begin{aligned}f'^2(z)\times V_{eff}(f(z))&=(2a)^2\left[\frac{-N(2\coth^2 z-1)+2L'(2\coth^2 z-2)\coth^2 z+M}{\coth^2 z}\right]\\&=(2a)^2(\mu+N)(\frac{1}{\coth^2 z})-2(2a)^2(N+2L')+4(2a)^2L'\coth^2 z.\end{aligned} \tag{3.38}$$

Nous remplaçons (3.36) dans (3.38), nous trouvons :

$$f'^2(z)\times V_{eff}(f(z))=-(2a)^2(\mu+N)(\frac{1}{\cosh^2 z})+(2a)^2(\mu-N)+\frac{4(2a)^2L'}{\sinh^2 z}. \tag{3.39}$$

Et :

$$f'^2(z)E=-(2a)^2E+\frac{(2a)^2E}{\cosh^2 z}. \tag{3.40}$$

Nous pouvons déduire :

$$f'^2(z)[V_{eff}-E]+\Delta V(z)=\begin{bmatrix}\left(\frac{2m(E-M-N)(2a)^2+\frac{\hbar^2}{4}}{2m\cosh^2 z}\right)\\ +\frac{8\mu L'(2a)^2+\frac{3\hbar^2}{4}}{2\mu\sinh^2 z}-(E-M+N)(2a)^2\end{bmatrix}. \tag{3.41}$$

En substituant(3.41) dans(3.33), nous obtenons :

$$\begin{aligned}K_\ell(z_b,z_a;\tau)&=\exp[\frac{i}{\hbar}\tau_b(2a)^2(E-M+N)]\\&\times\int\mathfrak{D}z(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^{\tau_b}\left\{\frac{\mu}{2}\dot{z}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{2s}{\sinh^2 q}+\frac{2c}{\cosh^2 q}\right)\right\}d\tau\right]\\&=\exp[\frac{i}{\hbar}\tau_b(2a)^2(E-M+N)]K_l^{MPT}(z_b,z_a;\tau_b).\end{aligned} \tag{3.42}$$

Avec

$$\begin{cases} \eta = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1 + \frac{8\mu B'}{\alpha^2\hbar^2}} \\ \upsilon = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{-2\mu(E+C+A)}{\alpha^2\hbar^2}} \end{cases}, \tag{3.43}$$

et

$$\begin{cases} 2s = \frac{8\mu B'(2a)^2}{\hbar^2} + \frac{3}{4} \\ -2c = \frac{(2a)^2(E-C-A)2\mu}{2\mu} + \frac{1}{4} \end{cases}, \tag{3.44}$$

L'intégrale de chemin (3.42) est similaire à la mise à jour au potentiel de Pöschl-Teller modifié [51], qui est un problème résolu est connu, en fait, l'adaptation de la notation de Frank et Wolf [52], la solution de l'intégrale de parcours lit : $2s = \eta\,(\eta - 1)$, $-2c = \upsilon\,(\upsilon - 1)$.

Les nombres k_1, k_2 sont définis en fonction de c et s comme suit :

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2}[1 \pm (\frac{1}{4} - 2c)^{\frac{1}{2}}] \\ k_2 = \frac{1}{2}[1 \pm (\frac{1}{4} + 2s)^{\frac{1}{2}}] \end{cases}. \tag{3.45}$$

L'expression de propagateur de Pöschl-Teller modifié s'écrit comme :

$$K_\ell^{MPT}(z_b, z_a; \tau_b) = \int_0^\infty dK \exp\left(-iT\frac{\hbar k^2}{2\mu}\right) \chi_K^{MP(k_1,k_2)}(z_b)\, \chi_K^{MP*(k_1,k_2)}(z_a) + \sum_{n=0}^{N_\mu} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\tau_b E_n^{MP}\right) \chi_{n,\ell}^{MPT(k_1,k_2)}(z_b)\, \chi_{n,\ell}^{MP*(k_1,k_2)}(z_a), \tag{3.46}$$

avec

$$k = k_1 - k_2 - n. \tag{3.47}$$

La limite supérieure N_m est le nombre maximal des états avec $0, 1, ..., n \leq N_m \leq K_1 - K_2 - \frac{1}{2}$. Les signes dépendent des conditions aux limites pour $z \to 0$ et $z \to \infty$, respectivement.

Le propagateur $K_\ell^{MPT}(z_b, z_a; \tau_b)$ est composé de deux terme : discrète et continué . Les fonctions d'onde des états liés sont explicitement données par [53] :

$$\begin{aligned} \chi_{n,\ell}^{MP(k_1,k_2)}(z) &= N_n^{(k_1,k_2)} (\sinh(z))^{2k_2-\frac{1}{2}} (\cosh(z))^{-2k_1+\frac{3}{2}} \\ &\times 2F_1\left(-k_1 + k_2 + k; -k_1 + k_2 - k + 1; 2k_2; -\sinh^2(z)\right) \\ &= \left[\frac{2n!(2k_1-1)\Gamma(2k_1-n-1)}{\Gamma(2k_2+n)\,\Gamma(2k_1-2k_2-n)}\right]^{\frac{1}{2}} (\sinh(z))^{2k_2-\frac{1}{2}} (\cosh(z))^{2n-2k_1+\frac{3}{2}} \\ &\times P_n^{[2k_2, 2(k_1-k_2-n)-1]}\left(\frac{1-\sinh^2(z)}{\cosh^2(z)}\right), \end{aligned} \tag{3.48}$$

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

$$N_n^{(k_1,k_2)} = \frac{1}{\Gamma(2k_2)}\left[\frac{(2k-1)\,\Gamma(k_1+k_2-K)\,\Gamma(k_1+k_2+k-1)}{\Gamma(k_1-k_2+k)\,\Gamma(k_1-k_2-k+1)}\right]. \tag{3.49}$$

Où les énergies sont données par :

$$E_n^{MPT} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[2(k_1-k_2-n)-1\right]^2. \tag{3.50}$$

Nous utiliserons les fonctions d'onde(3.48)et les valeurs propres (3.50) du propagateur de Pöschl-Teller modifié dans ce qui suit pour déterminer les fonctions d'onde et le spectre d'énergie du potentiel multi-paramètres(3.1).

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde

En substituant l'expression discrète de (3.46) dans (3.44), nous trouvons :

$$\begin{aligned} K_\ell(z_b,z_a;\tau_b) = \sum_{n=0}^{N_\mu} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}t_b\left[(E-M+N)(2a)^2 - E_n^{MPT}\right]\right\} \\ \times \chi_{n,\ell}^{MP(k_1,k_2)}(z_b)\,\chi_{n,\ell}^{MP*(k_1,k_2)}(z_a), \end{aligned} \tag{3.51}$$

En intégrant (3.51)sur le paramètre pseudo-temps τ, nous obtenons :

$$G_\ell(r_b,r_a;E) = \sum_{n=0}^{N_\mu} \frac{\chi_{n,\ell}^{MT(k_1,k_2)}(r_b)\,\chi_{n,\ell}^{MT*(k_1,k_2)}(r_a)}{E_{n,\ell}^{MT}-E}, \tag{3.52}$$

avec les valeurs de k_1 et k_2 sont données par :

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{1}{2}(s+2n+1)\right) + \frac{2\mu N(2a)^2}{\hbar^2(s+2n+1)}\right] \\ k_2 = \frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1+\frac{8\mu L'(2a)^2}{\hbar^2}}\right) \equiv \frac{1}{2}(1+s) \end{cases}, \tag{3.53}$$

avec

$$s = \sqrt{1+\frac{8\mu L'(2a)^2}{\hbar^2}}. \tag{3.54}$$

En posant $u = \frac{1}{2}\left[1-\coth(\alpha r)\right]$, d'après le potentiel de Pöschl-Teller modifié, et l'équation du propagateur (3.51) nous obtenons la fonction d'onde du potentiel multi-paramètres suivante :

$$\chi_{n,\ell}^{MP(k_1,k_2)}(r) = \sqrt[2]{\alpha} N_n^{(k_1,k_2)} u^{k_2-1-\frac{s}{2}-n}(u-1)^{\left(\frac{1}{2}\right)-k_2+n} \times 2F_1\left(-n,;2k_2-n-1;s+1;\frac{1}{1-u}\right)$$
$$= \left[\frac{\alpha(2k_2-1)\,n!\Gamma(2k_2-n-1)}{\Gamma(s+n+1)\,\Gamma(2k_2-s-n-1)}\right]^{\frac{1}{2}}\left(1-e^{-2r}\right)^{k_2}$$
$$\times \exp\left\{-2r\left[k_2-\frac{s}{2}-n-1\right]\right\} \times P_n^{(2k_2-n-s-2,s)\frac{1}{2}}\left(1-2e^{-2r}\right). \tag{3.55}$$

Où

$$E_{n,\ell}^{MP}(n,\ell) = \frac{1}{(2a)^2}E_n^{MPT} - N + M$$
$$= -\frac{\hbar^2}{(2a)^2 2m}\left[2(k_1-k_2-n)-1\right]^2 + N - M \tag{3.56}$$

En substituant les valeurs de k_1 et k_2 données par (3.53) dans l'expression (3.56), il en résulte :

$$E_{n,\ell}^{MP}(n,\ell) = -\frac{\hbar^2(s+2n+1)^2}{8\mu(2a)^2} - \frac{(2a)^2 2\mu N^2}{\hbar^2(s+2n+1)^2} + M\ . \tag{3.57}$$

3.3.2 $2^{ème}$ Cas :$q < 0$

Dans le cas où q est négatif ($q = -q'$), le potentiel (3.1) prendra la forme suivante :

$$V(r) = \frac{-Aq'e^{-\alpha' r}}{1+q'e^{-\alpha' r}} + \frac{-Bq'e^{-\alpha' r}}{(1+q'e^{-\alpha' r})^2} + C\left(\frac{q'e^{-\alpha' r}}{1+q'e^{-\alpha' r}}\right)^2, \tag{3.58}$$

nous effectuons le changement de variable suivant :

$$q'e^{-2\alpha r} = q'e^{-\alpha' r} = \frac{-t}{t+1}. \tag{3.59}$$

Donc $V(r)$ est donné par :

$$V(r) = \frac{-A\frac{-t}{t+1}}{1-\frac{t}{t+1}} + \frac{-B\frac{-t}{t+1}}{\left(1-\frac{t}{t+1}\right)^2} + C\left(\frac{\frac{t}{t+1}}{1-\frac{t}{t+1}}\right)^2. \tag{3.60}$$

Ce qui donne :

$$V(r) = (A+B)t + (B+C)t^2. \tag{3.61}$$

On outre, L'approximation du terme centrifuge deviendra ainsi :

$$\frac{1}{r^2} \simeq \frac{1}{r_e^2}\left(C_0 + C_1\frac{e^{-\alpha' r}}{1+q'e^{-\alpha' r}} + C_2\frac{e^{-2\alpha' r}}{(1+q'e^{-\alpha' r})^2}\right)$$
$$\simeq \frac{1}{r_e^2}\left(C_0 + C_1\frac{t}{q'} + C_2\frac{t^2}{q'^2}\right). \tag{3.62}$$

V_{eff} devient :

$$V_{eff} = (A+B)t + (B+C)t^2 + \gamma\left(C_0 + C_1\frac{t}{q'} + C_2\frac{t^2}{q'^2}\right)$$
$$= (B+C+\frac{C_2}{q'^2}\gamma)t^2 + (A+B+\frac{C_1}{q'}\gamma)t + \gamma C_0$$
$$= Dt^2 + Et + F. \tag{3.63}$$

Où

$$\begin{cases} D = B + C + \frac{C_2}{q'^2}\gamma \\ E = A + B + \frac{C_1}{q'}\gamma \\ F = \gamma C_0 \end{cases}, \tag{3.64}$$

De plus, nous pouvons écrire :

$$\tanh_{q'}(\alpha r) = \frac{1}{2t+1}, \tag{3.65}$$

donc

$$t = \frac{\tanh_{q'}(\alpha r) - 1}{2}, \tag{3.66}$$

et

$$t^2 = \frac{\tanh^2_{q'}(\alpha r)}{4} + \frac{1}{4} - \frac{\tanh_{q'}(\alpha r)}{2}. \tag{3.67}$$

En injectant(3.66) et(3.67) dans(3.63) :

$$V_{eff} = D(\frac{\tanh^2_{q'}(\alpha r)}{4} + \frac{1}{4} - \frac{\tanh_{q'}(\alpha r)}{2}) + E(\frac{\tanh_{q'}(\alpha r) - 1}{2}) + F$$
$$= D\frac{\tanh^2_{q'}(\alpha r)}{4} + \tanh_{q'}(\alpha r)(\frac{E-D}{2}) + (F + \frac{D}{4} - \frac{E}{2}). \tag{3.68}$$

On utilise :

$$\tanh^2_{q'}(\alpha r) = \frac{-q'}{\cosh^2_{q'}(\alpha r)} + 1. \tag{3.69}$$

V_{eff} prend la forme suivante :

$$V_{eff}(r) = \frac{-D}{4}\frac{q'}{\cosh^2_{q'}(\alpha r)} + \tanh_{q'}(\alpha r)(\frac{E-D}{2}) + (F + \frac{D}{2} - \frac{E}{2}). \tag{3.70}$$

Par conséquent :

.

$$\begin{cases} N = (\frac{E-D}{2}) \\ L = \frac{D}{4}q' \\ M = (F + \frac{D}{2} - \frac{E}{2}) \end{cases} . \tag{3.71}$$

En termes des fonctions hyperboliques, le potentiel effectif (3.71) peut s'écrire comme :

$$V_{eff}(r) = -N\tanh_{q'}(\alpha r) + \frac{L}{\cosh^2_{q'}(\alpha r)} + M. \tag{3.72}$$

Où

$$\begin{cases} N = \frac{A-C}{2} + \frac{\gamma}{2q}\left(-C_1 + \frac{C_2}{q'}\right) \\ L = (\frac{B+C}{4})q' + \frac{C_1\gamma}{4q'} \\ M = (\frac{C-A}{2}) + \frac{\gamma}{2}\left(\frac{C_2}{q'^2} - \frac{C_1}{q'} + 2C_0\right) \end{cases} . \tag{3.73}$$

Ceci conduit à :

$$V_{eff}(y) = N\tanh(\alpha y) - \frac{L'}{\cosh^2(\alpha y)} + M. \tag{3.74}$$

$$\begin{cases} N = \frac{A-C}{2} + \gamma\frac{1}{q'}\left(-C_1 + \frac{C_2}{q'}\right) \\ L' = (\frac{B+C}{4}) + \frac{C_1}{4q'^2} \\ M = (\frac{C-A}{2}) + \frac{\gamma}{2}\left(\frac{C_2}{q'^2} - \frac{C_1}{q'} + 2C_0\right) \end{cases} , \tag{3.75}$$

avec $L' = \frac{L}{q'}$

Transformation des coordonnées d'espace et du temps

Nous effectuons le changement de temps suivant [54] :

$$r = f(z) = 2a\,\mathrm{arg}\tanh(2\tanh^2(z) - 1), \tag{3.76}$$

Avec :

$$\begin{cases} f'(z) = \frac{2a}{\tanh(z)} \\ f'^2(z) = \frac{(2a)^2}{\tanh^2(z)} \\ f''(z) = -\frac{2a}{\sinh^2(z)} \\ f'''(z) = -\frac{4a(\cosh(z))}{\sinh^3(z)} \end{cases} . \tag{3.77}$$

nous trouvons :

$$\Delta V(z) = -\left(\frac{3}{\cosh^2 z} + \frac{1}{\sinh^2 z}\right)\frac{\hbar^2}{8\mu}. \tag{3.78}$$

En outre, la transformation(3.76) conduit à une nouvelle expression du potentiel (3.79)

$$V_{eff}(f(z)) = V_{eff}(r) = N(2\tanh^2(z) - 1) - L'\left[1 - \left(-1 + 2\tanh^2(z)\right)^2\right] + M \tag{3.79}$$

Ou encore :

$$f'^2(z)[V_{eff}(f(z)) - E] + \Delta V(z) = \begin{bmatrix} (2a)^2\left(\frac{-2\mu(E+M+N)+\frac{\hbar^2}{4}}{2\mu\sinh^2 z}\right) \\ -\frac{8\mu L'(2a)^2+\frac{3\hbar^2}{4}}{2\mu\cosh^2 z} + (-E-M+N)(2a)^2 \end{bmatrix} \tag{3.80}$$

En substituant(3.80) dans (3.33), nous obtenons :

$$\begin{aligned} K_\ell(z_b, z_a; \tau) &= \exp[\frac{i}{\hbar}\tau_b (2a)^2 (E + M - N)] \\ &\times \int \mathfrak{D}z(\tau) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^{\tau_b}\left\{\frac{\mu}{2}\dot{z}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{2s}{\sinh^2 z} + \frac{2c}{\cosh^2 z}\right)\right\} d\tau\right] \\ &= \exp[\frac{i}{\hbar}\tau_b (2a)^2 (E + M - N)] K_l^{MPT}(z_b, z_a; \tau_b). \end{aligned} \tag{3.81}$$

Avec

$$\begin{cases} \upsilon = \frac{1}{2} \pm \sqrt{1 + \frac{8\mu B'}{\alpha^2\hbar^2}} \\ \eta = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{-2\mu(E+C+A)}{\alpha^2\hbar^2}} \end{cases} . \tag{3.82}$$

En posant $u = \frac{1}{2}[1 + \tanh(\alpha r)]$, la fonction d'onde de potentiel étudié est donnée par :

$$\begin{aligned}\chi_{n,\ell}^{MP(k_1,k_2)}(r) &= \frac{N_n^{(k_1,k_2)}}{\sqrt{\frac{1}{\alpha}}} u^{K_2-\left(\frac{1}{2}\right)}(1-u)^{\left(\frac{s}{2}\right)-K_2-n} \times 2F_1(-n, s-n; 2K_2; u) \\ &= \left[\left(1-\frac{4\mu N}{\alpha^2\hbar(s-2n-1)^2}\right)\frac{(s-2K_2-2n)\,n11\Gamma(s-n)}{\Gamma(s+1-n-2K_2)\,\Gamma(2K_2+n)}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times 2^{n+\frac{(1-s)}{2}} \times [1-\tanh(\alpha r)]^{\frac{s}{2}-K_2-n}[1+\tanh(\alpha r)]^{K_2-\frac{1}{2}} \\ &\times P_n^{(s-2K_2-2n,2K_2-1)}\tanh(\alpha r)\,. \end{aligned} \tag{3.83}$$

avec les valeurs de k_1 et k_2 sont données par :

$$\begin{cases} k_1 = \frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1+\frac{8\mu L'(2a)^2}{\hbar^2}}\right) \equiv \frac{1}{2}(1+s) \\ k_2 = \frac{1}{2}\left[\left(1+\frac{1}{2}(s+2n+1)\right)+\frac{2\mu N(2a)^2}{\hbar^2(s+2n+1)}\right] \end{cases}. \tag{3.84}$$

Cela nous amène au spectre d'énergie suivant :

$$\begin{aligned} E_{n,\ell}^{MP}(n,\ell) &= \frac{1}{(2a)^2}E_n^{MPT} + N - M \\ &= -\frac{\hbar^2(s-2n-1)^2}{8\mu(2a)^2} - \frac{(2a)^2 2\mu N^2}{\hbar^2(s-2n-1)^2} + M. \end{aligned} \tag{3.85}$$

Les résultats (3.85) et (3.57) peuvent être combinés en une seule expression :

$$E_{n,\ell}^{MP}(n,\ell) = -\frac{\hbar^2(s\pm 2n\pm 1)^2}{8\mu(2a)^2} - \frac{(2a)^2 2\mu N^2}{\hbar^2(s\pm 2n\pm 1)^2} + M\,. \tag{3.86}$$

Les signes positifs et négatifs ($\pm$) dans(3.86) correspondent respectivement à des valeurs négatives et positives de q [55].

Nous distinguons des cas particuliers dépendant des choix des paramètres.

3.3.3 1^{er} cas : Potentiel de Rosen-Morse modifié

Posons $B = 0, q = -\exp(\alpha' r_{ij}), b := \alpha' re, A = 2De(\exp(b-\alpha' rij)+1), \quad C = De(\exp(b-\alpha' rij)+1)^2$où D_e est l'énergie de dissociation, r_e dénote la longueur de la liaison à l'équilibre, $r_{ij} = r_e - \sqrt{\frac{HD_e}{K_e}}, H = 4.00$ [56] et K_e représente la constante de la force vibratoire d'équlibre harmonique.

Le potentiel multi-paramètres devient le potentiel de Rosen-Morse modifié :

$$V(r)=\frac{-2Dee^{\alpha' r_{ij}}\left(e^{b-ijr\alpha'}+1\right)e^{-\alpha' r}}{1+e^{(-\alpha' r+\alpha' r_{ij})}}-Dee^{\alpha' r_{ij}}\left(e^{b-ijr\alpha'}+1\right)^2\left(\frac{e^{-\alpha' r}}{1+e^{(-\alpha' r+\alpha' r_{ij})}}\right)^2.$$

Nous avons considéré l'état électronique $6^1\Pi_u$ de la molécule de Lithium $^7Li_2$. Les constantes moléculaires de cette molécule sont extraites de la littérature [57] : $De=8276.7cm^{-1}$, $re=3.1639\mathring{A}$, $\omega_e=253.567cm^{-1}$. En utilisant la même approximation du terme centrifuge [13] .(3.86)devient :

$$E_{n,\ell}^{MRM}(n,\ell)=-\frac{\hbar^2\alpha^2(s-2n-1)^2}{8\mu}-\frac{2\mu\left(N^{MRM}\right)^2}{\hbar^2\alpha^2(s-2n-1)^2}+M^{MRM}. \tag{3.87}$$

3.3.4 $2^{ème}$ cas : Potentiel d'Eckart

Posons $B=\beta'=4De\sigma_0^2; q=1, A=-\alpha'=-4De\sigma_0, C=0.$

L'expression de ce potentiel est :

$$V(r)=\frac{-4De\sigma_0 e^{\frac{-r}{a}}}{1-e^{\frac{-r}{a}}}+\frac{4De\sigma_0^2 e^{\frac{-r}{a}}}{\left(1-e^{\frac{-r}{a}}\right)^2}.$$

En utilisant l'approximation de Ikhdair [14]

$$\frac{1}{r^2}\simeq\frac{1}{r_e^2}\left(\frac{1}{12}+\frac{e^{-\alpha' r}}{1-e^{-\alpha' r}}+\frac{e^{-2\alpha' r}}{(1-e^{-\alpha' r})^2}\right), \tag{3.88}$$

et nous obtenons à la fin le spectre d'énergie :

$$E_{n,\ell}^{E}(n,\ell)=-\frac{\hbar^2\alpha^2(s+2n+1)^2}{8\mu}-\frac{2\mu\left(N^{E}\right)^2}{\hbar^2\alpha^2(s+2n+1)^2}+M^{E}. \tag{3.89}$$

3.3.5 $3^{ème}$ cas : Potentiel de Coulomb écranté

Posons $B=C=0; q=1, A=-D_e\alpha'.$

Dans ce cas, l'expression de ce potentiel est donnée par :

$$V(r)=\frac{-D_e\alpha' e^{\frac{-r}{a}}}{1-e^{\frac{-r}{a}}}.$$

En utilisant l'approximation de Green et Aldrich [15] :

$$\frac{1}{r^2} \approx 4\alpha^2 \frac{e^{-2\alpha r}}{\left(1 - qe^{-2\alpha r}\right)^2}, \tag{3.90}$$

et nous trouvons le spectre d'énergie suivant :

$$E_{n,\ell}^{C\acute{e}}\left(n,\ell\right) = -\frac{\hbar^2\alpha^2\left(s+2n+1\right)^2}{8\mu} - \frac{2\mu\left(N^{C\acute{e}}\right)^2}{\hbar^2\alpha^2\left(s+2n+1\right)^2} + M^{C\acute{e}}. \tag{3.91}$$

3.3.6 Résultats et discussion

Nous avons testé numériquement nos résultats pour le potentiel de multi-paramètres, dans un large domaine de variation des paramètres α du potentiel étudié et du moment angulaire ℓ, et aussi le nombre quantique radial n, et pour les potentiels Rosen-Morse modifié, Eckart et Coulomb écranté.

Nous avons calculé le spectre d'énergie (3.86), en utilisant un programme Maple. Nous avons comparé nos résultats présentés dans les quatres tableaux avec ceux calculés numériquement la méthode de supersymétrie (W-K B) [58],et les travaux de Stanek [59] et Dong [60].

Nos résultats montrent que les valeurs propres obtenues sont en très bon accord avec ceux calculés par d'autres méthodes.

ℓ	n	Nos résultats	Non relativistes [61]	relativistes [61]	résultats [58]
0	0	126.2838683	126.2856487928	126.2856487926	126.392
0	1	376.5504073	376.5562094709	376.556094696	367.338
0	2	623.4882731	623.4987076051	623.4987076014	622.716
0	3	867.0749103	867.0904557382	867.090455312	865.589
0	4	1107.287109	1107.308437277	1107.308437265	1105.017
0	5	1344.101659	1344.12930746	1344.129300729	1341.062
0	6	1577.494697	1577.529353921	1577.529353898	1573.785
0	7	1807.442358	1807.484557849	1807.484557820	1803.247
0	8	2033.920123	2033.970520739	2033.970520702	2029.509
0	9	2256.903322	2256.962491726	2256.962491681	2252.633
0	10	2476.366631	2476.435354516	2476.435354463	2472.680
0	11	2692.284776	2692.36320887	2692.363620823	2689.7100

TAB. 3.1 – Les énergies relatives $E_{n,l}(cm^{-1})$ au potentiel de Rosen-Morse modifié .

états	$\frac{\alpha}{2}$	Nos résultats	Stanek [59]	Lucha et al [62]
2p	0.025	0.1008358005	0.1008306	0.1008358
	0.05	0.09783507977	0.0978345	0.0978358
	0.075	0.08841433990	0.0884174	0.0884183
	0.100	0.07837262187	0.0783776	0.0783854
	0.15	0.05903913960	0.0590651	0.0591059
3P	0.025	0.04012471008	0.0401232	0.0401250
	0.05	0.03224326535	0.0322435	0.0322482
	0.075	0.02353016308	0.0235330	0.0235553
	0.100	0.01577661660	0.0157843	0.0158588
	0.15	0.00393356176	0.0039725	0.0044091
3d	0.025	0.04136353143	0.0413638	0.0413642
	0.05	0.03218700878	0.0321936	0.0321973
	0.075	0.02274535340	0.0227792	0.0227991
	0.100	0.01418781705	0.0142976	0.0143675
4p	0.025	0.01846215268	0.0184616	0.0184632
	0.05	0.01069900045	0.0106995	0.0107159
	0.075	0.00441410744	0.0044170	0.0045059
	0.100	0.00037956364	0.0003883	0.0007212
4d	0.025	0.01891896628	0.0189196	0.0189216
	0.05	0.01041722982	0.0104280	0.0104603
	0.075	.00352306998	0.0035778	0.0037658
4f	0.025	0.01901827456	0.0190212	0.0189216
	0.05	0.00985104472	0.0098979	0.0104603
	0.075	0.00213691197	0.0023963	0.0037658
5p	0.025	0.00868229860	0.0086820	0.0086850
5d	0.025	0.00885038141	0.0088512	0.0088576
5f	0.025	0.00881780532	0.0088225	0.0088297
5g	0.025	0.00867971120	0.0086919	0.0086943

TAB. 3.2 – Les énergies $-E_{n,l}(ev)$ relatives au potentiel de Ecart avec $B1$=0.0001.

états	$\frac{\alpha}{2}$	Nos résultats	Stanek [59]	Lucha et al [62]
2p	0.025	0.1064736993	0.1064616	0.1064737
	0.05	0.09941536577	0.0994116	0.0994162
	0.075	0.08912439160	0.0891252	0.0891284
	0.100	0.07876816097	0.0787809	0.0787809
	0.15	0.05920677610	0.0592326	0.0592734
3P	0.025	0.04183971611	0.0418361	0.0418400
	0.05	0.03269625958	0.0326956	0.0327011
	0.075	0.02372150512	0.0237237	0.0237464
	0.100	0.01587409343	0.0158817	0.0159559
	0.15	0.00396324736	0.0040020	0.0044376
3d	0.025	0.04245818210	0.0424587	0.0424588
	0.05	0.03246340505	0.0324700	0.0324736
	0.075	0.02286106852	0.0228947	0.0229146
	0.100	0.01424658404	0.0143561	0.0144257
4p	0.025	0.01917769168	0.0191762	0.0191787
	0.05	0.01086852065	0.0108687	0.0108852
	0.075	0.00447233648	0.0044750	0.0045636
	0.100	0.00039801621	0.0004067	0.0007380
4d	0.025	0.01937272452	0.0193735	0.0193753
	0.05	0.01052056020	0.0105312	0.0105312
	0.075	0.00355830246	0.0036127	0.0038001
4f	0.025	0.01934881414	0.0193516	0.0193525
	0.05	0.00992526196	0.0099719	0.0099876
	0.075	0.00216215466	0.0024207	0.0025321
5p	0.025	0.00902937095	0.0090287	0.0090320
5d	0.025	0.00906981999	0.0090707	0.0090768
5f	0.025	0.00897743906	0.0089820	0.0089892
5g	0.025	0.00880498741	0.0088169	0.0088194

TAB. 3.3 – Les énergies $-E_{n,l}(ev)$ relatives au potentiel de Ecart avec $B2$=0.00005 .

état	α	Nos résultats($D_e = 2$)	Dong [60]	Exact
2p	0.025	0.4512500000	0.451042	0.451275
	0.05	0.4050000000	0.404167	0.405722
	0.075	0.3612500000	0.359375	0.3612920
3p	0.025	0.1750347222	0.174826	0.175808
	0.05	0.1334722222	0.132639	0.136211
	0.075	0.0975347222	0.095659	0.102520
3d	0.025	0.1750347222	0.174410	0.175349
	0.05	0.1334722222	0.130972	0.134285
	0.075	0.0975347222	0.091909	0.098500
4p	0.025	0.0800000000	0.079591	0.081478
	0.05	0.0450000000	0.044166	0.049131
4d	0.025	0.0800000000	0.079375	0.081009
	0.05	0.0450000000	0.042500	0.047475
4f	0.025	0.0800000000	0.078750	0.080237
	0.05	0.0450000000	0.040000	0.044872
5P	0.025	0.0378125000	0.037604	0.039858
5d	0.025	0.0378125000	0.037187	0.039421
5f	0.025	0.0378125000	0.036562	0.038727
5g	0.025	0.0378125000	0.035729	0.037785
6p	0.025	0.0168055555	0.016597	0.019161
6d	0.025	0.0168055555	0.016180	0.018776
6f	0.025	0.0168055555	0.015555	0.018174
6g	0.025	0.0168055555	0.014722	0.017354

TAB. 3.4 – Les énergies $-E_{n,l}(ev)$ relatives au potentiel de Coulomb écranté.

Conclusion

Nous avons déterminé, dans ce mémoire, dans le cadre du formalisme de Feynman, le spectre des énergies relatif aux états liés ainsi que les fonctions d'onde correspondantes relatives au potentiel multi-paramètres q déformé.

Après un bref aperçu sur le formalisme des intégrales de Feynman dans le premier chapitre, nous avons présenté dans le deuxième chapitre la technique des transformations spatio-temporelles utilisée dans notre travail. Le troisième chapitre qui constitue notre propre travail a été consacré à la présentation d'une expression améliorée de l'énergie des états «ℓ » relatifs au potentiel de multi-paramètres $q-$déformé. En utilisant 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 en utilisant une transformation spatio-temporelle appropriée pour deux cas ($q > 0$ et $q < 0$). L'utilisation de cette dernière nous a permis de passer du propagateur relatif au potentiel plus générale à celui de Pöschl-Teller modifié dont l'expression est connue, nous avons, en outre, discutés des cas particuliers (Rosen-Morse modifié, Eckart, Coulomb écranté, ces derniers ont été obtenus à partir du cas général en ajustant les paramètres du potentiel, ceci nous a permis de trouver l'expression de l'énergie et des fonctions d'onde.

Dans le but de montrer l'efficacité de cette approximation, nous avons calculé les énergies propres des potentiels, pour différentes valeurs des nombres quantiques n et ℓ et α . Nos résultats sont comparables aux énergies calculées numériquement et la méthode de supersymétrie (W-K B), et les travaux de Stanek et Dong. Nous pouvons conclure que le choix de l'approximation utilisée pour remplacer le terme centrifuge pour chaque potentiel est une procédure alternative simple et bonne qui donne des valeurs propres d'énergie avec une précision raisonnable.

Au vu, de l'importance des résultats obtenus, nous pouvons affirmer que le formalisme de Feynman constitue une sérieuse alternative aux autres formalismes de la mécanique quantique.

Bibliographie

[1] M. Pagels, L'univers quantique (Inter Editions, Paris, 1985).

[2] C.D Morette,L'intégrale fonctionnelle de Feynman. Une introduction, Annales de L'I. H. P., tome 11, n° 2(1969),p.153-206.

[3] W. Heisenberg, quantentheoretishe umdeutung kinematisher und mechanischer beziehungen, Z. Physik, 33(1), 879-893, 1925.

[4] E, Schrödingerer ; Quantisierung als Eigenwertproblem. Ann. Physik, 79, 361-377, 1926.

[5] D. C. Khandekar et S.V. Lawande, ″ Feynman path integrals : Some exact results and applications″, *Phys. Rep.* **137** (1986) 115.

[6] J. Schwigner, Quantum Electrodynamics (*Dover, New York, 1958*).

[7] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.

[8] R. P. Feynman et A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (*McGraw-Hill, NewYork, 1965*).

[9] H. Kleinert , Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics (*World Scientific, Singapore, 1995*).

[10] D. C. Khandekar, S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Path Integral Methods and Their Applications (*World Sientific, Singapore, 1986*).

[11] B. K. Berger and C. N. Vogeli, *Phys. Rev.***32 D** (1989) 2477.

[12] A. O. Barut and I. H. Duru, *Phys : Rep.* **172** (1989)**1**.

[13] H.M. Tang, G.C. Liang, L.H. Zhang, F. Zhao, C.S. Jia, *Can. J. Chem.* **92** (2014) 341.

[14] S. M. Ikhdair and R. Sever, Ann. Phys. (Berlin) 18, No. 4 (2009) 189 197.

[15] R.L. Greene, C. Aldrich, Phys. Rev. A 14 (1976)2363.

[16] N. Rosen et P. M. Morse, Phys. Rev. 42 (1932) 210.

[17] C. Eckart, Phys. Rev. 35 (1930) 1303.

[18] D. C. Khandekar, S. V. Lawande et K. V. Bhagwat. Path Integral Methods and their Applications,(World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 1993).

[19] P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics (*Oxford University Press, Oxford, 1958*).

[20] H. Ryder, Quantum Field Theory (*Cambridge University Press, 1988*).

[21] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.

[22] L. S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integration (*John Wiley, New York, 1981*).

[23] I. H. Duru et H. Kleinert, *Phys. Lett.* **B 84** (1979) 185.

[24] P. Kustaanheimo et E. Stifel, *J. Reine Angew, Math.* **218** (1965) 204.

[25] C. Groshe, F. Steiner, Handbook of Feynman Path integrals (Springer, 1998).

[26] J. Cai, P. Cai and A. Inomata, P hys : Rev : A 34 N 6(1986) 4621.

[27] L. Chetouani, A. Chouchaoui, T. F. Hamann, J : M ath : P hys : 31 (1990) 983.

[28] C. Groshe, *J. Phys. A : Math.Gen.* **28** (1995) 5889.

[29] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets (World scientific, Singapore, 2009).

[30] K. J. Oyewumi, F. O. Akinpelu and A. D. Agboola, Int. J. Theor. Phys. 47 (2008)1039.

[31] B. Gonul, O Ozer and M. Kocak, Comm. Thoer. Phys. 45 (2006) 807.

[32] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics -Non- Relativistic Theory,3rd ed. Pergamon, (Oxford, New York 1977).

[33] R. L. Greene and C. Aldrich, Phys. Rev. A 14 (1976) 2363.

[34] P. M. Morse, Phys. Rev. 34 (1929) 57.

[35] Y. P. Varshni, Rev. Mod. Phys. 29 (1957) 664.

[36] O. Yesiltas, Phys. Scr. 75 (2006) 41.

[37] L. Infeld, A. Schild, Phys. Rev. 67 (1945) 121.

[38] T. Boudjedaa, L. Chetouani, L. Guechi, T.F. Hammann, J. Math. Phys. 32 (1991)441.

[39] L. Chetouani, L. Guechi, A. Lecheheb, T.F. Hammann, A. Messouber, Il Nuovo Cimento B 113 (1998) 81.

[40] A. Diaf, A. Chouchaoui, R.J. Lombard, Ann. Phys. (NY) 317 (2005) 354.

[41] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov, Special Functions of Mathematical Physics (Birkhauser, Basel, 1988).

[42] S. H. Dong, Factorization Method in Quantum Mechanics (Springer, Dordrecht,2007).

[43] O. Ozer, Chin. Phys. Lett. 25 (2008) 3111.

[44] H. Bakhti, A. Diaf, M. Hachama, Analytical solution of the feynman kernel for general exponential-type potentials, Physica Scripta 94 (5) (2019) 055204.

[45] J. J.Peña, J. Morales, J. Garc a-Ravelo, Bound state solutions of dirac equation with radial exponential-type potentials, Journal of Mathematical Physics 58 (4) (2017)043501.

[46] J. Garc a-Mart nez, J. Garc a-Ravelo, J. Morales, J. J. Peña, Exactly solvable Schrödinger equation for a class of multi-parameter exponential-type potentials, International Journal of Quantum Chemistry 112 (1) (2012) 195-200.

[47] A. Arai, *J. Math. Anal. Appl.* 158 (1991)63 ; *J. Phys. A : Math. Gen.* 34 (2001) 4281.

[48] C. Grosche, *J. Phys. A* : *Math. Gen.* **38** (2005) 2947.

[49] A. Diaf et A. Chouchaoui, Phys. Scr. 84 (2011) 015004.

[50] A. Diaf, Chin. Phys. B 24 (2015) 020302.

[51] A. Kurniawan, A. Suparmi et A. Cari. Chin. Phys. B 24 (2015) 030302.

[52] C.Groshe J.Phys. A. : Math. Gen. 22(1989)5073, A. Frank and K. Wolf J. Math. Phys.26(1985)5.

[53] C. Groshe, *J. Phys. A* : *Math. Gen.* **22** (1989) 5073.

[54] C. Groshe, F. Steiner, Handbook of Feynman Path Integrals. (Springer, Berlin, 1998).

[55] A.Amrouche, A. Diaf, and M.Hachama, Can. J. Phys 95 (2017) 25-30.

[56] A.A. Frost, B. Musulin, *J. Am. Chem. Soc.* **76** (1954) 2045.

[57] J. E. Lombard, Résumé de Thermodynamique, (17 juillet 2007), I, Academia_files‹Public‹lombardf.com.

[58] C.S. Jia, X.L. Peng, S. He, Bull. Korean *Chem. Soc.* **35** (2014) 2699.

[59] Stanek J Cent. Eur. J. Phys. 9 (2011)1503.

[60] Dong S H, Qiang W C, Sun G H and Bezerra V B J. Phys. A :Math. Theor. 40(2007)10535.

[61] C. S. Jia, J. W. Dai, L. H. Zhang, J. Y. Liu and G. D. Zhang, *Chem. Phys. Lett.* **619** (2015) 54-60.

[62] Lucha W and Schoberl F F ¨ Int. J. Mod. Phys. C 10(1999) 607.