République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التـعـلـيـم العـالـــي والبـحــث العـلـمــي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mohamed El Bachir Elibrahimi –Bordj Bou Arreridj Faculté des Sciences et de la Technologie

Département Sciences de la Matière

جـامعة محمد البشير الإبراهيمي « برج بوعريريج »

كلية العلوم والتكنولوجيا

قسم علوم المادة

Mémoire de fin d'étude

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION

DU DIPLOME DE : **Master II**

Filière : physique

Option : Matériaux et modélisation numérique

THÈME :

L'intégrale fonctionnelle de Feynman

Dans un espace courbé

Présentée par :

Belkhiri Kafia

Soutenu le **: / /2018**

Devant le jury :

Rapporteur : Mameri Samir MCB Univ. Bordj Bou Arreridj

Président : Lebga Noudjoud MCB Univ. Bordj Bou Arreridj

Examinateur : Benchiheub Nadjet MCB Univ. Bordj Bou Arreridj

Remerciements

Tout d'abord nous remercions le Dieu a tout puissant de la bonne santé, de la volonté et de la patience qu'il nous a accordées tout au long de nos études.

Nous tenons en premier lieu à remercier cordialement, notre cher encadreur Mr Samir Mameri pour sa précieuse collaboration et sa pertinent conseil, qu 'il n'ais cessé de nous donner tout au long de l'élaboration de ce modeste travail.

Les mêmes expressions de reconnaissance vont également au

Chef de département Mm FEREKOS pour les facilités qu'il a mis à

notre disposition, dont la gentillesse et gaïté étaient un véritable

support pour l'accomplissement de ce projet.

DEDICACE

J'offre ce modeste travail à ma famille

-à Mon pére Larbi.

-à Ma mére Dhaw

- A mon amie Selsabil

-aux Mes fréres et mes sœurs.

-aux mes amis de la classe et hors classe

Ainsi que tous ce que m'ont aidées pour réaliser ce

Mémoire sans oublier mon encadreur Mameri Samir.

kafia

Table des matières

Chapitre 1

Introduction

Classiquement, il existe deux types de systémes dynamiques. Il y a d'abord le mouvement d'une particule ou d'un corps rigide avec un nombre fini de degrés de liberté , qui peut être d´ecrit par un nombre fini de coordonnées. Et puis, il y a des systémes physiques pour lesquels l'ensemble des degrés de liberté est non d´enombrable.

Ces systémes sont dérits par des champs. Des exemples courants de champs classiques sont les champs électromagnétiques d´ecrits par $E(x,t)$ et $B(x,t)$ ou de façon equivalente par les potentiels $(\phi(x,t), A(x,t))$. De même, le mouvement d'une corde unidimensionnelle est également décrit par un champ $\phi(x,t)$. Ainsi, alors que les coordonnées d'une particule ne dépendent que du temps, les champs varient continuellement en fonction de certaines variables de l'espace.

Par conséquent, une théorie décrite par des champs est généralement vue comme une théorie des champs à $(D+1)$ dimensions, où D représente le nombre de dimensions spatiales. Par exemple, une théorie décrivant les déplacements de la corde unidimensionnelle constituerait une théorie des champs de dimensions $(1+1)$ alors que la théorie des équations de Maxwell, plus familiére, peut être considérée comme une théorie de champs à $(3+1)$ dimensions.

Dans cette perspective, il est alors clair que la théorie décrivant le mouvement d'une particule peut êtr particuliérement considérée comme une théorie de champs à $(0+1)$ dimensions.

L'intégrale de chemin est une généralisation à un nombre infini de variables, représentée par des chemins d'intégrales ordinaires. Elle vérifie les mêmes propriétés algébriques de celle-ci, mais présente en plus des propriétés nouvelles.

La puissance de la méthodes de l'intégrale de chemin réside dans le fait qu'elle met trés explicitement en correspondance les mécaniques classique et quantique. Les quantités physiques s'obtiennent en moyennant sur tous les chemins possibles.

La caractéristique intéressante de l'intégrale de chemin est que dans la limite semi-classique $\hbar \longrightarrow 0$ les chemins dominant l'intégrale se trouvent dans un voisinage du chemin "classique", ce qui permet de bien comprendre le principe de correspondance.

La formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin est plus compliquée du point de vue mathématique. Cependant, elle est bien adaptée à l'étude de systémes 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.

Chapitre 2

Formalisme des intègrales de chemin en coordonnèes polaires

2.1 Introduction

Le but principal de ce chapitre est de se familiariser avec l'approche des intégrales de chemin qui offre un point de vue alternatif aux méthodes standard de Schrodinger et d'Heisenberg. C'est une approche qui est devenue essentielle à une compréhension profonde de la théorie quantique des champs et de ses applications qui vont de la physique des interactions fondamentales à la mécanique statistique des transitions de phase ou aux propriétés des gaz quantiques. L'intégrale de chemin est un outil trés puissant pour létude des problémes de la mécanique quantique. Elle établit un lien trés explicite entre la mécanique classique et la mécanique quantique. la formulation de la mécanique quantique basée sur l'intégrale de chemin peut

paraitre plus compliquée du point de vue mathématique, mais elle est bien adaptée à l'étude des systémes à un grand nombre de degrés de liberté.

2.2 Propagateur

2.2.1 Définition

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

.

Le mouvement de la particule est régi par le Lagrangien

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x,t). \tag{2.1}$$

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

$$S = \int_{t'}^{t"} L(x,\dot{x},t)dt \tag{2.2}$$

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

$$\delta S = S(x+\delta x) - S(x) = 0 \tag{2.3}$$

au premier ordre en δx .Or

$$\begin{aligned} S(x+\delta x) &= \int_{t'}^{t"} L(x+\delta x, \dot{x}+\delta\dot{x}, t)dt \\ &= \int_{t'}^{t"} (L(x,\dot{x},t) + \delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x\frac{\partial L}{\partial x})dt \\ &= S(x) + \int_{t'}^{t"} (\delta\dot{x}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x\frac{\partial L}{\partial x})dt. \end{aligned} \tag{2.4}$$

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

$$\delta S = \delta x\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\Big|_{t'}^{t"} - \int_{t'}^{t"} \delta x(\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}) - \frac{\partial L}{\partial x})dt. \tag{2.5}$$

Puisque $\delta x(t') = \delta x(t") = 0$, le terme $\delta x\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\Big|_{t'}^{t"}$ de léquation (2.4) est nul. Comme δx peut prendre toute valeur arbitraire entre les points initial et final, la condition suivante est toujours satisfaite,

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \tag{2.6}$$

Cette équation est applée équation d'Euler-Lagrange du mouvement de la particule. Au lieu de considérer seulement la trajectoire classique, nous allons maintenant considérer tous les chemins possibles que peut prendre la particule pour aller du point A au B. On associe à chacun de ces chemins une amplitude de probabilité partielle $\phi_\Gamma[x(t)]$ donnée par

$$\phi_\Gamma[x(t)] = N \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_\Gamma[x(t)]\right], \tag{2.7}$$

où N est une constante de normalisation et S_T est l'action associée au chemin Γ. Par définition, la probabilité

de transition du point x_a à t_a au point x_b à t_b est

$$P(b,a) = |K(b,a)|^2 \tag{2.8}$$

où $K(b,a)$ est l'amplitude ou propagateur d'aller de A à B. Cette amplitude est la somme des contributions $\phi_\Gamma[x(t)]$ de chaque chemin

$$K(b,a) = \sum_\Gamma \phi_\Gamma[x(t)] \tag{2.9}$$

Comme les chemins sont trés proches les uns des autres, la somme peut étre

remplacée par une intégrale. Ainsi, nous obtenons l'expression du propagateur

$$\begin{aligned} K(b,a) &= \int_\Gamma D_\Gamma \phi_\Gamma[x(t)] \\ &= \int_{x(t')}^{x(t")} Dx(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_\Gamma[x(t)]\right], \end{aligned} \tag{2.10}$$

où D_Γ et $Dx(t)$ sont les mesures.

2.2.2 Forme discrète du propagateur

Le propagateur qui gouverne l'évolution d'une particule de masse m du point $x\prime$ à l'instant $t\prime$ au point $x"$ au temps $t"$ a été défini par feynman [1] de la façon suivante :

$$K(x", t"; x', t') = \int Dx(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T L(x,\dot{x};\dot{t})dt\right], \tag{2.11}$$

où $T = t" - t\prime$. En subdivisant l'intervalle de temps T en $(N+1)$ intervalles élémentaires égaux tel que $\varepsilon = t_n - t_{n-1} = T/(N+1)$, et en utilisant les notations habituelles $\triangle x_n = x_n - x_{n-1}$, $\bar{x} = \frac{x_n + x_{n-1}}{2}$, $x" = x(t_{N+1})$, $x\prime = x(t_0)$, $t_0 = t\prime$ et $t_{N+1} = t"$, l'expression du propagateur (2.11) prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} K(x",t";x',t') &= \lim_{N\longrightarrow\infty} \prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \prod_{n=1}^{N} \left[\int dx_n\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}A_N\right], \end{aligned} \tag{2.12}$$

avec l'action totale

$$A_N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2\varepsilon}(\triangle x_n)^2 - \varepsilon V(x_n)\right] = \int_0^T \left[\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)\right] dt. \tag{2.13}$$

2.2.3 Intégrale de chemin dans I'espace des phases

Lévolution d'une particule soumise à un potentiel $V(x)$ et repérée par les positions $x\prime$ et $x"$ aux instants fixés $t\prime$ et $t"$ respectivement, peut être décrite en définissant le propagateur comme étant l'amplitude de probabilité de transition définie à l'aide de l'opérateur d'évolution par :

$$K(x",t";x',t') = \langle x' \mid \hat{U}(t",t') \mid x"\rangle \theta(t" - t'). \tag{2.14}$$

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

$$\theta(t" - t') = \begin{cases} 1 \; pour \;\; t"\rangle t', \\ 0 \; pour \;\; t'\rangle t". \end{cases} \tag{2.15}$$

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

$$\hat{U}(t",t') = \hat{U}(t_{N+1},t_N)\hat{U}(t_N,t_{N-1})...\hat{U}(t_n,t_{n-1})...\hat{U}(t_1,t_0), \tag{2.16}$$

avec $t_{N+1} = t"$, $t_0 = t\prime$ et $T = \varepsilon\,(N+1)$. Ensuite, en insérant N relations de fermeture de la forme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \mid x_n\rangle\langle x_n \mid = 1; \qquad n = 1, 2, 3, ...N, \tag{2.17}$$

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

$$\begin{aligned} K\left(x", t"; x', t'\right) &= \langle x", t" \mid x', t'\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \longrightarrow 0} \int \prod_{n=1}^{N+1} \langle x_n, t_n \mid x_{n-1}, t_{n-1}\rangle \prod_{n=1}^{N} dx_n, \end{aligned} \tag{2.18}$$

où

$$\begin{aligned} \langle x_n, t_n \quad \mid \quad & x_{n-1}, t_{n-1}\rangle = \langle x_n \mid \hat{U}(t_n, t_{n-1}) \mid x_{n-1}\rangle \\ = \quad & \langle x_n \mid \exp(i\varepsilon\hat{H}/\hbar) \mid x_{n-1}\rangle, \end{aligned} \tag{2.19}$$

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

$$\hat{H} = \hat{T}(p,t) + \hat{V}(x,t), \tag{2.20}$$

où $\hat{T}(p,t)$ est l'opérateur énergie cinétique et $\hat{V}(x,t)$ l'opérateur énergie potentielle.Pour ε trés petit, on peut appliquer la formule de BaKer-Hausdorff [2]

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{H}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{T}} e^{-\frac{i}{\hbar^2}\varepsilon^2\hat{X}}, \tag{2.21}$$

où l'opérateur X représente le développement

$$\hat{X} = \frac{1}{2}\left[\hat{V}, \hat{T}\right] - \frac{\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{1}{6}\left[\hat{V}, \left[\hat{V}, \hat{T}\right]\right] - \frac{1}{3}\left[\left[\hat{V}, \hat{T}\right], \hat{T}\right]\right) + ... \tag{2.22}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \mid x_n\rangle\langle x_n \mid = 1; \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \mid p_n\rangle\langle p_n \mid = 1, \tag{2.23}$$

dans l'expression (2.19) , nous obtenons

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

En tenant compte de l'élément de matrice local

$$\langle x_n \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{V}(x,t_n)} \mid x\rangle = \delta(x_n - x)e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(x_n,t_n)}, \tag{2.25}$$

on a

$$\begin{aligned} \langle x_n \quad \mid \quad \hat{U}\,(t_n, t_{n-1}) \mid x_{n-1}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\{\frac{i}{\hbar}[[p_n(x_n - x_{n-1}) \\ - \varepsilon\left[T\,(p_n, t_n) + V\,(x_n, t_n)\right]]\}. \end{aligned} \tag{2.26}$$

Par substitution de (2.26) dans (2.18) et en définissant la fonction de Green $G(x", x\prime; E)$ comme étant la transformée de Fourier du propagateur $K(x", t"; x\prime, t\prime)$, nous obtenons

$$\begin{aligned} G(x", x'; E) &= \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar}ET\right) K\,(x", t"; x', t') \\ &= \int_0^\infty dT \lim_{N\longrightarrow\infty} \prod_{n=1}^{N} \left[\int dx_n\right] \prod_{n=1}^{N+1} \left[\int \frac{dp_n}{2\pi\hbar}\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N+1} A_n\right], \end{aligned} \tag{2.27}$$

avec l'action élémentaire

$$A_n = p_n(x_n - x_{n-1}) - \varepsilon \left(T\left(p_n, t_n\right) + V\left(x_n, t_n\right) - E\right), \tag{2.28}$$

et $T = t" - t\prime$.

2.3 Intégrale de chemin en coordonnées polaires

De nombreux systémes physiques sont invariants par rotation. Le traitement de ces systémes permet généralement une transformation aux coordonnées polaires. Ainsi, par exemple, dans le cas de l'équation de Schrödinger pour des potentiels à symétrie sphérique, on réduit le probléme à un probléme unidimensionnel représenté par l'équation radiale de Schrödinger.

Il est naturel de se demander si une telle transformation en coordonnées polaires est possible aussi avec une intégrale de chemin. La réponse à cette question n'est pas triviale, car il n'existe apparemment pas de prescription générale pour écrire une intégrale de chemin en coordonnées curvilignes.

En fait,à l'origine, lors de la formulation complète des intégrales de chemin en mécanique quantique, on doit nécessairement démarré à partir des coordonnées cartésiennes. La nature stochastique des chemins s'oppose généralement à une

utilisation directe de l'action classique exprimée en coordonnées curvilignes. En outre, même si une intégrale de chemin est exprimée en coordonnées cartésiennes, elle n'est pas invariante par une modification formelle de variables. Toutefois, avec un petit peu de recul et de soin, on peut obtenir la correction Lagrangienne qui assure que l'intégrale transformée décrit le même probléme quantique comme celui de départ. Notre motivation dans cette section est essentiellement de mettre en lumiére ces question subtiles. Nous allons aborder maintenant l'intégrale de chemin à trois dimensions en coordonnées polaires. Pour cela, considérons entre les deux instants $t\prime$ et $t"$ tels que $t\prime \langle t"$ et $t" - t\prime = T$, le propagateur de Feynman d'une particule de masse m se déplaçant dans un espace Euclidien à trois dimensions dans un potentiel $V(r)$. Ce dernier est donné par

$$K(\overrightarrow{r}", \overrightarrow{r}'; T) = \int_{\overrightarrow{r}(t')=\overrightarrow{r}'}^{\overrightarrow{r}(t")=\overrightarrow{r}"} D\overrightarrow{r}(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t"}\left(\frac{m}{2}\left(\overrightarrow{r}\right)^2 - V(r)\right)dt\right] \tag{2.29}$$
$$= \lim_{N\longrightarrow\infty} \prod_{j=1}^{N+1}\left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^{N}\left[\int_{\mathbb{R}^3} d\overrightarrow{r}_j\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_N\right],$$

avec l'action totale

$$S_N = \sum_{j=1}^{N+1} S_j = \sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{m}{2\varepsilon}\left(\triangle\overrightarrow{r}_j\right)^2 - \varepsilon V(r_j)\right], \tag{2.30}$$

où S_j est l'action élémentaire donnée par la formule

$$S_j = \left[\frac{m}{2\varepsilon}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2\overrightarrow{r}_j.\overrightarrow{r}_{j-1}\right) - \varepsilon V(r_j)\right]. \tag{2.31}$$

En utilisant le systéme des coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) défini ainsi :

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi, \\ y = r\sin\theta\sin\phi, \\ z = r\cos\theta \end{cases} \tag{2.32}$$

avec $r\rangle 0$,$0 \leq \theta\langle\pi$ et $0 \leq \phi\langle 2\pi$, la métrique s'écrit

$$ds^2 = g_{rr}(dr)^2 + g_{\theta\theta}(d\theta)^2 + g_{\phi\phi}(d\phi)^2, \tag{2.33}$$

où

$$g_{rr} = 1 \quad , g_{\theta\theta} = r^2 \quad , g_{\phi\phi} = r^2\sin^2\theta. \tag{2.34}$$

Le tenseur métrique se met alors sous la forme :

$$(g_{ab}) = diag\left(g_{rr}, g_{\theta\theta}, g_{\phi\phi}\right), \tag{2.35}$$

avec

$$\sqrt{g} = \sqrt{\det(g_{ab})} = r^2\sin\theta \tag{2.36}$$

et son inverse $\left(g^{ab}\right)$

$$\left(g_{ab}\right)^{-1} = \left(g^{ab}\right) = diag\left(g_{rr}^{-1}, g_{\theta\theta}^{-1}, g_{\phi\phi}^{-1}\right). \tag{2.37}$$

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

$$d\overrightarrow{r} = r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr. \tag{2.38}$$

L'intégrale de chemin (2.29) peut être réécrite en coordonnées sphériques ainsi :

$$\begin{aligned} K\left(\overrightarrow{r}", \overrightarrow{r}'; T\right) &= \lim_{N\longrightarrow\infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left(\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^{N} \left[\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r_j^2 \sin\theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j\right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \exp\left[\frac{i}{\hbar} A\left(j, j-1\right)\right], \end{aligned} \tag{2.39}$$

avec l'action élémentaire

$$A(j, j-1) = \left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1}\cos\theta_{j,\, j-1}\right) - \varepsilon V\left(r_j\right)\right] \tag{2.40}$$

et

$$\cos\theta_{j,j-1} = \cos\theta_j \cos\theta_{j-1} + \sin\theta_j \sin\theta_{j-1} \cos\left(\phi_j - \phi_{j-1}\right). \tag{2.41}$$

La mesure

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{3}{2}} \prod_{n=1}^{N} \left[\int d\overrightarrow{r}_n\right] \tag{2.42}$$

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

$$\prod_{n=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{3}{2}} \prod_{n=1}^{N} \left[\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r_n^2 \sin\theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n\right], \tag{2.43}$$

Toutefois, l'expression (2.39) n'est pas appropriée pour l'intégration,en raison de la présence des termes $-\left(i/\hbar\right)\left(M/\varepsilon\right) r_j r_{j-1} \cos\theta_{j,\, j-1}$ 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 (2.39) , nous allons utiliser la formule suivante (voir Gradshtein et Ryzhik [3], $p.980, Eq.(8.534)$) :

$$e^{z\cos\theta} = \left(\frac{2}{z}\right)^{v} \Gamma(v) \sum_{l=0}^{\infty} (l+v)\ I_{l+v}\ (z)\, C_l^v(\cos\theta)\ , \tag{2.44}$$

valable pour tout ($v \neq 0, -1, -2, -3, ...$), ou'$I_\mu(z)$ sont les fonctions de Bessel

modifiées et $C_l^v(\cos\theta)$ représentent les polynômes de Gegenbauer généralisant les polynômes de Legendre. Pour simplifier les calculs, on prend $v = \frac{1}{2}$. On aura alors :

$$\begin{aligned} e^{z\cos\theta} &= \left(\frac{2}{z}\right)^{v} \Gamma(\frac{1}{2})\sum_{l=0}^{\infty}\left(l+\frac{1}{2}\right)\ I_{l+\frac{1}{2}}(z)\, C_l^{\frac{1}{2}}(\cos\theta) \\ &= \left(\frac{2\pi}{z}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty}\left(l+\frac{1}{2}\right) I_{l+\frac{1}{2}}(z)\, C_l^{\frac{1}{2}}(\cos\theta) \\ &= \left(\frac{\pi}{2z}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, I_{l+\frac{1}{2}}(z) P_l(\cos\theta)\, , \end{aligned} \tag{2.45}$$

ou' $P_l(\cos\theta)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $cos\theta$. Le propagateur (2.39) devient alors

$$\begin{aligned} K\left(\overrightarrow{r}", t"; \overrightarrow{r}', t'\right) &= \lim_{N\longrightarrow\infty}\left(\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \prod_{j=1}^{N}\left[\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r_j^2 \sin\theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j\right] \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2\right) - \varepsilon V(r_j)\right]\right\}[\prod_{j=1}^{N+1}\sqrt{\frac{\pi i\hbar\varepsilon}{2Mr_j r_{j-1}}} \\ &\times \sum_{l_j=O}^{\infty}(2l_j+1)\, I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right) C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos\theta_{j,\,j-1})] \end{aligned} \tag{2.46}$$

ou encore

$$K\left(\overrightarrow{r}", t"; \overrightarrow{r}', t'\right) = \lim_{N\longrightarrow\infty}\left(\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}(N+1)} \sum_{l_1,l_2,l_3,\ldots,l_{N+1}=0}^{\infty}\left[\prod_{j=1}^{N}\int_0^{\infty} r_j^2 dr_j\right] \tag{2.47}$$
$$\times\prod_{j=1}^{N+1}\left(\sqrt{\frac{\pi i\hbar\varepsilon}{2Mr_jr_{j-1}}}\right)\prod_{j=1}^{N}[\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}(2l_j+1)\, I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{Mr_jr_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right)$$
$$C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos\theta_{j,\,j-1})\sin\theta_j d\theta_j d\phi_j][(2l_{N+1}+1)\, I_{l_{N+1}+\frac{1}{2}}\left(\frac{Mr_jr_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right)$$
$$C_{l_{N+1}}^{\frac{1}{2}}(\cos\theta_{N+1,\,N})\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)-\varepsilon V(r_j)\right]\right\}$$

qui peut se mettre aussi sous la forme

$$K\left(\overrightarrow{r}", t"; \overrightarrow{r'}, t'\right) = \lim_{N\longrightarrow\infty}\left(\frac{M}{4\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{N+1} \sum_{l_1,l_2,l_3,\ldots,l_{N+1}=0}^{\infty}\left(\frac{1}{r"r'}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\prod_{j=1}^{N}\int_0^{\infty} r_j dr_j\right] \tag{2.48}$$
$$\times\quad\prod_{j=1}^{N}[\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}(2l_j+1)\, I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{Mr_jr_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right)C_{l_j}^{\frac{1}{2}}(\cos\theta_{j,\,j-1})\sin\theta_j d\theta_j d\phi_j]$$
$$\times[(2l_{N+1}+1)\, I_{l_{N+1}+\frac{1}{2}}\left(\frac{Mr_jr_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right)C_{l_{N+1}}^{\frac{1}{2}}(\cos\theta_{N+1,\,N})]$$
$$\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)-\varepsilon V(r_j)\right]\right\},$$

et à l'aide du théoréme d'addition pour les harmoniques sphériques [4]

$$P_l(\cos\triangle\theta_n) = \frac{4\pi}{(2l+1)}\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}(\theta_n,\phi_n)\, Y_{l,m}^{\star}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right), \tag{2.49}$$

où on somme sur tous les nombres quantiques azimutaux (magnétiques) m, le développement (2.45) devient :

$$e^{z\cos\theta} = \left[2\pi\left(\sqrt{\frac{2\pi}{z}}\right)\sum_{l=0}^{\infty} I_{l+\frac{1}{2}}(z)\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}(\theta_n,\phi_n)\, Y_{l,m}^{\star}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right)\right], \tag{2.50}$$

et en insérant cette derniére dans (2.46) , on obtient

$$\begin{aligned} K(\overrightarrow{r}", t"; \overrightarrow{r}', t') &= \lim_{N\longrightarrow\infty} \left(\frac{M}{i\hbar\varepsilon}\right)^{N+1} \sum_{l_1,l_2,l_3,\ldots,l_{N+1}=0}^{\infty} \left(\frac{1}{r"r'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\prod_{j=1}^{N} \int_0^\infty r_j dr_j\right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N} [I_{l_j+\frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right) \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} \int_0^\pi \int_O^{2\pi} Y_{l_j,m_j}(\theta_j, \phi_j) \\ &Y^\star_{l_j,m_j}(\theta_{j-1}, \phi_{j-1}) \sin\theta_j d\theta_j d\phi_j][I_{l_{N+1}+\frac{1}{2}} \left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right) \\ &\times \left(\sum_{m=-l_{N+1}}^{l_{N+1}} Y_{l_{N+1},m}(\theta_{N+1}, \phi_{N+1}\right)] \\ &\times Y^\star_{l_{N+1},m}(\theta_N, \phi_N) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2\right) - \varepsilon V(r_j)\right]\right\} \end{aligned} \quad (2.51)$$

L'orthogonalité des harmoniques sphériques décrite par la relation

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^\star_{l,m}(\theta, \phi)\, Y_{l',m'}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi = \delta_u, \delta_{mm'}, \quad (2.52)$$

nous permet enfin de ramener le propagateur à la forme

$$K\left(\overrightarrow{r}", t"; \overrightarrow{r}', t'\right) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{4\pi} K_l(r", t"; r', t')\, P_l(\cos\theta_{i,\ f}), \quad (2.53)$$

où

$$\begin{aligned} K_l(r", t'; r', t') &= \left(\frac{M}{i\hbar\varepsilon}\right)^{N+1} \left(\frac{1}{r"r'}\right)^{\frac{1}{2}} \lim_{N\longrightarrow\infty} \prod_{j=1}^{N} \left[\int_0^\infty r_j dr_j\right] \\ &\times \prod_{j=1}^{N+1} \left[I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{Mr_j r_{j-1}}{i\hbar\varepsilon}\right)\right] \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2\right) - \varepsilon V(r_j)\right]\right\}, \end{aligned} \quad (2.54)$$

et $\theta_{i,\,f} = \left(\overrightarrow{r}";\overrightarrow{r}'\right)$. Le propagateur radial $K_l\left(r",t";r',t'\right)$ peut être simplifié. En effet, compte tenu du comportement asymptotique des fonctions de Bessel modifiées

$$I_\nu\left(\frac{z}{\varepsilon}\right) \underset{\varepsilon\longrightarrow 0}{\longrightarrow} \left(\frac{\varepsilon}{2\pi z}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{z}{\varepsilon} - \frac{1}{2}\frac{\varepsilon}{z}\left(\nu^2 - \frac{1}{4}\right)\right\}, \tag{2.55}$$

il devient

$$\begin{aligned} K_l\left(r",t';r',t'\right) &= K_l\left(r",r';T\right) \qquad (2.56)\\ &= \left(\frac{1}{r"r'}\right)\lim_{N\longrightarrow\infty}\left(\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N+1}{2}}\prod_{j=1}^{N}\left[\int_0^\infty dr_j\right] \\ &\quad\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}\left[\frac{M}{2\varepsilon}\left(r_j-r_{j-1}\right)^2 - \frac{l\left(l+1\right)\hbar^2\varepsilon}{2Mr_jr_{j-1}} - \varepsilon V\left(r_j\right)\right]\right\}. \end{aligned}$$

2.4 Transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert

Considérons une particule en mouvement linéaire repérée par les positions $x\prime$ et $x"$ aux instants fixés $t\prime$ et $t"$ respectivement. Dans l'espace des phases, le propagateur qui gouverne son évolution dans le potentiel $V(x)$ est défini par l'intégrale de chemin de Feynman

$$K\left(x",t";x',t'\right) = \int Dx\left(t\right)Dp\left(t\right)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t"}\left(p\dot{x}-H\right)dt\right\}, \tag{2.57}$$

avec l'Hamiltonien

$$H = \frac{p^2}{2m} + V\left(x\right). \tag{2.58}$$

Supposons que le potentiel $V(x)$ est aussi compliqué qu'une évaluation directe de l'intégrale de chemin ne soit pas possible. Souvent, il est nécessaire d'effectuer une transformation de coordonnée $x \longrightarrow \xi$ représentée par $x = g\left(\xi\right)$ accompagnée d'une transformation temporelle $t \longrightarrow s$ définie par $dt = f(x)ds$. Pour mettre en oeuvre une telle transformation spatio-temporelle dans le calcul de l'intégrale de chemin, on commence par écrire l'opérateur résolvante donné par

$$\overset{\curlywedge}{R} = f_r(x) \frac{i\hbar}{f_l(x)(E - H + i0) f_r(x)} f_l(x), \tag{2.59}$$

où $f_l(x)$ et $f_r(x)$ sont des fonctions de la variable x, multipliant à gauche et à droite, respectivement, l'opérateur $(E - H + i0)$ et sont telles que $f_l(x)f_r(x) = f(x)$. En exprimant l'opérateur $\frac{i\hbar}{f_l(x)(E-H+i0)f_r(x)}$ dans la représentation de Schwinger [5] ,on peut associer à l'opérateur résolvante (2.59) un élément de matrice appelé amplitude de transition pour une énergie fixée ou fonction de Green

$$G(x", x'; E) = \left\langle x" \mid \hat{R} \mid x' \right\rangle = \int_{s'}^{\infty} ds" \left\langle x" \mid \hat{U}_E(s" - s') \mid x' \right\rangle, \tag{2.60}$$

où $\hat{U}(S)$ est l'opérateur pseudo-temporel d'évolution défini par

$$\hat{U}_E(S) = f_r(x) e^{-\frac{i}{\hbar} S f_l(x)(E-H) f_r(x)} f_l(x). \tag{2.61}$$

On peut maintenant convertir l'expression (2.60) en une intégrale de chemin en

subdivisant la variable temporelle S en $(N+1)$ intervalles infinitésimaux et en insérant N relations de fermeture pour arriver à la représentation intégrale approximée de la fonction de Green

$$G(x", x'; E) \approx (N+1) \int_0^{\infty} d\varepsilon_s \left\langle x" \mid \hat{U}_E^N(\varepsilon_s (N+1)) \mid x' \right\rangle, \tag{2.62}$$

avec l'intégrale de chemin pour l'amplitude pseudo-temporelle sous forme discréte donnée par

$$\left\langle x" \mid \hat{U}_E^N(\varepsilon_s (N+1)) \mid x' \right\rangle = f_r(x") f_l(x') \prod_{j=1}^{N} \left[\int dx_j \right] \prod_{j=1}^{N+1} \left[\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} A_E^N \right], \tag{2.63}$$

ou' A_E^N est l'action totale exprimée sous sa forme discréte par

$$A_E^N = \sum_{j=1}^{N+1} \left[p_j \triangle x_j - \varepsilon_s f_l(x_j) \left(H(p_j, x_j) \right) - E) f_r(x_{j-1}) \right], \tag{2.64}$$

avec $ds = \varepsilon_s = \varepsilon / f_l(x_j) f_r(x_{j-1}) = dt / f_l(x_j) f_r(x_{j-1})$. En effectuant l'intégration sur les variables p_j, nous obtenons l'intégrale de chemin dans l'espace des configurations

$$\begin{aligned} \left\langle x" \mid \hat{U}_E^N \left(\varepsilon_s \left(N+1\right)\right) \mid x' \right\rangle &= \frac{f_r(x") f_l(x')}{\sqrt{2\pi i\hbar \varepsilon_s f_l(x") f_r(x')/m}} \prod_{j=1}^{N} \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon_s}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \prod_{j=1}^{N} \left[\frac{dx_j}{\sqrt{f(x_j)}}\right] \exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}[\frac{m\left(\triangle x_j\right)^2}{2\varepsilon_s f_l\left(x_j\right) f_r\left(x_{j-1}\right)} \\ &-\varepsilon_s f_l(x_j)(V(x_j)-E) f_r(x_{j-1})]\}. \end{aligned} \tag{2.65}$$

En faisant maintenant tendre N vers l'infini et en choisissant $f_l(x) = f_r(x) = f^{\frac{1}{2}}(x)$, nous pouvons écrire la fonction de Green comme une intégrale sous la forme

$$G(x", x'; E) = \int_0^\infty dS P^E(x", x'; S), \tag{2.66}$$

avec l'intégrale de chemin

$$\begin{aligned} P^E(x", x'; S) &= \left[f_r(x") f_l(x')\right]^{\frac{1}{4}} \lim_{N\longrightarrow\infty} \prod_{j=1}^{N+1} \left[\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon_s}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \prod_{j=1}^{N}[\int \frac{dx_j}{\sqrt{f(x_j)}}] \exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N+1}[\frac{m\left(\triangle x_j\right)^2}{2\varepsilon_s\sqrt{f(x_j)f(x_{j-1})}} \\ &-\varepsilon_s\left(V(x_j)-E\right)\sqrt{f(x_j)f(x_{j-1})}]\}. \end{aligned} \tag{2.67}$$

Ce noyau est calculable moyennant une fonction régulatrice $f(x)$ appropriée.

Chapitre 3

Traitement par l'intégral de chemin de l'atome d'hydrogéne dans un espace de courbure constante

On présente dans ce chapitre un traitement par l'intégral de chemin d'un potentiel de type hydrogénoide dans un espace uniformément courbé avec une courbure positive constante.

En transformant l'intégrale de chemin radiale en une intégrale de chemin u type du potentiel de Pöschl-Teller modifié à l'aide de la technique de transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert, la fonction de Green radiale s'exprime sous forme compacte, à partir de laquelle le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées correspondantes aux états liés sont extraites.

Dans la limite de la courbure de fuite, on trouve la fonction de Green, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde correctement normalisées des états liés et de diffusion pour un atome de type hydrogènoide standard.

3.1 Introduction

Depuis la formulation de l'intégrale chemin par Feynman [6] en 1948, comme une autre approche aux méthodes de Heisenberg [7] et Schro¨dinger [8], pour décrire le mouvement d'un système quantique gouverné par un lagrangien classique exprimé en coordonnées cartésiennes dans l'espace plat, plusieurs variantes de cette approche ont émergé.

Parmi ces variantes, on peut mentionner celle introduite par DeWitt [9] pour construire le propagateur associé à une particule se déplaçant dans un espace courbé.

Cette variante a été exprimé dans deux formulations hamiltoniennes de l'intégrale de chemin.

Le premiere est basée sur la règle de l'ordre de Weyl liée à la prescription du milieu [10, 11] dans l'ecriture de l'hamiltonien du systéme et la seconde est soutenue sur le forme produit [12] .

C'est cette derniere que nous utiliserons ici pour exprimer la fonction de Green sous sa forme compcte par rapport au potentiel de Coulomb dans un espace

uniformément courbé avec une courbure positive constante $K = 1/R^2$ définie par

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \;;\quad r\langle R, \tag{3.1}$$

où Ze est la charge du noyau atomique et R désigne la courbure scalaire qui est en fait le rayon apparent de l'univers de l'ordre de grandeur $10^{26}m$ et les dimensions atomiques sont de l'ordre de $10^{-10}m$.

Cette approche par rapport à d'autres méthodes offre l'avantage de calculer directement la fonction de Green. Le potentiel (3.1) a été étudié par Schrödinger en 1940 comme exemple illustratif de la méthode de factorisation [13].

Par la suite, plusieurs autres approches théoriques ont été proposé pour résoudre ce problème. Plus précisément, Stevenson a trouvé la solution par une méthode conventionnelle [14] . Une autre solution a été obtenue par une approche du groupe dynamique $SU(1,1)$ [15].

Barut et al. [16] ont utilisé la technique d'intégrale de chemin pour résoudre le même problème en convertissant l'intégrale de chemin radiale en une intégrale de chemin kon compacte sur lla varieté du groupe $SU(1,1)$.

Par cette méthode, ils ont obtenu la fonction de Green ne contenant que la partie discrète. Dans l'espace plat, c'est-à-dire dans la limite $R \to \infty$, ils ont trouvé le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées pour l'atome d'hydrogène et aussi les états de diffusion par considérations analytiques usuelles de continuation à un facteur constant prés.

Notons que ce facteur manquant prend toute son importance pour déterminer le facteur de Gamow dans certaines réactions nucléaires à faible énergie [17, 18].

Le problème de ce facteur manquant provient du fait que le potentiel de Coulomb dans un espace de courbure positive constante a une symétrie $SU(1,1)$ cachée qui ne peut être observée qu'à la limite nulle de la courbure ($R \to \infty$), où émerge le spectre continu et n'est pas présent lorsque la courbure n'est pas nulle.

Il convient également de noter qu'une méthode de construction d'un ensemble d'états cohérents [19] et une analyse utilisant les approches supersymétriques

quantique et mécanique de l'invariance de forme [20] ont été proposées plus tard pour résoudre le problème des états liés.

Dans ce travail, nous proposons de donner la solution au problème d'un

système de type hydrogènoide quantique non-relativiste dans le potentiel (3.1) via la méthode de l'intégrale de chemin. L'avantage de cette approche est double. Premièrement, nous pouvons construire la fonction radiale de Green sous forme fermée quelle que soit la courbure scalaire. Deuxièmement, cette procédure

d'intégration de chemin permet de clarifier le facteur manquant observé dans l'expression des fonctions d'onde pour les états de diffusion de l'atome de type hydrogènoide dans l'espace plat [16].

Ce travail est organisé comme suit. Dans la section 2, nous construirons la

fonction de Green pour le potentiel (3.1). Après avoir séparé les parties

angulaires, nous convertirons l'intégrale du chemin radiale en celle associée au potentiel de

Pöschl-Teller modifié au moyen de la technique des transformations

spatio-temporelles [21].

Dans la section 3, nous obtenons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés. Dans la section 4, nous verrons qu'à la limite ($R \to \infty$), les états liés et les états de diffusion sont reproduits pour l'atome d'hydrogène dans un espace plat. La section 5 st consacrée à une conclusion.

3.2 Fonction de Green

L'espace sphérique dont il est question ici est une variété courbée uniformément de courbure positive constante $K = R^{-2}$. La forme quadratique de l'élément de ligne dans cet espace est donnée en coordonnées polaires par

$$ds^2 = \left(1 - r^2/R^2\right)^{-1} dr^2 + r^2 \left(d\theta^2 + \sin^2\theta d\Phi^2\right). \tag{3.2}$$

où $0 \leq r \langle \infty$,$0 \leq \theta \langle \pi$ et $0 \leq \Phi \langle 2\pi$. L'Hamiltonien quantique lit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \triangle_{LB} + V(r). \tag{3.3}$$

où $\triangle_{LB}$est l'opérateur de Laplace-Beltrami

$$\triangle_{LB} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{a}{\partial q^a} g^{ab} \sqrt{g} \frac{a}{\partial q^b}, \tag{3.4}$$

avec $g = \det |g_{ab}|$ et $g^{ab} g_{bc} = \delta_c^a$. Afin d'exprimer H par des opérateurs de position et de quantité, nous construisons les moments

$$P_a = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial q^a} + \frac{\Gamma_a}{2} \right), \qquad \Gamma_a = \frac{\partial}{\partial q^a} \ln \sqrt{g}, \qquad (a = r, \theta, \Phi) \ . \tag{3.5}$$

qui sont hermitiens par rapport au produit scalaire

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int \Psi_1^* \Psi_2 \sqrt{g} dr d\theta d\Phi. \tag{3.6}$$

En termes d'opérateurs de quantité de mouvement (3.5), le hamiltonien (3.3) peut être écrit sous la forme de commande de produit comme :

$$H = \frac{1}{2M} \left[\hbar(r) P_r^2 \hbar(r) + \frac{1}{r^2} \left(P_0^2 + \frac{1}{\sin^2\theta} P_\varphi^2 \right) \right] + V(r) + \triangle V(r,\theta). \tag{3.7}$$

où la correction quantique $\triangle V(r,\theta)$ est donnée par

$$\triangle V(r,\theta) = \frac{\hbar^2}{8M} \left[2hh" + \frac{4h'h"}{r} - h'^2 - \frac{1}{r^2} \left(1 + \frac{1}{\sin^2\theta} \right) \right], \tag{3.8}$$

et $h(r) = \sqrt{1 - r^2/R^2}$. Sans répéter les étapes successives de construction de l'intégrale de chemin commençant par le hamiltonien (3.7) qui s'exprime dans un ordre de produit (voir par exemple les références [8] , [17]et [18]), nous avons :

$$\begin{aligned} K(\vec{r"}, \vec{r'}; T) &= C \lim_{N\to\infty} \prod_{n=1}^{N-1} \left(\int d\vec{r} \right) \prod_{n}^{N} \left(\int \frac{d\vec{P}_n}{(2\pi h)^3} \right) \\ &\times \exp\left\{ i \sum \left[P_r \triangle r + P_\theta \triangle \theta - \varepsilon H \right] \right\}. \end{aligned} \tag{3.9}$$

où le coefficient $C = [g(r")\,g(r')]^{-\frac{1}{4}}$ est le facteur de normalisation. Effectuer le intégrations de quantité de mouvement, nous obtenons le chemin intégral dans l'espace de configuration

$$\begin{aligned} K(\vec{r"},\vec{r'};T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int\frac{r_n^2}{h(r_n)}\sin\theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n\right) \quad (3.10)\\ &\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}S(n,n-1)\right\}, \end{aligned}$$

avec l'action à court terme

$$\begin{aligned} S(n,n-1) &= \frac{M}{2\varepsilon h(r_n)\,h(r_{n-1})}(\triangle r_n)^2+\frac{Mr_nr_{n-1}}{2\varepsilon}(\triangle r_n)^2 \quad (3.11)\\ &+\frac{Mr_nr_{n-1}\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}}{2\varepsilon}(\triangle\phi_n)^2-\varepsilon\left[V(r_n)+\triangle V(r_n,\theta_n)\right]. \end{aligned}$$

Ici nous avons utilisé la notation standard $\vec{r_n} = \vec{r}(t_n)$, $\triangle u_n = u_n - u_{n-1}$,

$T = t" - t'$, $e = \frac{T}{N}$, $t' = t_0$, $t" = t_N$. Nous procédons maintenant au calcul de l'intégrale de chemin (3.10). Puisque les variables r_n, θ_n et ϕ_n sont mélangées dans (3.11), notre tâche immédiate est de les séparer. Pour ce faire, notez que, pour

la partie angulaire dans le propagateur, nous pouvons utiliser

$$\cos(\triangle\theta_n)\approx 1-\frac{(\triangle\theta_n)^2}{2!}+\frac{(\triangle\theta_n)^4}{4!}, \quad (3.12)$$

et avec l'aide de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [19] , nous pouvons faire les substitutions suivantes :

$$(\triangle\theta_n)^4\to\frac{3}{(r_nr_{n-1})^2}\left(\frac{i\hbar\varepsilon}{M}\right)^2, \quad (3.13)$$

$$(\triangle\phi_n)^4\to\frac{3}{(r_nr_{n-1}\sin\theta_{n-1})^2}\left(\frac{i\hbar\varepsilon}{M}\right)^2. \quad (3.14)$$

Il s'ensuit que

$$\frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}\frac{(\triangle\theta_n)^2}{2}\simeq\frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}\left[1-\cos(\triangle\theta_n)\right]-\varepsilon\frac{\hbar^2}{8Mr_nr_{n-1}}. \quad (3.15)$$

et

$$\frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}\frac{(\triangle\phi_n)^2}{2} \simeq \frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}\left[1-\cos\left(\triangle\phi_n\right)\right] -\varepsilon\frac{\hbar^2}{8Mr_nr_{n-1}\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}}. \tag{3.16}$$

En additionnant (3.15) et (3.16) , nous avons

$$\frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}\left[\frac{(\triangle\theta_n)^2}{2}+\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}\frac{(\triangle\theta_n)^2}{2}\right] \simeq \frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}[1-\cos\theta_n] -\frac{\varepsilon\hbar^2}{8Mr_nr_{n-1}}\left(1+\frac{1}{\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}}\right). \tag{3.17}$$

avec $\cos\theta_n = \cos\theta_n\cos\theta_{n-1}+\sin\theta_n\sin\theta_{n-1}\cos\left(\triangle\phi_n\right)$. Prenant en compte (3.8) et (3.17), l'action de courte durée(3.11)

est réécrite sous la forme :

$$S\left(n,n-1\right) = \frac{M}{2\varepsilon h\left(r_n\right)h\left(r_{n-1}\right)}\left(\triangle r_n\right)^2+\frac{Mr_nr_{n-1}}{\varepsilon}\left[1-\cos\theta_n\right] -\varepsilon\left[V\left(r_n\right)+\triangle V\left(r_n\right)\right], \tag{3.18}$$

où

$$\triangle V\left(r_n\right) = \frac{\hbar^2}{8\pi}\left(2h\left(r_n\right)h\text{''}\left(r_n\right)+4\frac{h'\left(r_n\right)h\text{''}\left(r_n\right)}{r_n}-h'^2\left(r_n\right)\right). \tag{3.19}$$

séparer les parties radiales et angulaires du propagateur, nous combinons

l'expansion en série de Fourier et le comportement asymptotique des fonctions de Bessel modifiées, pour grand $|z|$ [20], pour écrire

$$\exp\left[iz\left(1-\cos\theta_n\right)\right] = \frac{i}{2z}\sum_{l,m}^{\infty}\sum_{m,m-l_n}^{l_n}\left(2l_n+1\right)\frac{(l_n-m_n)!}{(l_n+m_n)!}\exp\left(im\triangle\phi_n\right) \times P_{l_n}^{m_n}\left(\cos\theta_n\right)P_{l_n}^{m_n}\left(\cos\theta_{n-1}\right)\exp\left[-i\frac{I_n\left(I_n+1\right)}{2z}\right], \tag{3.20}$$

et en tenant compte du lien entre les harmoniques sphériques et les polynômes de Legendre [28]

$$Y_{l_n}^{m_n}(\theta_n,\phi_n)=\begin{cases}(-1)^{m_n}\left[\frac{2l_n+1}{4\pi}\frac{(l_n-m_n)!}{(l_n+m_n)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_{l_n}^{m_n}(\cos\theta_n)\,e^{im_n\phi_n};\ m_n\geq 0,\\ \left[\frac{2l_n+1}{4\pi}\frac{(l_n+m_n)!}{(l_n-m_n)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_{l_n}^{-m_n}(\cos\theta_n)\,e^{-im_n\phi_n};\ m_n\langle\ 0,\end{cases}\tag{3.21}$$

it is more practical to use the formula

$$\begin{aligned}\exp\left[iz\left(1-\cos\theta_n\right)\right] &= \frac{2i\pi}{z}\sum_{l,m}^{\infty}\sum_{m,m-l_n}^{l_n}\exp\left[-i\frac{I_n\left(I_n+1\right)}{2z}\right]Y_{l_n}^{m_n*}(\theta_n,\phi_n)\\ &\times Y_{l_n}^{m_n}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right).\end{aligned}\tag{3.22}$$

Insérer le résultat (3.22) dans l'équation.(3.10) , nous obtenons

$$\begin{aligned}K\left(\overrightarrow{r"},\overrightarrow{r'}:T\right) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{M}{2i\pi\varepsilon\hbar}\right)^{\frac{3N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int\frac{r_n^2}{\hbar\left(r_n\right)}\sin\theta_n dr_n d\theta_n d\phi_n\right)\\ &\times\exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}[\frac{M}{2\varepsilon\hbar\left(r_n\right)\hbar\left(r_{n-1}\right)}\left(\triangle r_n\right)^2\\ &-\varepsilon\left(V\left(r_n\right)+\triangle V\left(r_n\right)\right)]\}\\ &\times\prod_{n=1}^{N-1}\left(\frac{2i\pi\varepsilon\hbar}{Mr_nr_{n-1}}\right)\sum_{l,m}^{\infty}\sum_{m,m-l_n}^{l_n}\exp\left[-\frac{i\varepsilon\hbar l_n\left(l_n+1\right)}{2Mr_nr_{n-1}}\right]\\ &\times Y_{l_n}^{m_n*}(\theta_n,\phi_n)\ Y_{l_n}^{m_n}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right),\end{aligned}\tag{3.23}$$

Les intégrations sur les variables angulaires θ_n et ϕ_n $(1\leq n\leq N-1)$ peuvent être réalisées en utilisant la relation d'orthonormalité bien connue entre les harmoniques sphériques

$$\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi Y_l^{m*}(\theta,\phi)\,Y_l^m(\theta,\phi)=l_{tt}l_{mm}\tag{3.24}$$

Nous obtenons donc pour le propagateur des coordonnées sphériques :

$$K\left(\overrightarrow{r"},\overrightarrow{r'}:T\right)=\sum_{i=0}^{\infty}\sum_{m,m-l}^{l}K_{l}\left(r",r';T\right)Y_{l}^{m*}\left(\theta",\phi"\right)\ Y_{l}^{m}\left(\theta',\phi'\right). \tag{3.25}$$

où $K_l(r",r\prime;T)$ est le propagateur radial donné par

$$\begin{aligned}K_{l}\left(r",r';T\right) &= \frac{1}{r"r'}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int\frac{dr_{n}}{\hbar\left(r_{n}\right)}\right)\\ &\times\exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}[\frac{M\left(\triangle r_{n}\right)^{2}}{2i\hbar\left(r_{n}\right)\hbar\left(r_{n-1}\right)}\\ &-\varepsilon\frac{l\left(i+1\right)\hbar^{2}}{2Mr_{n}r_{n-1}}-\varepsilon\left[V\left(r_{n}\right)+\triangle V\left(r_{n}\right)\right]]\},\end{aligned} \tag{3.26}$$

Nous introduisons ensuite une nouvelle variable angulaire χ définie par la relation

$$\sin\varkappa=\frac{r}{R}. \tag{3.27}$$

écrire (3.26) dans le formulaire

$$\begin{aligned}K_{l}\left(r",r';T\right) &= \frac{1}{R^{3}\sin\chi"\sin\chi'}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{MR^{2}}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int d\chi_{n}\right)\\ &\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}A\left(n,n-1\right)\right\},\end{aligned} \tag{3.28}$$

avec l'action de courte durée donnée par

$$\begin{aligned}A\left(n,n-1\right) &= \frac{MR^{2}}{2\varepsilon}\left[\left(\triangle\chi_{n}\right)^{2}+\frac{1}{4}\left(\tan^{2}\chi_{n}+\frac{2}{3}\right)\left(\triangle\chi_{n}\right)^{4}\right]\\ &-\varepsilon\frac{l\left(l+1\right)\hbar^{2}}{2MR^{2}\sin^{2}\chi_{n}}+\frac{3i\hbar^{2}}{4MR^{2}}+\frac{3i\hbar^{2}}{8MR^{2}}\tan^{2}\chi_{n}+\varepsilon\frac{Ze^{2}}{R}\cot\chi_{n}.\end{aligned} \tag{3.29}$$

Notez que le terme $(\triangle\chi_n)^4$ apparaissant dans (3.29) contribue de manière significative dans l'intégrale de chemin. Il peut être estimé en utilisant la formule [19] :

$$\begin{aligned}\left\langle (\triangle\chi_n)^4 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\left(\triangle\chi_n\right)\left(\triangle\chi_n\right)^4 \left[\frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right]^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{iMR^2}{2\hbar\varepsilon}\left(\triangle\chi_n\right)^2\right] \\ &= -3\left(\frac{\hbar\varepsilon}{MR^2}\right)^2.\end{aligned} \tag{3.30}$$

et remplacé par la correction quantique $\left[-\frac{\hbar^2}{4MR^2}\left(\frac{3}{2}\tan^2\chi_n+1\right)\right]$.

La propagande qui en résulte

$$\begin{aligned}K_l\left(r", r'; T\right) &= \frac{1}{R^3\sin\chi"\sin\chi'}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{j=1}^{N-1}\left(\int d\chi_n\right) \\ &\times\exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}[\frac{MR^2}{2\varepsilon}\left(\triangle\chi_n\right)^2+\frac{\varepsilon\hbar^2}{2MR^2} \\ &-\varepsilon\frac{l\left(l+1\right)\hbar^2}{2MR^2\sin^2\chi_n}+\varepsilon\frac{Ze^2}{R}\cot\chi_n]\}.\end{aligned} \tag{3.31}$$

Il décrit le problème d'intégrale de chemin pour une fonction potentielle similaire au potentiel de Rosen-Morse trigonométrique défini par

$$V\left(\chi\right)=\frac{l\left(l+1\right)\hbar^2}{2MR^2\sin^2\chi}-\frac{Ze^2}{R}\cot\chi-\frac{\hbar^2}{2MR}: \quad for 0\leq\chi\leq\pi, \tag{3.32}$$

Puisque cette intégrale de chemin (3.31) ne peut pas être directement calculée, nous considérons que le Green

vert fonction

$$\begin{aligned}G_l\left(r", r'; E\right) &= \int_0^\infty dT\exp\left[\frac{i}{\hbar}ET\right]K_l\left(r", r'; E\right) \\ &= \frac{1}{R^3\sin\chi"\sin\chi'}\int_0^\infty P_l\left(x", x'; T\right)dT.\end{aligned} \tag{3.33}$$

où

$$P_l\left(x", x'; T\right) dT = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int dx_n\right)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\tilde{A}\left(n, n-1\right)\right\} \quad (3.34)$$

est le promoteur avec l'action à court terme modifiée,

$$\tilde{A}\left(n, n-1\right) = \frac{MR^2}{2\varepsilon}\left(\triangle\chi_n\right)^2 - \varepsilon\frac{l\left(l+1\right)\hbar^2}{2MR^2\sin^2\chi_n} + \varepsilon\frac{Ze^2}{R}\cot\chi_n + \varepsilon\left(E + \frac{\hbar^2}{2MR^2}\right). \quad (3.35)$$

Comme dans Ref. [11] , effectuons la transformation complexe de l'espace définie par

$$e^{\beta} = \tanh\left(\frac{i\chi}{2}\right), \quad (3.36)$$

dans lequel la variable χ est telle que $Re\chi \in [0, \pi]$ et $Im\chi \in]-\infty, 0]$, et la variable $\beta \in]-\infty, +\infty[$. En plus de ce changement de variables, nous appliquons la transformation de temps suivante :

$$\frac{dt}{ds} = \frac{4}{\sinh^2\beta}. \quad (3.37)$$

et

$$\varepsilon = \frac{4\sigma_n}{\sinh\beta_n\sinh\beta_{n-1}}, \quad (3.38)$$

où $\sigma_n = s_n - s_{n-1}$. Sous ces transformations, la mesure et l'action de temps court deviennent respectivement

$$\begin{aligned} &\frac{1}{R^3\sin\chi"\sin\chi'}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int dx_n\right) \quad (3.39)\\ = \;&\frac{i}{2R^3}\left(\sinh\beta"\sinh\beta'\right)^{\frac{3}{2}}\lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N}\left(\frac{MR^2}{2i\pi\hbar\sigma_n}\right)^{\frac{1}{2}}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\int d\left(\frac{\beta_n}{2}\right)\right), \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\tilde{A}\left(n,n-1\right) &= \frac{MR^2}{2\sigma_n}\left(\frac{\triangle\beta_n}{2}\right)^2 \qquad (3.40)\\ &+\frac{MR^2}{2\sigma_n}\left[\frac{1}{3}-\frac{1}{12}\left(\frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}-\frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}\right)\right]\left(\frac{\triangle\beta_n}{2}\right)^4\\ &+\sigma_n\frac{\left(E-\frac{\hbar^2}{2MR^2}-\kappa\right)}{\sinh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}-\sigma_n\frac{\left(E-\frac{\hbar^2}{2MR^2}-\kappa\right)}{\cosh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}-\frac{2l\left(l+1\right)\hbar^2}{MR^2}\sigma_n,\end{aligned}$$

où

$$R = iR,\ \kappa=\frac{Ze^2}{R}, \qquad (3.41)$$

En utilisant à nouveau la procédure Mc Laughlin et Schulman pour remplacer le terme dans $\left(\frac{\triangle\beta_n}{2}\right)^4$ par une correction quantique pure et prenant en compte la contrainte

$$\frac{4}{\sinh\beta"\sinh\beta'}\int_0^\infty dS\delta\left(T-4\int_0^s\frac{ds}{\sinh^2\beta}\right)=1 \qquad (3.42)$$

la fonction radiale de Green (3.33) est alors réécrite

$$\begin{aligned}G_l\left(r",r';E\right) &= \frac{2i}{R^3}\left(\sinh\beta"\sinh\beta'\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty dS\exp\left[-i\frac{2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\hbar}{MR^2}s\right] \qquad (3.43)\\ &\times P_{mPT}\left(\beta",\beta';S\right),\end{aligned}$$

où

$$P_{mPT}(\beta", \beta'; S) = \lim_{N\to\infty} \prod_{n=1}^{N} \left(\frac{MR^2}{2i\pi\hbar\sigma_n}\right)^{\frac{1}{2}} \prod_{n=1}^{N-1} \left(\int d\left(\frac{\beta_n}{2}\right)\right) \times \exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}[\frac{MR^2}{2\sigma_n}\left(\frac{\triangle\beta_n}{2}\right)^2 +\sigma_n\left(\frac{\breve{E}-\kappa}{\sinh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)} - \frac{\breve{E}+\kappa}{\cosh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}\right)]\}, \tag{3.44}$$

avec $\breve{E} = E + \frac{3\hbar^2}{8MR^2}$. Ce noyau est formellement identique au propagateur relatif au potentiel modifié de Poëschl-Teller étudié récemment par de nombreux auteurs [17, 18]. Depuis la solution exacte de (3.43) est bien connue, on peut alors écrire directement le résultat :

$$G_l(r", r'; E) = \frac{4M}{\hbar R}\frac{\Gamma(M_1 - L_E)\Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1)\Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \left[\sinh\left(\frac{\beta"}{2}\right)\sinh\left(\frac{\beta'}{2}\right)\right]^{M_1+M_2+1} \left[\cosh\left(\frac{\beta"}{2}\right)\cosh\left(\frac{\beta'}{2}\right)\right]^{2M_2+1} \times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1 : \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)}\right) \times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1 : \tanh^2\left(\frac{\beta_n}{2}\right)\right), \tag{3.45}$$

où les symboles $\beta >$ et $\beta <$ désignent respectivement $max\,(\beta", \beta')$ et

$min(\beta", \beta')$.${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, z)$, est la fonction hypergéométrique et les abréviations suivantes ont été utilisées :

$$\begin{cases} L = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{MR^2}{2\hbar^2}(E+\kappa)}, \\ M_1 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{MR^2}{2\hbar^2}(E-\kappa)} + l + \frac{1}{2}, \\ M_2 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{MR^2}{2\hbar^2}(E-\kappa)} - l - \frac{1}{2}, \end{cases} \tag{3.46}$$

3.3 Spectre d'énergie

Le spectre d'énergie des états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (3.45). Ce ne sont que les pôles de la fonction gamma $\Gamma\left(M_1 - L_E\right)$ qui se produisent lorsque son argument est un entier négatif ou nul, c'est-à-dire, quand

$$M_1 - L_E = -n_r. \quad n_r = 0, 1, 2, 3, ... \tag{3.47}$$

En prenant en compte (3.46) , les niveaux d'énergie sont alors donnés par

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2MR^2}\left(n^2 - 1\right) - \frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}, \tag{3.48}$$

où $n = n_r + l + 1$ est le nombre quantique principal.

3.4 Fonctions d'ondes des états liés

Les fonctions d'onde correspondant aux états liés peuvent être trouvées par approximation de la fonction gamma $\Gamma\left(M_1 - L_E\right)$ à proximité des pôles (3.47) ,

$$\begin{aligned} \Gamma\left(M_1 - L_E\right) &\simeq \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!}\frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!}\frac{\hbar^2}{nMR^2}\frac{n^2 + r_n^2}{E - E_n}, \end{aligned} \tag{3.49}$$

où $\varepsilon_n = -\frac{R}{4n}$ et $a = \frac{\hbar^2}{MZe^2}$. Ensuite, en utilisant le comportement (3.49) et en prenant en considération la formule de transformation de Gauss (voir référence [22] , page 1043, équation (9.131.2))

$$\begin{aligned} {}_2F_1\left(a, b, c, z\right) &= \frac{\Gamma\left(c\right)\Gamma\left(c - a - b\right)}{\Gamma\left(c - a\right)\Gamma\left(c - b\right)}{}_2F_1\left(a, b, a + b - c + 1, 1 - z\right) + \left(1 - z\right)^{c-a-b} \\ &\times \frac{\Gamma\left(c\right)\Gamma\left(a + b - c\right)}{\Gamma\left(a\right)\Gamma\left(b\right)}{}_2F_1\left(c - a, c - b, c - a - b + 1, 1 - z\right), \end{aligned} \tag{3.50}$$

est facile de voir que le second terme de (3.50) est nul parce que la fonction gamma $\Gamma\left(a\right)$ est infinie ($a = -n_r \leq 0$). Ainsi, nous pouvons réécrire la fonction de Green sous la forme d'une expansion spectrale

$$G_l\left(r", r'; E\right) = i\hbar \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{R_{n,l}\left(r"\right) R_{n,l}^{*}\left(r'\right)}{E - E_n}, \tag{3.51}$$

dans lequel les fonctions d'ondes radiales, convenablement normalisées, sont données par

$$\begin{aligned} R_{n,l}\left(r\right) &= \frac{2^{l+1}}{\Gamma\left(2l+2\right)} \left[\frac{i}{R^3} \frac{n^2+\varepsilon_n^2}{n} \frac{\Gamma\left(1+l+i\varepsilon_n\right)\Gamma\left(1+l+n\right)}{\Gamma\left(i\varepsilon_n - l\right)\Gamma\left(n-l\right)}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \exp\left[\frac{i\pi}{2}\left(2n-l-1\right)\right] \exp\left[-i\left(1+l-n+i\varepsilon_n\right)\chi\right] \\ &\times \sin' \chi_2 F_1\left(1+l-n, 1+l+i\varepsilon_n, 2l+2; 1-e^{-2i\chi}\right). \end{aligned} \tag{3.52}$$

Cette expression est obtenue après avoir effectué les transformations suivantes :

$$\sin\chi = \frac{1}{i\sinh\beta}, \quad \sinh^2\left(\frac{\beta}{2}\right) = \frac{e^{-i\chi}}{2i\sinh\chi}, \quad \cosh^2\left(\frac{\beta}{2}\right) = \frac{e^{i\chi}}{2i\sin\chi}. \tag{3.53}$$

Cette expression est obtenue après avoir effectué les transformations suivantes :

$${}_2F_1\left(a,b,c;z\right) = \left(1-z\right)^{-a} \quad {}_2F_1\left(a, c-b, c; \frac{z}{z-1}\right). \tag{3.54}$$

on peut aussi exprimer (3.52) dans le formulaire

$$\begin{aligned} R_{n,l}\left(r\right) &= \frac{2^{l+1}}{\Gamma\left(2l+2\right)} \left[\frac{i}{R^3} \frac{n^2+\varepsilon_n^2}{n} \frac{\Gamma\left(1+l+i\varepsilon_n\right)\Gamma\left(1+l+n\right)}{\Gamma\left(i\varepsilon_n - l\right)\Gamma\left(n-l\right)}\right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \exp\left[\frac{i\pi}{2}\left(2n-l-1\right)\right] \exp\left[-i\chi\left(n+i\varepsilon_n-l-1\right)\right] \\ &\times \sin' \chi \ {}_2F_1\left(1+l-n, 1+l-i\varepsilon_n, 2l+2; 1-e^{2i\chi}\right). \end{aligned} \tag{3.55}$$

Notez que l'énergie de l'atome de type hydrogène dans l'état fondamental $(n = 1)$ est indépendante de la courbure scalaire. Il coïncide avec celui du system dans l'espace plat. C'est aussi inter Il est intéressant de noter que l'énergie E_n disparaît quand $n \simeq \sqrt{R/a}$ ˜10^{18}. Il y a donc un infini ensemble de fonctions d'onde

$R_{n,l}(r)$ correspondant aux niveaux d'énergie E_n. Mais nous devons vérifier si ces fonctions d'onde remplissent les conditions aux limites. Pour $r \to 0$, il est évident que

$$R_{n,l}(0) = 0. \tag{3.56}$$

pour $r \to \infty$, et $\varepsilon_n = -\frac{R}{an}$

$$R_{n,l}(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \exp\left[-\frac{R}{na}\arcsin\left(\frac{r}{R}\right)\right] \underset{R/a\sim 10^{36}}{\to 0} . \tag{3.57}$$

D'autre part, il est clair à l'ordre des valeurs de n supérieur à 10^{18}, le spectre d'énergie devient continu.

3.5 cas de l'atome de l'hydrogène dans un espace plat

Lorsque $R \to \infty$, la constante de courbure K devient nulle et l'espace courbe prend la forme d'un espace plat.

Le potentiel (3.1) est réduit à l'expression standard du potentiel attractif de Coulomb

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \tag{3.58}$$

Dans ce cas, nous pouvons voir à partir de (3.46) que

$$L_E \underset{R\to\infty}{\simeq} -\frac{1}{2} - i\frac{Ze^2}{2}\sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}} + \frac{R}{2}\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}, \tag{3.59}$$

$$M_1 \underset{R\to\infty}{\simeq} \frac{1}{2} + l + i\frac{Ze^2}{2}\sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}} + \frac{R}{2}\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}, \tag{3.60}$$

$$M_2 \underset{R\to\infty}{\simeq} -\frac{1}{2} - l + i\frac{Ze^2}{2}\sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}} + \frac{R}{2}\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \tag{3.61}$$

D'autre part, en utilisant la formule de transformation de Gauss (3.50) et la relation de la fonction

hypergéométrique confluente avec la série hypergéométrique [23],

$$
{}_1F_1\left(\alpha,\gamma;z\right)=\lim_{\beta\to\infty}\ {}_2F_1\left(\alpha,\beta,\gamma;\frac{z}{\beta}\right), \tag{3.62}
$$

nous pouvons montrer après un simple calcul que, comme R, la fonction radiale de Green (3.46) conduit à

$$
\begin{aligned}
\lim_{R\to\infty} G_l\left(r", r'; E\right) &= \frac{4M}{\hbar^2}\sqrt{2ME}\frac{\Gamma\left(1+l-\lambda\right)}{\Gamma\left(2l+2\right)} \\
&\quad \times z'^l e^{-\frac{1}{2}\left(z"+z'\right)}\ {}_1F_1\left(1+l-\lambda,2l+2;z'\right) \\
&\quad \times[\frac{\Gamma\left(-2l-1\right)}{\Gamma\left(1+l-\lambda\right)}z"^l\ {}_1F_1\left(1+l-\lambda,2l+2;z"\right) \\
&\quad +\frac{\Gamma\left(-2l-1\right)}{\Gamma\left(1+l-\lambda\right)}z"^{-l-1}\ {}_1F_1\left(-l-\lambda,-2l-t;z"\right)],
\end{aligned} \tag{3.63}
$$

où nous avons mis

$$
\lambda=-iZe^2\sqrt{\frac{M}{2\hbar^2E}}, \tag{3.64}
$$

et

$$
z'=\frac{2i}{\hbar}\sqrt{2ME}r' \quad , \quad z"=\frac{2i}{\hbar}\sqrt{2ME}r" \ . \tag{3.65}
$$

Utilisation du lien entre les fonctions de Whittaker et les fonctions hypergéométriques confluentes

(voir référence [22] , p.1059, équations (9.220.2) et (9.220.3))

$$
M_{\lambda,\mu}\left(z\right)=z^{\mu+\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}z}\ {}_1F_1\left(\frac{1}{2}+\mu-\lambda,2\mu+1;z\right), \tag{3.66}
$$

$$
M_{\lambda,-\mu}\left(z\right)=z^{-\mu+\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}z}\ {}_1F_1\left(\frac{1}{2}-\mu-\lambda,-2\mu+1;z\right), \tag{3.67}
$$

et la relation suivante entre les fonctions de Whittaker (voir référence [22] ,p.1059, équation (9.220.4))

$$
W_{\lambda,\mu}\left(z\right)=\frac{\Gamma\left(-2\mu\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\mu-\lambda\right)}M_{\lambda,\mu}\left(z\right)+\frac{\Gamma\left(2\mu\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\mu-\lambda\right)}M_{\lambda,-\mu}\left(z\right), \tag{3.68}
$$

$$\begin{aligned}
\lim_{R\to\infty} G_l\left(r", r'; E\right) &= C_l^c\left(r", r'; E\right) \qquad (3.69)\\
&= -\frac{l}{w}\frac{\Gamma\left(1+l+i\frac{Ze^2}{\hbar w}\right)}{\Gamma\left(2l+2\right)r"r'}\\
&\quad \times M_{-i\frac{Ze^2}{\hbar w},l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2iMw}{\hbar}r'\right) w_{-i\frac{Ze^2}{\hbar w},l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2iMw}{\hbar}r"\right).
\end{aligned}$$

où $w=\sqrt{\frac{2E}{M}}$.

3.5.1 Spectre d'énergie des États liés

Le spectre d'énergie des états liés d'un atome de type hydrogène dans un espace plat peut être obtenu en laissant $R\to\infty$ dans l'expression (3.48) . ou des $\sum$ pôles du radial Green

$$1+l+i\frac{Ze^2}{\hbar w}=-n_r; \quad n_r=0,1,2,3,... \qquad (3.70)$$

Cela donne les valeurs propres de l'énergie

$$E_n=-\frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}. \qquad (3.71)$$

où $n=1,2,3,...$ Les fonctions d'onde radiale correspondantes de l'état lié sont déduits de (3.55) comme ils peuvent être déterminés en exprimant la fonction radiale de Green (3.69) sous la forme d'une représentation spectrale

$$G_l^c\left(r", r'; E\right)=i\hbar\sum_{n=l+1}^{\infty}\frac{R_{n,l}^c\left(r"\right)R_{n,l}^c\left(r'\right)}{E-E_n}, \qquad (3.72)$$

où

$$\begin{aligned}
R_{n,l}^c\left(r\right) &= \frac{1}{(2l+1)!}\left[\frac{1}{an^2}\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{1}{r}M_{n,l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2}{an}r\right) \qquad (3.73)\\
&= \frac{1}{(2l+1)!}\left[\left(\frac{2}{an}\right)^3\frac{(n+l)!}{2n\left(n-l-1\right)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2r}{an}\right)^l\\
&\quad \times\exp\left[-\frac{r}{an}\right]\ {}_1F_1\left(1+l-n,2l+2;\frac{2r}{an}\right).
\end{aligned}$$

3.5.2 Spectre d'énergie des états de diffusion

Pour obtenir la contribution de la partie continue à la fonction de Green, exprimons (3.69) sous la forme :

$$\begin{aligned} G_l^c(r", r'; E) &= \frac{i\hbar}{2\pi\Gamma(2l+2)\, r" r'} \oint_C \frac{dz}{E + i0 - \frac{\hbar^2 z^2}{2M}} \Gamma\left(1 + l + i\frac{Ze^2}{\hbar w}\right) \quad (3.74) \\ &\times M_{-i\frac{Ze^2}{\hbar w}, l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2iMw}{\hbar} r'\right) w_{-i\frac{Ze^2}{\hbar w}, l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2iMw}{\hbar} r"\right). \end{aligned}$$

où

$$C : \begin{cases} z = k; \quad k \in [-p, p], \\ z = pe^{i\phi}; \quad \phi \in (\pi, 2\pi). \end{cases} \quad (3.75)$$

Dans la limite $p \to \infty$, en prenant en compte le comportement asymptotique des fonctions de Whittaker (voir

référence [22] ,p.1061, équations (9.227)à (9.229)), il est facile de montrer que l'intégrale sur la semi

Le cercle s'annule. Nous obtenons donc

$$\begin{aligned} G_l^c(r", r'; E) &= \frac{i\hbar}{2\pi\Gamma(2l+2)\, r" r'} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{E + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M}} \quad (3.76) \\ &\times \Gamma\left(1 + l + \frac{i}{ak}\right) M_{-\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(2ikr')\, W_{-\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(2ikr"). \end{aligned}$$

En utilisant les formules suivantes (voir référence [22] , p.1061, équation (9.231.2), p.1062, équation (9.233.2))

$$M_{\lambda,\mu}(z) = e^{-i\pi\left(\mu+\frac{1}{2}\right)} M_{-\lambda,\mu}(-z)\,; \; (2\mu \neq -1, -2, -3, ...), \quad (3.77)$$

et

$$M_{\lambda,\mu}(z) = \Gamma(2\mu+1)\, e^{-i\pi\lambda}\left[\frac{W_{-\lambda,\mu}(-z)}{\Gamma\left(\mu-\lambda+\frac{1}{2}\right)} + e^{i\pi\left(\mu+\frac{1}{2}\right)}\frac{W_{\lambda,\mu}(z)}{\Gamma\left(\mu+\lambda+\frac{1}{2}\right)}\right], \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned} G_l^c(r", r'; E) &= \frac{iM}{2\pi\hbar\Gamma^2(2l+2)\, r" r'}\int_0^{+\infty}\frac{dE_k}{E+i0-E_k}\left|\Gamma\left(1+l-\frac{i}{ak}\right)\right|^2 \quad (3.79)\\ &\times\frac{e^{\frac{\pi}{ak}}}{k} M_{\frac{i}{ak},l+\frac{1}{2}}(2ikr')\, W_{-\frac{i}{ak},l+\frac{1}{2}}(2ikr"), \end{aligned}$$

avec le spectre d'énergie

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (3.80)$$

et en tenant compte du lien entre les fonctions de Whittaker et les fonctions hypergéométriques confluentes

(voir référence [22] , p.1059, équation (9.220.1))

$$M_{\lambda,\mu}(z) = z^{\mu+\frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}}\ {}_1F_1\left(\mu-\lambda+\frac{1}{2}, 2\mu+1, z\right). \quad (3.81)$$

les fonctions d'ondes radiales sont

$$\begin{aligned} R_{k,l}^c(r) &= \left(\frac{2Mk}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\left|\Gamma\left(1+l-\frac{i}{ak}\right)\right|}{(2l+1)!} e^{\frac{\pi}{2ak}}(2kr)^l e^{-ikr} \quad (3.82)\\ &\times {}_1F_1\left(1+l+\frac{i}{ak}, 2l+2; 2ikr\right). \end{aligned}$$

Ce résultat, bien sûr, coïncide avec celui obtenu par les considérations analytiques de continuation [23].

Chapitre 4

Conclusion

Dans ce travale, nous avons présenté un traitement intégrale de chemin complet d'un atome de type hydrogène dans un espace uniformément courbé avec une courbure positive constante. La méthode intégrale du chemin utilisée ici dans la construction de la fonction de Green est très différente des autres [11, 18] . Après la séparation des parties angulaires, l'intégrale du chemin radial est ramenée à celle associée au potentiel de Poëschl-Teller modifié au moyen de la technique de transformation spatio-temporelle. Notez que par rapport aux Réf. [11, 18], cette approche nous a permis de construire, bien sûr, une expression de forme fermée simple pour la fonction radiale de Green pour le système physique décrit ci-dessus. Le spectre d'énergie résultant et les fonctions d'onde normalisées pour les états liés extraits des pôles de la fonction de Green et de leurs résidus, respectivement, sont identiques à ceux obtenus par intégration de chemin sur le collecteur du groupe $SU(1,1)$. Il est également important de noter que, dans la limite R, nous avons récupéré la fonction radiale de Green sous forme compacte pour un atome de type hydrogène dans un espace plat. En outre, nous souhaitons souligner que l'approche intégrale de chemin présente l'avantage de donner automatiquement les spectres d'énergie et les fonctions d'onde continue et continue correctement normalisées. Nos résultats sont en accord avec ceux de la littérature. Cela donne donc une clarification du facteur manquant observé dans l'expression des fonctions d'onde continue d'un atome de type hydrogène dans l'espace plat obtenu par Barut et al.[11] .

Bibliographie

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

[2] H. Kleinert, Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics and financial markets (fourth ed. World Scientific, Singapore, 2006)

[3] I. S. Gradshtein et I. M. Ryzhik, Tables of integrals, series and products (Academic Press, New York, 1965).

[4] F. Constantinescu et E. Magyari, Problems in quantum mechanics (Pergamon press, OX-ford, 1987) p. 399, Eq. (30).

[5] J. Schwinger, Phys. Rev. 82 (1951) 664.

[6] Feynman, R. P. : Rev. Mod. Phys. 20, 367 (1948)

[7] Heisenberg, W. : Zeitsch. F. Phys. 33, 879 (1925)

[8] Schr¨odinger, E. : Ann. d. Phys. 79, 361 (1926) and 489 ; 80, 437 (1926) ; 81, 109 (1926)

[9] DeWitt, B.S. : Rev. Mod. Phys. 29, 377 (1957)

[10] Grosche, C., Steiner, F. : Z. Phys. C 36, 699 (1987)

[11] Mizrahi, M. : J. Math. Phys. 16, 2201 (1975)

[12] Grosche, C. : Phys. Lett. A 128, 113 (1988)

[13] Schr¨odinger, E. : Proc. R. Irish Acad. A 46, 9 (1940) ; Proc. R. Irish Acad. A 46, 183 (1941), A 47, 53 (1941)

[14] Stevenson, A.F. : Phys. Rev. 59, 842 (1941)

[15] Barut, A.O., Wilson, R. : Phys. Lett. A 110, 353 (1985)

[16] Barut, A.O., Inomata, A., Junker, G. : J. Phys. A : Math. Gen. 20, 6271 (1987)

[17] Gamow, G.Z. : Z. Phys. 51, 204 (1928)

[18] Gurney, R.W., Condon, E.U. : Phys. Rev. 33, 127 (1929)

[19] Thaik, M., Inomata, A. : J. Phys. A : Math. Gen. 38, 1767 (2005)

[20] Moulla, H. : Magister Thesis Univ. Constantine 1 (2012)

[21] Kleinert, H. Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets, 5th edn. World Scientific, Singapore (2009)

[22] Gradshtein, I.S., Ryzhik, I.M. : Tables of Integrals, Series and Products. Academic Press, New York (1965)

[23] Landau, L.D., Lifchitz, E.M. : Quantum Mechanics. Pergamon, Oxford (1958)

Résumé:
Ce mémoire concerne une discussion complète du problème de l'atome d'hydrogène dans un espace courbé par l'approche de l'intégrale de chemin de Feynman.
Deux types d'espaces courbés sont considérés. Le premier étant un espace courbé sphérique, c'est à dire un espace déformé caractérisé par une constante de courbure positive et le second est un espace hyperbolique qui est un espace courbé avec une constante de courbure négative.
Dans les deux cas (espace courbe sphérique et espace hyperbolique), la fonction de Green radiale est construite sous forme compacte. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées sont extraits respectivement des pôles et des résidus de la fonction de Green radiale.
Dans le cas du mouvement dans l'espace courbé sphérique, la particule possède uniquement des états liés et dans celui de l'espace courbé hyperbolique en plus des états liés, il y a des états de diffusion.