

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediène



U.S.T.H.B / Alger

Faculté de Physique

THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de Doctorat en :

PHYSIQUE

Spécialité : PHYSIQUE THEORIQUE

Par :

DIAF Ahmed

SUJET

- I) Application des intégrales de Feynman en physique des basses énergies.
II) Extension de la méthode des potentiels Q.E.S.

Soutenue publiquement le : 02/05/2007, devant le Jury composé de :

Mr L. CHETOUANI	Professeur (U. de Constantine)	Président de Jury
Mr A. CHOUCHAOUI	Professeur (U.S.T.H.B.)	Directeur de thèse
Mr M. BENTAIBA	Professeur (U. de Blida)	Examineur
Mme F. CHAFA	Professeur (U.S.T.H.B.)	Examinatrice
Mme F. Z. IGHEZOU	Professeur (U.S.T.H.B.)	Examinatrice
Mr M. HACHEMANE	Maître de conférences (U.S.T.H.B.)	Examineur

A mon père ;

A ma mère ;

A tous ceux qui me sont chères.

A ma femme.

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de physique théorique de l'U.S.T.H.B., sous la direction de **Mr A. CHOUCHAOUI**, Professeur à l'U.S.T.H.B, qu'il trouve ici l'expression de ma profonde et sincère reconnaissance pour son suivi, avec le plus grand soin, de mes travaux de recherche. Il a su, en plus, me faire bénéficier de son expérience, de sa compétence et de sa disponibilité tout au long de la préparation de cette thèse.

Je remercie **Mr L. CHETOUANI** Professeur à l'Université de Constantine, de m'avoir honoré en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Comme j'exprime également ma profonde gratitude à Mesdames **F. CHAFA** et **F.Z IGHEZOU**, Professeurs à l'U.S.T.H.B., Messieurs **M. HACHEMANE** Maître de conférences à l'U.S.T.H.B., et à **M. BENTAIBA** Professeur à l'Université de Blida, pour avoir bien voulu examiner cette thèse en faisant partie du Jury.

Ma reconnaissance s'étend également à tous mes frères et sœurs sans oublier ma belle famille ainsi qu'à tous mes amis qui m'ont soutenu et encouragé tout au long de ce travail.

Enfin, je remercie tous ceux qui ont participé de près ou de loin dans la réalisation de ce travail.

Table des matières

Introduction	4
1 Concepts et généralités sur le formalisme de Feynman	9
1.1 Dualité onde-corpuscule et expérience de pensée de Feynman	9
1.2 Construction du propagateur	11
1.3 Représentation du propagateur dans l'espace des phases-produit de Lie-Trotter	12
1.4 Passage du propagateur à la fonction de Green.	14
1.5 Application au cas de l'oscillateur harmonique	15
1.5.1 Pour l'état fondamental ($n = 0$) :	17
1.5.2 Pour l'état ($n = 1$) :	18
1.5.3 Pour l'état ($n = 2$) :	18
2 Traitement du potentiel de Bargmann dans le formalisme des intégrales de chemins	19
2.1 Introduction	19
2.2 Ecriture du propagateur partiel pour le potentiel de Bargmann	20
2.3 Transformation des coordonnées d'espace et du temps	22
2.4 Calcul de l'intégrale de chemins dans S^3 :	25
2.5 Spectre des énergies et fonctions d'onde :	29
2.6 Cas spécial	31
3 Nouvelle méthode d'approximation basée sur les potentiels quasi-exactement solubles	34
3.1 Introduction	34

3.2	la méthode des potentiels $Q.E.S$	35
3.3	Nouvelle méthode d'approximation appliquée aux potentiels centraux : . .	37
3.3.1	1 ^{er} cas : Le potentiel sextique	37
3.3.2	2 ^{ème} Cas : Le potentiel de Killingbeck	40
3.3.3	3 ^{ème} Cas : Le potentiel de Varshni.	42
3.4	Résultats et discussion	43
	conclusion	47

Liste des tableaux

3.1	Energies E_l relatives au potentiel (3.11) pour différentes valeurs des paramètres a_{2n}	45
3.2	Energies E_l relatives au potentiel (3.26) pour différentes valeurs des paramètres avec $e=1$	46
3.3	Energies E_l relatives au potentiel (3.36) pour différentes valeurs du paramètre A et avec $G=0.01$	46

Introduction

La science s'est imposée comme une grande aventure intellectuelle. Il faut, pour s'y engager, une brillante imagination créatrice, tempérée par une discipline stricte, fondée sur un noyau solide d'observations concrètes ; la science a attiré certains des meilleurs esprits dans toutes les civilisations qui se sont développées jusqu'au stade où elles étaient capables de relever par cette voie le défi de la nature. Car la science ne se réduit pas à une simple collecte de faits, bien que celle-ci soit une nécessité ; c'est un système de corrélations logiques de ces faits, permettant d'étayer une hypothèse ou une théorie. Cette dernière est elle-même affectée par la perspective générale de l'époque où elle est formulée. La théorie doit être assez robuste pour attirer des esprits habitués à la pensée logique et, en même temps, assez ouverte pour laisser place à des développements et ajustements, à la lumière de découvertes ultérieures [1]

La physique théorique est la première science à avoir utilisé les mathématiques : elle s'attache à décrire et à prédire les résultats sous forme d'expressions mathématiques. La formulation abstraite des phénomènes physiques a débuté en Grèce il y a plus de 2000 ans, avec la loi décrivant la poussée d'Archimède. La notoriété scientifique tient à peu de choses, les véritables débuts de la physique théorique sont un peu plus tardifs ; on peut les associer aux lois de Kepler et surtout à leur explication par les lois du mouvement et de la gravité due à Newton qui est le premier à avoir développé une formulation mathématique rendant compte de la réalité physique [2].

Jusqu'à 1880, la physique a atteint un état de maturité assez encourageant où la plupart des phénomènes connus pouvaient s'expliquer par la mécanique Newtonienne, la théorie électrique de Maxwell, la thermodynamique et la mécanique statistique de Boltzmann. Seules quelques données ou phénomènes demeuraient inexpliqués, comme la forme des spectres des solides et des gaz.

Cependant, une série de découvertes remarquables au cours de la fin du 19^{ème} siècle

venait remettre en question les bases de la physique classique : L'effet photoélectrique, le rayonnement du corps noir et l'effet Compton. Ces découvertes ont poussé les physiciens à développer de nouvelles théories capables d'apporter des explications à ces phénomènes. Dès lors, deux grandes théories ont vu le jour : la théorie quantique et la théorie de la relativité. Ces deux dernières, qui permettent d'expliquer les découvertes précédentes et de conduire à de nouvelles découvertes, modifient en profondeur les concepts de la physique et notre perception du monde. Toutes les ambiguïtés ont été levées grâce aux travaux de Louis de Broglie qui a introduit la notion de dualité onde-corpuscule, et à ceux d'Erwin Schrödinger et de Werner Heisenberg qui ont bâti respectivement la formulation différentielle de la mécanique quantique et son formalisme matriciel. Selon ce dernier, les variables physiques comme la position q et le moment p , ne sont plus représentés par des nombres mais par des matrices ; alors que dans le formalisme de Schrödinger [3] l'état d'un système quantique est décrit par une fonction d'onde solution d'une équation différentielle du second ordre.

C'est en s'inspirant des travaux de Dirac [4], que Feynman a pu construire un troisième formalisme basé sur le principe de la superposition [5, 6]. Dans cette théorie, on convient d'attribuer à chaque trajectoire une phase régie par le lagrangien classique du système physique étudié. L'amplitude de probabilité pour aller d'un point espace temps (x',t') à un autre (x'',t'') est proportionnelle à l'exponentielle d'une action. L'amplitude totale, appelée propagateur, est la somme des amplitudes relatives à tous les chemins possibles.

Le formalisme de Feynman présente de nombreux avantages ; sa formulation lagrangienne lui permet en effet, de traiter indifféremment les problèmes dépendant et indépendant du temps [6-8] et s'applique ainsi, aisément en mécanique quantique relativiste et en théorie des champs [9].

L'application du formalisme des intégrales de chemin aux problèmes de la particule libre et de l'oscillateur harmonique s'est faite avec succès. Cependant, ce formalisme a rencontré des difficultés énormes dans l'étude de l'atome d'hydrogène. Il a fallu attendre l'année 1978 pour que ce problème soit résolu avec l'introduction d'une nouvelle transformation dite de Duru-Kleinert [10]. Dès lors, de nombreux travaux ont été réalisés et ont permis à ce formalisme de se développer d'avantage avec l'élaboration de nouvelles techniques de calcul. En plus des intégrations successives, nous pouvons citer la méthode polygonale [11], l'approximation semi-classique [12], les transformations spatio-temporelles,

les méthodes faisant intervenir la théorie des groupes [13] etc...

Nous pouvons en outre, classer ces techniques en deux types : celles qui conduisent à des calculs simplifiés via les transformations espace-temps, et celles qui transforment le problème initial en un problème relativement simple avec une restriction sur le domaine de variation des paramètres du potentiel étudié (méthode CES) [14, 15]. Pour les cas traités exactement, nous pouvons citer les potentiels de Coulomb [16], de Poshell-Teller [17], Rosen-Morse [17], Morse[8], Maining Rosen [18].

Les intégrales de parcours trouvent également un champ d'application en physique statistique [19], physique des solides [8] et même en économie [19].

Malgré les résultats encourageants obtenus grâce à l'introduction des transformations spatio-temporelles, certains cas restent jusqu'à présent insolubles. Il a fallu, alors, développer des méthodes d'approximation capables d'approcher au mieux les résultats exacts. Nous pouvons citer parmi ces techniques, celle de Feynman-Kleinert [19, 20]. Un traitement perturbatif [21] a permis, récemment, d'améliorer de manière sensible les performances de la méthode initiée par Feynman et Kleinert.

Nous nous proposons de développer, dans le présent travail, deux nouvelles techniques de calcul. La première a pour domaine d'application le formalisme de Feynman, alors que la seconde a pour base le formalisme de Schrödinger.

Les potentiels auxquels nous avons appliqué ces techniques, sont utilisés comme modèle mathématiques dans la description de phénomènes rencontrés aussi bien en physique qu'en chimie.

Le premier chapitre de cette thèse est un exposé succinct sur les concepts et les notions fondamentales du formalisme des intégrales de chemins. Une application à l'oscillateur harmonique a été présentée.

Nous présentons, dans *le deuxième chapitre*, le calcul de l'énergie de l'état "s" ainsi que la fonction d'onde associée dans le cas du potentiel de Bargmann, dans le cadre du formalisme des intégrales de Feynman.

Cette thèse comporte *un troisième chapitre* consacré à l'application d'une méthode de calcul inédite, dans la détermination du spectre des énergies pour trois familles de potentiels. L'idée de base de cette technique de calcul consiste en la séparation du potentiel étudié en deux parties : la première est un potentiel Q.E.S alors que la seconde sera considérée comme une perturbation.

La particularité des potentiels Q.E.S apparaît dans le fait que leur équation de Schrödinger, n'admet de solutions exactes, que dans les cas où certains paramètres de ces potentiels sont assujettis à des contraintes [22-28]. De tels potentiels sont habituellement utilisés dans l'étude des systèmes perturbés rencontrés en physique des particules [29], en théorie quantique des champs [30, 31] et dans l'étude de la structure nucléaire [32]. Nos résultats seront confrontés à ceux calculés numériquement.

Enfin, nous terminerons cette étude par une conclusion.

1^{ère} Partie

Chapitre 1

Concepts et généralités sur le formalisme de Feynman

1.1 Dualité onde-corpuscule et expérience de pensée de Feynman

Au début du 20^{ème} siècle, des faits expérimentaux nouveaux tels le rayonnement du corps noir, l'effet photo électrique et l'effet Compton ont mis en évidence le caractère corpusculaire de la lumière. Ces constatations ont permis à Louis de Broglie d'énoncer son principe de dualité, qui stipule que dans le monde quantique, les objets possèdent un double comportement : ondulatoire et corpusculaire.

Inspiré de l'expérience des interférences de Young, Feynman [6] a imaginé un dispositif expérimental dans lequel la source lumineuse est remplacée par un canon à électrons. Ces électrons sont captés par un détecteur placé à différentes distances x du centre de l'écran E comme le montre la figure 1.

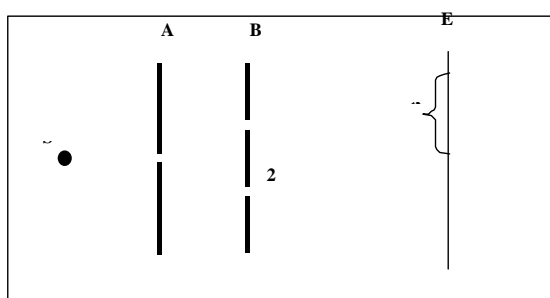


Figure 1 : Expérience de Feynman

Les résultats enregistrés sur l'écran E sont représentés sur la figure 2 :

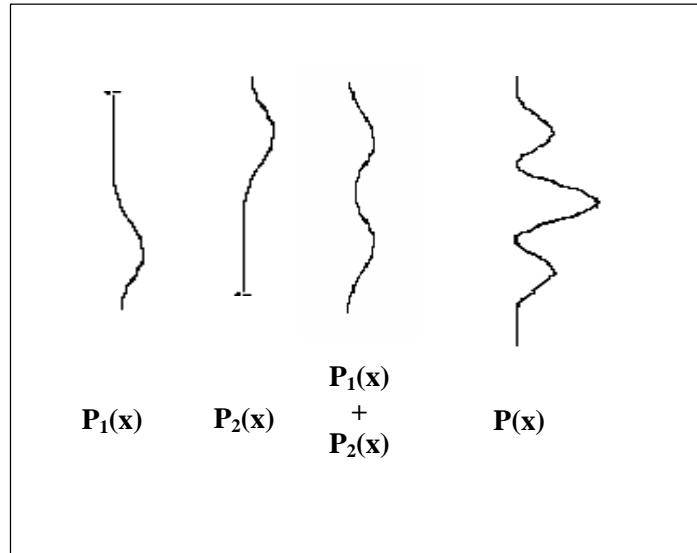


Figure 2 : Résultats enregistrés

$P(x)$ donne l'intensité enregistrée par le détecteur le long de l'écran lorsque les deux fentes sont ouvertes.

$P_1(x)$ représente l'intensité enregistrée en fermant la fente 1 et en laissant la fente 2 ouverte.

$P_2(x)$ concerne le cas où nous ouvrons la première fente et en laissant la seconde fermée.

Les résultats obtenus nous permettent de constater que :

$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x) \quad (1.1)$$

Ceci nous conduit à conclure que les électrons ont un comportement ondulatoire. Dans le but de donner un sens physique à ces résultats, Feynman a introduit la notion d'amplitude de probabilité complexe $\phi(x)$ où $P(x)$ n'est autre que son module au carré :

$$P(x) = |\phi(x)|^2 \quad (1.2)$$

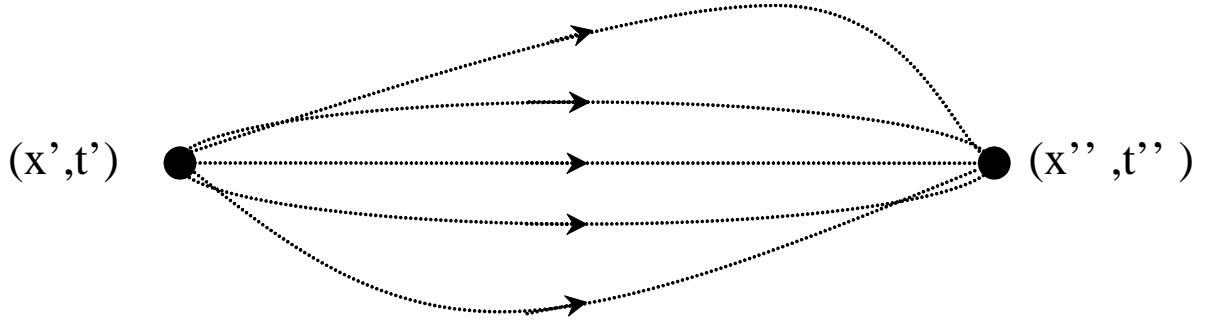
D'où :

$$\begin{cases} P_1(x) = |\phi_1(x)|^2 \\ P_2(x) = |\phi_2(x)|^2 \end{cases} \quad (1.3)$$

l'amplitude de probabilité pour que l'électron tombe en un point situé à une distance x du centre de l'écran, est donnée par la somme des deux amplitudes $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$.

L'expérience précédente peut être étendue au cas d'un écran comportant un grand nombre de fentes. L'amplitude de probabilité totale, correspondant à tous les chemins possibles, est donnée par la somme des contributions des amplitudes partielles relatives à toutes les fentes.

Feynman a appliqué ces résultats au cas d'une particule se déplaçant d'un point espace-temps (x', t') à un autre (x'', t'') .



L'amplitude de probabilité globale s'écrit alors,

$$K(x'', t''; x', t') = \sum_{\substack{\text{sur tous} \\ \text{les chemins} \\ \text{possibles}}} \Phi(x(t)) \quad (1.4)$$

1.2 Construction du propagateur

Considérons deux points espace-temps (x', t') et (x'', t'') , et divisons l'intervalle de temps $[t', t'']$ en N intervalles égaux et de largeur ε .

Posons : $x' = x(t')$ et $x'' = x(t'')$

Sachant que x' et x'' sont fixes, il est évident que $\delta x'$ et $\delta x''$ soient nulles.

Pour un intervalle de temps infinitésimal ε , le propagateur d'une particule soumise à un potentiel $V(x)$, et se mouvant entre deux points très voisins peut s'écrire comme [33, 34] :

$$\begin{aligned} K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) &\equiv K(x_{n+1}, x_n; \varepsilon) \\ &= \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right]^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{\varepsilon^2} - V(x_n) \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Nous savons par ailleurs, que les deux fonctions d'onde $\Psi(x_{n+1}, t_{n+1})$ et $\Psi(x_n, t_n)$ sont reliées par :

$$\Psi(x_{n+1}, t_{n+1}) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_{n+1}, t_{n+1}; x_n, t_n) \Psi(x_n, t_n) dx_n \quad (1.6)$$

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

$$K(x'', t''; x', t') = \int \mathfrak{D}x(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(x(t)) \right] \quad (1.7)$$

où la mesure \mathfrak{D} et l'action \mathcal{S} sont données respectivement par :

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}x(t) &= \left[\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right]^{-1/2} \prod_{n=1}^{N-1} \frac{dx_n}{\left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{-1/2}} \\ \mathcal{S}(x(t)) &\equiv \sum_{n=1}^N \mathcal{S}(x_n, x_{n-1}; \varepsilon) = \sum_{n=1}^N \left[\frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\varepsilon} - \varepsilon V(x_n) \right] \end{aligned}$$

Notons qu'à la limite classique, $\hbar \rightarrow 0$, les arguments $\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(x(t))$ deviennent importants de sorte que leurs contributions dans le propagateur s'annulent mutuellement. Le terme dominant dans ce cas, correspond au chemin classique.

1.3 Représentation du propagateur dans l'espace des phases-produit de Lie-Trotter

Le propagateur K peut s'écrire en fonction de l'opérateur d'évolution dans le temps de la manière suivante :

$$K(x, t; x', t') = \langle x | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} T \hat{H} \right] | x' \rangle \quad (1.8)$$

avec $\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + V(x)$ et $T = t - t'$.

Nous pouvons mettre le propagateur sous forme d'une intégrale multiple de Riemann de dimension N , en décomposant l'opérateur d'évolution en un produit de N opérateurs infinitésimaux (produit de Lie-Trotter) [35].

$$\exp \left\{ -\frac{iT}{\hbar} \left[\frac{P^2}{2m} + V(x) \right] \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \exp \left[-\frac{iT V(x)}{\hbar N} \right] \right\}^N. \quad (1.9)$$

Il en découle :

$$K(x, t; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x | \left\{ \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] \exp \left[-\frac{iT V(x)}{\hbar N} \right] \right\}^N | x' \rangle. \quad (1.10)$$

En injectant $(N - 1)$ fois la relation de fermeture $\int |x_i\rangle dx_i \langle x_i| = 1$, dans l'expression (1.10), nous aboutissons à :

$$K(x, t; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \exp \left[-\frac{iT V(x_n)}{\hbar N} \right] \langle x_n | \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] | x_{n-1} \rangle \prod_{n=1}^{N-1} dx_n, \quad (1.11)$$

injectons la relation de fermeture de l'espace des impulsions dans l'expression de l'élément de matrice de l'opérateur énergie cinétique.

$$\langle x_n | \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] | x_{n-1} \rangle = \int \langle x_n | \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] | p_n \rangle \langle p_n | x_{n-1} \rangle dp_n, \quad (1.12)$$

nous obtenons après intégration,

$$\begin{aligned} \langle x_n | \exp \left[-\frac{iT P^2}{2\hbar m N} \right] | x_{n-1} \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left[\frac{T}{2mN} p_n^2 - p_n (x_n - x_{n-1}) \right] \right] dp_n \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon} (x_n - x_{n-1})^2 \right] \end{aligned} \quad (1.13)$$

où $\varepsilon = T/N$

La substitution de (1.13) dans(1.11) nous conduit à :

$$K(x, t; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{N/2} \int \cdots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{m}{2\varepsilon} (x_n - x_{n-1})^2 - \varepsilon V(x_n) \right] \right] \prod_{n=1}^{N-1} dx_n \quad (1.14)$$

Nous pouvons également écrire le propagateur sous une forme hamiltonienne :

$$K(x, t; x', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \right]^N \int \cdots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[p_n (x_n - x_{n-1}) - \varepsilon \left(\frac{p_n^2}{2m} + V(x_n) \right) \right] \right] \times \prod_{n=1}^{N-1} dx_n \prod_{n=1}^N dp_n \quad (1.15)$$

ou encore,

$$K(x, t; x', t') = \int \cdots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (p\dot{x} - H(x, p)) dt \right] \mathfrak{D}x(t) \mathfrak{D}p(t) \quad (1.16)$$

Il est intéressant de souligner que la forme hamiltonienne donnée par (1.16), s'adapte mieux aux problèmes faisant intervenir des contraintes [36] (exemple : particule confinée dans un secteur, rotateur rigide etc...).

1.4 Passage du propagateur à la fonction de Green.

Comme nous l'avons vu précédemment, le propagateur peut être exprimé en fonction de l'opérateur d'évolution dans le temps comme suit :

$$K(x'', t''; x', t') = \langle x'' | U(t'', t') | x' \rangle, \quad (1.17)$$

où $U(t'', t')$ est donné par :

$$U(t'', t') = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'' - t') \right], \quad (1.18)$$

avec : $T = t'' - t'$

Il est par ailleurs possible d'extraire le spectre d'énergie ainsi que la fonction d'onde correspondante d'un système physique donné, à partir de la fonction de Green. Cette

dernière n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur. En effet,

$$G(x'', x', E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dT e^{i(E+i\varepsilon)T/\hbar} K(x'', x'; T), \quad (1.19)$$

où ε est une constante positive.

cette fonction vérifie la relation :

$$\left(\hat{H} - E \right) G(x'', x', E) = \delta(x'' - x'). \quad (1.20)$$

La relation (1.18), nous permet d'écrire :

$$G(x'', x', E) = \langle x'' | \frac{1}{\hat{H} - E - i\varepsilon} | x' \rangle \quad (1.21)$$

en introduisant la relation de fermeture sur les kets $|n, l\rangle$ dans l'équation (1.19), il vient,

$$G(x'', x', E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \sum_{n,l} dT \langle x'' | n, l \rangle \langle n, l | e^{i(E+i\varepsilon)T/\hbar} e^{-iHT/\hbar} | x' \rangle \quad (1.22)$$

ou encore,

$$G(x'', x', E) = \sum_{n,l} \frac{\chi_{n,l}^*(x') \chi_{n,l}(x'')}{E_{n,l} - E - i\varepsilon} \quad (1.23)$$

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

$$K(x'', t'', x', t') = \sum_{n,l} \chi_{n,l}^*(x') \chi_{n,l}(x'') e^{-iE_{n,l}T/\hbar} \quad (1.24)$$

1.5 Application au cas de l'oscillateur harmonique

Le propagateur relatif à l'oscillateur harmonique est donné par [8] :

$$K(x'', x'; T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2i\hbar} \left[(x''^2 + x'^2) \cot \omega T - 2 \frac{x'' x'}{\sin \omega T} \right] \right\} \quad (1.25)$$

Pour $x'' = x' = x$ la relation précédente devient,

$$K(x, x; T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{i m \omega x^2}{\hbar \sin \omega T} [1 - \cos \omega T] \right\} \quad (1.26)$$

la fonction de Green correspondante s'obtient via la relation (1.19).

En intégrant le propagateur (1.26) par rapport à la variable x , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x; T) dx &= \frac{1}{2i \sin(\omega T/2)} \\ &= \frac{e^{-i\omega T/2}}{1 - e^{-i\omega T}} \end{aligned} \quad (1.27)$$

le développement :

$$\frac{1}{1 - e^{-i\omega T}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-in\omega T} \quad (1.28)$$

nous permet d'arriver à :

$$\frac{e^{-i\omega T/2}}{1 - e^{-i\omega T}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega T(n+1/2)} \quad (1.29)$$

En identifiant (1.24) à (1.29), nous obtenons l'expression de l'énergie E_n :

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (1.30)$$

Le spectre des énergies étant connu, nous pouvons maintenant extraire les fonctions d'onde correspondantes en utilisant une autre écriture du propagateur (1.25). Ceci devient possible en remplaçant $\sin \omega T$ et $\cos \omega T$ par :

$$\sin \omega T = \frac{e^{i\omega T}(1 - e^{-2i\omega T})}{2i}$$

et

$$\cos \omega T = \frac{e^{i\omega T}(1 + e^{-2i\omega T})}{2}$$

Le propagateur devient :

$$\begin{aligned} K(x'', x'; T) &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} (1 - e^{-2i\omega T})^{-1/2} \\ &\times \exp \left\{ \frac{m\omega}{\hbar} \left[- (x''^2 + x'^2) \frac{(1 + e^{-2i\omega T})}{2(1 - e^{-2i\omega T})} + 2x''x' \frac{e^{-i\omega T}}{1 - e^{-2i\omega T}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.31)$$

En utilisant les développements suivants :

$$(1-x)^{-1/2} = 1 + \frac{x}{2} + \dots \quad \text{et} \quad (1-x)^{-1} = 1 + x + \dots \quad \text{pour} \quad |x| < 1$$

Nous obtenons,

$$\begin{aligned} K(x'', x'; T) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T} + \dots\right) \\ &\times \exp\left\{\frac{m\omega}{\hbar}\left[-\frac{1}{2}(x''^2 + x'^2)\right] (1 + e^{-2i\omega T})(1 + e^{-2i\omega T} + \dots)\right. \\ &\left.+ 2x''x'e^{-i\omega T}(1 + e^{-2i\omega T} + \dots)\right\} \end{aligned} \quad (1.32)$$

Le développement de l'expression ci-dessus à l'ordre deux conduit à :

$$\begin{aligned} K(x'', x'; T) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-i\omega T/2} \left(1 + \frac{1}{2}e^{-2i\omega T}\right) \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 + x'^2)\right] \\ &\times \left[1 - \frac{m\omega}{\hbar}(x''^2 + x'^2)e^{-2i\omega T} + \frac{2m\omega}{\hbar}x''x'e^{-i\omega T}\right. \\ &\left.+ \frac{2m^2\omega^2}{\hbar^2}x''^2x'^2e^{-2i\omega T} + \dots\right] \end{aligned} \quad (1.33)$$

Nous savons en outre, que le propagateur peut s'écrire comme :

$$K(x'', t'', x', t') = \sum_n^{\infty} \chi_n^*(x') \chi_n(x'') e^{-iE_n T/\hbar} \quad (1.34)$$

avec $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$

ainsi, nous pouvons, par identification, extraire les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique.

1.5.1 Pour l'état fondamental ($n = 0$) :

nous avons $E_0 = (1/2)\hbar\omega$ comme énergie. A partir des équations (1.33) et (1.34), nous pouvons tirer par identification,

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 + x'^2)\right] e^{-i\omega T/2} = \chi_0^*(x') \chi_0(x'') e^{-iE_0 T/\hbar} \quad (1.35)$$

d'où alors,

$$\chi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right] \quad (1.36)$$

1.5.2 Pour l'état ($n = 1$) :

l'énergie est donnée par $E_1 = (3/2)\hbar\omega$. De la même manière que précédemment, nous avons à partir des équations (1.33) et (1.34)

$$\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{2m\omega}{\hbar} x'x'' \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 + x'^2)\right] e^{-\frac{3}{2}i\omega T} = \chi_1^*(x') \chi_1(x'') e^{-iE_1 T/\hbar} \quad (1.37)$$

d'où

$$\chi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right] \quad (1.38)$$

1.5.3 Pour l'état ($n = 2$) :

Dans ce cas $E_2 = (5/2)\hbar\omega$. En comparant les équations (1.33) et (1.34), nous aboutissons à :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x''^2 + x'^2)\right] \frac{1}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x''^2 - 1\right) \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x'^2 - 1\right) e^{-\frac{5}{2}i\omega T} \\ &= \chi_2^*(x') \chi_2(x'') e^{-iE_2 T/\hbar} \end{aligned} \quad (1.39)$$

d'où alors,

$$\chi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right] \quad (1.40)$$

Les fonctions d'onde obtenues sont en accord avec celles que donne la mécanique quantique standard. Nous rappelons que la résolution de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique, conduit à :

$$\chi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{2^{2n}\pi\hbar n!}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

où les $H_n(x)$ sont les polynômes d'Hermite [37].

avec : $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$; $H_2(x) = 4x^2 - 2$;.....

Chapitre 2

Traitement du potentiel de Bargmann dans le formalisme des intégrales de chemins

2.1 Introduction

Plusieurs travaux réalisés durant les dernières décennies, avaient pour but la recherche en mécanique quantique non relativiste, de solutions exactes pour l'équation de Schrödinger relative à des formes de potentiels compliquées. Le gain d'intérêt que revêtent de tels travaux, provient du fait que les solutions exactes obtenues, serviront à tester la fiabilité aussi bien des méthodes perturbatives que des méthodes non perturbatives utilisées en physique [38, 39].

D'autre part, le formalisme des intégrales de chemin qui représente une autre formulation de la mécanique quantique, a permis d'étudier d'une manière satisfaisante, les problèmes de la particule libre, de l'oscillateur harmonique etc...[6]. Cependant, l'application de ce formalisme au cas de l'atome d'hydrogène s'est avérée difficile; il a fallu attendre plusieurs années pour que ces difficultés soient surmontées avec l'introduction de la transformation espace-temps de Duru-Kleinert [8, 10]. Dès lors, de nombreux potentiels ont été étudiés exactement [40, 41, 42] via les transformations de coordonnées et de temps.

Ce chapitre est consacré à la détermination, dans le cadre des intégrales de Feynman, du spectre des énergies ainsi que les fonctions d'onde correspondantes relatifs au potentiel

de Bargmann. Ce dernier a pour expression :

$$V(r) = \frac{1}{ka^2} \left[\frac{\beta(\beta - 1)e^{-\frac{2r}{a}}}{(1 - e^{-\frac{r}{a}})^2} - \frac{Ae^{-\frac{r}{a}}}{1 - e^{-\frac{r}{a}}} \right] \quad (2.1)$$

où k , a et β sont des paramètres.

Il est largement utilisé dans la description des vibrations des molécules diatomiques, et constitue, également, un bon modèle dans la description de nombreux phénomènes physiques. Ce potentiel a déjà fait l'objet d'une étude détaillée dans le cadre du formalisme de Schrödinger [43].

2.2 Ecriture du propagateur partiel pour le potentiel de Bargmann

Comme le potentiel de Bargmann est central, il est possible de séparer son intégrale de chemin en deux parties : l'une radiale et l'autre angulaire. Les coordonnées polaires semblent les mieux appropriées pour étudier ce problème. Plusieurs cas similaires ont été traités [44, 45] moyennant d'autres techniques. Nous pouvons citer comme exemple, le potentiel de Hulthen où Cai et al [41] ont converti l'intégrale de chemin radiale, pour $l = 0$, en une intégrale angulaire dans S^3 où les variables angulaires décrivent une variété de groupe de la symétrie dynamique. Les résultats concernant ce potentiel, nous serviront dans la discussion de la qualité de nos résultats. En effet, il est possible de passer du potentiel de Bargmann à celui de Hulthen en posant $\beta = 1$.

Le propagateur relatif au potentiel de Bargmann, entre deux points espace-temps (r', t') et (r'', t'') , a pour expression [8] :

$$K(r'', t''; r', t') = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(r'r'')^{-1} K_l(r'', t''; r', t') Q_l(\theta, \varphi) \quad (2.2)$$

où

$$K_l(r'', t''; r', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \quad (2.3)$$

avec $S_j = \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 + \frac{l(l+1)}{2Mr_j r_{j-1}} \varepsilon + \varepsilon \left(\frac{\beta(\beta - 1)}{ka^2} \frac{e^{-\frac{2r_j}{a}}}{(1 - e^{-\frac{r_j}{a}})^2} - \frac{1}{ka^2} \frac{e^{-\frac{r_j}{a}}}{1 - e^{-\frac{r_j}{a}}} \right)$
 $\Delta r_j = r_j - r_{j-1}$, $\varepsilon = t_j - t_{j-1}$, $t' = t_0$ et $t'' = t_N$,

Les fonctions $Q_l(\theta, \varphi)$ s'expriment en fonction des harmoniques sphérique $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

Nous savons par ailleurs, que la fonction de Green relative à un propagateur nous permet d'extraire à partir de ses pôles le spectre des énergies, et les fonctions d'ondes correspondantes à partir des résidus aux pôles. Cette fonction qui n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur $K_l(r'', r'; \tau)$, est donnée par :

$$G(r'', r', E) = \frac{1}{(i\hbar)} \int e^{\frac{iE\tau}{\hbar}} K_l(r'', r'; \tau) d\tau \quad (2.4)$$

où $\tau = t'' - t'$.

Lorsque τ tend vers zéro, nous pouvons approximer $K_l(r'', r'; \tau)$ par :

$$K_l(r'', r'; \tau) = \delta(r'' - r') \quad (2.5)$$

Il en découle,

$$K_l(r'', t''; r', t') = \sum_n \chi_{l,n}(r'') \chi_{l,n}^*(r') e^{[-\frac{i}{\hbar} E_{l,n}(t'' - t')]} \quad (2.6)$$

où $\chi_{l,n}(r)$ est la fonction d'onde radiale.

Dans le but de calculer l'énergie propre relative à la fonction d'onde propre de l'état s , réécrivons l'équation (2.4) comme suit :

$$G(r'', r', E) = (i\hbar)^{-1} \int P_l(r'', r'; \tau) d\tau \quad (2.7)$$

où

$$P_l(r'', r', \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} W_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \quad (2.8)$$

avec

$$W_j = S_j + E\varepsilon \quad (2.9)$$

Ceci conduit à :

$$K_l(r'', t''; r', t') = (2\pi\hbar)^{-1} \int \int P_l(r'', r'; \tau') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_{l,n}(t'' - t') \right] dE d\tau' \quad (2.10)$$

2.3 Transformation des coordonnées d'espace et du temps

Nous introduisons souvent une transformation de coordonnées suivie d'une transformation locale du temps afin de rendre l'étude beaucoup plus accessible. Effectuons le changement de coordonnée d'espace suivant :

$$r = -a \ln \left[\frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \right] \quad (2.11)$$

ou encore

$$r = -2a \ln \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \quad (2.12)$$

avec

$$r \in [0, \infty[\text{ et } \theta \in [0, \pi[$$

ceci nous conduit à une nouvelle expression pour le potentiel (2.1) :

$$V(\theta) = -V_0 \cot^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + V_1 \cot^4\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.13)$$

avec

$$V_0 = \frac{A}{ka^2} \text{ et } V_1 = \frac{\beta(\beta - 1)}{ka^2}$$

Afin de ramener le terme énergie cinétique à sa forme standard, faisons une transformation locale du temps de la forme [8, 40] :

$$t \rightarrow s \Leftrightarrow ds = F(r)dt \quad (2.14)$$

Nous nous sommes contentés dans le développement de l'action partielle S_j , que des termes en ε et en ε^2 ; les termes d'ordre supérieur auront une contribution nulle dans le calcul de l'action finale du propagateur.

Le terme énergie cinétique étant de la forme $\frac{(\Delta r_j)^2}{\varepsilon^2}$, nous pouvons alors utiliser le résultat [35, 46, 47] ci-dessous pour le mettre sous une autre forme :

$$\begin{aligned}
& \int_0^c x^{2n} \exp \left[-\alpha_1 x^2 + \alpha_2 x^2 + \beta_1 x^4 + \beta_2 x^4 + o \left[x^6 \right] \right] dx \\
&= \int_0^c x^{2n} \exp \left[-\alpha_1 x^2 + \frac{1}{2} \alpha_2 \alpha_1^{-1} + \beta_1 x^4 + \frac{3}{4} \beta_2 \alpha_1^{-2} + o \left[\alpha_1^{-3} \right] \right] dx \quad (2.15)
\end{aligned}$$

où c est une constante positive et n un entier. Nous pouvons exploiter ce résultat en posant $\alpha_1^{-1} = \varepsilon$ et $x = \Delta r_j$.

Ainsi le terme $\beta_2 (\Delta r_j)^4$ apparaissant dans l'action discrétisée S_j se transformera en $\frac{3}{4} \beta_2 \alpha_1^{-2}$.

En posant $g(\theta) = -a \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \cos \theta) \right]$, $\bar{\theta}_j = \frac{1}{2} (\theta_j + \theta_{j-1})$ et $\Delta r_j = g(\theta_j) - g(\theta_{j-1})$, le développement en série de Taylor de Δr_j nous conduit à :

$$\Delta r_j = g'(\bar{\theta}_j) \Delta \theta_j + \frac{1}{24} g'''(\bar{\theta}_j) (\Delta \theta_j)^3 + o \left[(\Delta \theta_j)^5 \right]$$

ou encore

$$(\Delta r_j)^2 = f^2(\bar{\theta}_j) (\Delta \theta_j)^2 + \frac{1}{12} f(\bar{\theta}_j) f''(\bar{\theta}_j) (\Delta \theta_j)^4 + o \left[(\Delta \theta_j)^6 \right] \quad (2.16)$$

avec

$$f(\theta_j) = g'(\theta_j).$$

Notre transformation locale du temps s'écrit comme :

$$\varepsilon = \rho(r_j) \rho(r_{j-1}) \sigma_j \quad (2.17)$$

Cette transformation doit néanmoins vérifier la condition $\int_0^\tau dt = \int_0^\sigma \rho^2 ds$ ou encore $\tau = \rho(r') \rho(r'') \sigma$.

Nous pouvons également écrire :

$$\tilde{f}^2(\theta_j) = f(\theta_j) f(\theta_{j-1}) \quad (2.18)$$

ce qui conduit à :

$$\tilde{f}^2(\theta_j) = f^2(\bar{\theta}_j) + \frac{1}{4} \left[f(\bar{\theta}_j) f''(\bar{\theta}_j) - f'^2(\bar{\theta}_j) \right] (\Delta \theta_j)^2 + o \left[(\Delta \theta_j)^3 \right] \quad (2.19)$$

Il est commode, pour la suite des calculs, de remplacer le terme $(\Delta\theta_j)^2$ par :

$$(\Delta\theta_j)^2 = 8 \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2} (\Delta\theta_j)\right) \right] + \frac{1}{48} (\Delta\theta_j)^4 + o((\Delta\theta_j)^6). \quad (2.20)$$

En substituant (2.19) et (2.20) par leurs expressions dans (2.16), il vient,

$$(\Delta r_j)^2 = 8\tilde{f}^2(\theta_j) \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2} (\Delta\theta_j)\right) \right] + \frac{1}{48} \left[f^2(\bar{\theta}_j) + 12f'^2(\bar{\theta}_j) - 8f(\bar{\theta}_j)f''(\bar{\theta}_j) \right] (\Delta\theta_j)^4. \quad (2.21)$$

La transformation (2.11) nous conduit aux dérivées de $f(\theta)$ à différents ordres :

$$\begin{aligned} f(\theta_j) &= g'(\theta_j) = a \tan\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \\ f'(\theta_j) &= g''(\theta_j) = \frac{1}{2}a \sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \\ f''(\theta_j) &= g'''(\theta_j) = \frac{1}{2}a \tan\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \end{aligned}$$

en tenant compte du fait que : $\left[f^2(\theta_j) \right]^\sim = f(\theta_j)f(\theta_{j-1})$ et pour $l = 0$, l'action (2.9) devient :

$$\begin{aligned} W_j &= \frac{4Ma^2}{\varepsilon} \left[\tan^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}\Delta\theta_j\right) \right] \\ &+ \frac{Ma^2 \tan^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right)}{96\varepsilon} \left\{ 1 - \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + 3 \left[\csc^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \right\} (\Delta\theta_j)^4 \\ &+ V_0\varepsilon \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + E\varepsilon - V_1\varepsilon \left[\cot^4\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Nous pouvons, d'autre part, mettre le potentiel transformé (2.13) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} V(\theta_j) &= -V_0 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + V_1 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim^2 \\ &= -V_0 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + V_1 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \left[\csc^2\left(\frac{\theta_j}{2}\right) \right]^\sim - V_1 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \end{aligned} \quad (2.23)$$

La relation (2.15) nous permet en outre, de transformer le terme en $(\Delta\theta_j)^4$ comme suit :

$$-\frac{\hbar^2\varepsilon}{32Ma^2} \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \left\{ 1 - \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + 3 \left[\csc^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \right\} \quad (2.24)$$

et si nous tenons compte de la transformation locale du temps,

$$\sigma_j = \frac{1}{4}\varepsilon \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim, \quad (2.25)$$

l'action W_j devient :

$$\begin{aligned} W_j &= \left(\frac{Ma^2}{\sigma_j} \right) \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}\Delta\theta_j\right) \right] + A\sigma_j \\ &\times \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + B'\sigma_j \left[\csc^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + E'\sigma_j \end{aligned} \quad (2.26)$$

avec

$$A = 4E + \frac{\hbar^2}{8Ma^2}, B' = -\frac{3}{8Ma^2} - 4V_1, E' = 4V_0 - 4E - \frac{\hbar^2}{8Ma^2} + 4V_1,$$

Les transformations espace-temps (2.12) et (2.17) conduisent également, à une nouvelle écriture de la mesure :

$$\prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j = a^{-1} \left[\cot\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cot\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{Ma^2}{8\pi i \hbar \sigma_j} \right]^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j. \quad (2.27)$$

2.4 Calcul de l'intégrale de chemins dans S^3 :

Le but recherché à travers une transformation spatio-temporelle est le passage d'une intégrale fonctionnelle difficile à calculer à une nouvelle forme plus maniable.

L'action (2.26) est similaire à celle de Pöschel-Teller dont le groupe dynamique est $SO(3)$ [48]. Le groupe $SO(3)$ se réalise en tenant compte du fait que $S^3 = SO(4)/SO(3)$. Ces propriétés nous permettent de transformer notre intégrale de chemins à une dimension, en une intégrale de chemin dans S^3 relativement facile à calculer. Pour ce faire, nous utilisons l'expression asymptotique suivante [47]

$$\int_0^{2\pi} \exp [2ip\alpha - z(1 - \cos \alpha)] d\alpha = (2\pi/z)^{\frac{1}{2}} \exp \left[- \left(4p^2 - \frac{1}{4} \right) / (2z) \right] \quad (2.28)$$

où p est supposé entier ou demi entier. Ceci nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} & \left\{ \exp \left[\left(\frac{i}{\hbar} \right) A\sigma_j \left[\sec^2 \left(\frac{1}{2}\theta_j \right) \right] \right] \right\} \\ = & 2 \left\{ Ma^2 \left[\cos^2 \left(\frac{1}{2}\theta_j \right) \right] \right\}^{\sim} / 8\pi i \hbar \sigma_j \left. \right\}^{\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi} \exp \left[2ip\alpha_j + (iMa^2/\hbar\sigma_j) \left[\cos^2 \left(\frac{1}{2}\theta_j \right) \right] \right] (1 - \cos \alpha_j) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} & \left\{ \exp \left[\left(\frac{i}{\hbar} \right) B'\sigma_j \left[\csc^2 \left(\frac{1}{2}\theta_j \right) \right] \right] \right\} \\ = & 2 \left\{ Ma^2 \left[\sin^2 \left(\frac{1}{2}\theta_j \right) \right] \right\}^{\sim} / 8\pi i \hbar \sigma_j \left. \right\}^{\frac{1}{2}} \int_0^{2\pi} \exp \left[2iq\beta + (iMa^2/\hbar\sigma_j) \left[\sin^2 \left(\frac{1}{2}\theta_j \right) \right] \right] (1 - \cos \beta_j) \end{aligned} \quad (2.29)$$

avec

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - 2AMa^2/\hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= (-2Ma^2E/\hbar^2)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - 2B'Ma^2/\hbar^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= (\beta - 1/2) \end{aligned} \quad (2.32)$$

La solution $q = \frac{1}{2} - \beta$ a été volontairement écartée car β est un paramètre positif. En

tenant compte des résultats (2.29) et (2.30), l'expression du promotor $P_l(r'', r'; \tau)$ devient :

$$P_l(r'', r'; \tau) = 4a^{-1} \cos\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\alpha'' d\beta'' \int \prod_{j=1}^N \exp\left[\frac{i}{\hbar} \tilde{w}_j\right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{Ma^2}{8\pi i \hbar \sigma_j}\right]^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left[4 \sin\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta_j\right)\right] d\theta_j d\alpha_j d\beta_j, \quad (2.33)$$

où

$$\tilde{w}_j = \frac{Ma^2}{\sigma_j} \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}\Omega_j\right)\right] + E'\sigma_j + 2\hbar p\alpha_j + 2\hbar q\beta_j \quad (2.34)$$

et

$$\cos\left(\frac{1}{2}\Omega_j\right) = \cos\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta_{j-1}\right) \cos\alpha_j + \sin\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta_{j-1}\right) \cos\beta_j. \quad (2.35)$$

Nous sommes, par conséquent, passés d'une intégrale unidimensionnelle de chemins ayant une forme compliquée à manipuler, à une nouvelle forme d'intégrale fonctionnelle, à trois dimensions, mais moins difficile à intégrer. En exprimant les angles α_j et β_j en termes d'angles d'Euler :

$$\alpha_j = \frac{1}{2}(\Delta\Psi_j + \Delta\Phi_j), \beta_j = \frac{1}{2}(\Delta\Psi_j - \Delta\Phi_j) \quad (2.36)$$

et

$$\int_0^{2\pi} d\alpha_j \int_0^{2\pi} d\beta_j = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\Phi_j \int_{-2\pi}^{2\pi} d\Psi_j \quad (2.37)$$

en posant $\Phi' = \Psi' = 0$, la relation (2.33) devient pour $l = 0$,

$$P_0(r'', r'; \tau) = 2a^{-1} \cos\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \exp\left[\left(\frac{2i\hbar}{Ma^2}\right) (b^2 + p^2 - 1/4)\sigma\right] \int_0^{2\pi} d\Phi'' \int_{-2\pi}^{2\pi} d\Psi'' \exp[i(p-q)\Phi'' + i(p+q)\Psi''] \tilde{K}(\theta'', \Phi'', \Psi''; \theta', 0, 0; \sigma) \quad (2.38)$$

où

$$\tilde{K}(\theta'', \Phi'', \Psi''; \theta', 0, 0; \sigma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{Ma^2}{8\pi i \hbar \sigma_j} \right]^{\frac{3}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \sin \theta_j d\theta_j d\Phi_j d\Psi_j. \quad (2.39)$$

avec

$$\tilde{S}_j = \left(\frac{Ma^2}{\sigma_j} \right) \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}\Omega_j\right) \right] + \left(\frac{3\hbar^2}{8Ma^2} \right) \sigma_j. \quad (2.40)$$

et

$$b^2 = \frac{2Ma^2}{\hbar^2} (V_0 + V_1). \quad (2.41)$$

L'isomorphisme entre S^3 et $SU(2)$ [13, 50] conduit à l'intégrabilité de l'expression (2.39).

Aussi nous pouvons écrire [41] :

$$\tilde{K}(\theta'', \Phi'', \Psi''; \theta', 0, 0; \sigma) = \frac{1}{16\pi^2} \sum_J (2J+1) C_{2J}^1 \left(\cos\left(\frac{1}{2}\Omega\right) \right) \exp \left[-\frac{2i\hbar}{Ma^2} \sigma J(J+1) \right] \quad (2.42)$$

où la sommation s'effectue sur les valeurs entières et demi-entières de J .

En exprimant les polynômes de Gegenbauer $C_{2J}^1(\cos(\frac{1}{2}\Omega))$ en fonction des polynômes de Wigner [51], il vient :

$$C_{2J}^1 \left(\cos\left(\frac{1}{2}\Omega\right) \right) = (J+1/2)^{-1} \sum_{\mu, \nu=-J}^J \exp(-i\mu(\Phi'' - \Phi')) \exp(-i\nu(\Psi'' - \Psi')) \\ d_{\mu, \nu}^J(\theta') d_{\mu, \nu}^J(\theta'') \quad (2.43)$$

$$\int_0^\pi |d_{\mu, \nu}^J(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1$$

Les expressions (2.42) et (2.43) nous permettent, après sommation sur μ et ν , de mettre $P_0(r'', r', \tau)$ sous la forme suivante :

$$P_0(r'', r', \tau) = 2a^{-1} \cos\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \sum_J \exp \left[-\left(\frac{2i\hbar}{Ma^2} \right) \sigma \left(\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 + (b^2 - p^2) \right) \right] \\ \times d_{p+q, p-q}^{J*}(\theta') d_{p+q, p-q}^J(\theta'') \quad (2.44)$$

où p et q ont été définis précédemment.

Comme les polynômes de Wigner $d_{K,L}^J(\theta)$ s'annulent pour $J < \max\{|K|, |L|\}$, et sachant que la valeur minimale de J dans (2.44) est $p + \beta - \frac{1}{2}$, et que cette valeur annule la fonction $d_{K,L}^J(\theta)$, il est alors convenable d'écrire : $n = J - (p + \beta - \frac{1}{2})$.

L'expression (2.44) devient :

$$P_0(r'', r'; \tau) = 2a^{-1} \cos\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \sum_{n=1}^{\infty} \left[- \left(\frac{4i\hbar n'}{Ma^2} \right) \sigma(p - p_n) \right] \\ \times d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'+p-1/2*}(\theta') d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'+p-1/2}(\theta'') \quad (2.45)$$

$$\text{avec } P_n = \left(\frac{b^2 - n'^2}{2n'} \right) \text{ et } n' = n + \beta.$$

2.5 Spectre des énergies et fonctions d'onde :

Le calcul de $P_0(r'', r'; \tau)$ nous permet d'arriver à l'expression de la fonction de Green, qui n'est autre que la transformée de Fourier du propagateur. La détermination de cette fonction de Green, nous permet de tirer, à partir de ses pôles, tout le spectre des énergies ; ses résidus aux pôles conduisent aux fonctions d'onde correspondantes.

En substituant (2.45) dans (2.7), et en intégrant sur le paramètre temps τ , il vient,

$$G_0(r'', r'; E) = \left(\frac{4Ma}{\hbar^2} \right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \sum_{n=1}^{\infty} [2n'(p_n - p)]^{-1} \\ \times d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2}(\theta'') \quad (2.46)$$

ou encore

$$G_0(r'', r'; E) = 2a^{-1} \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n'} \frac{p + p_n}{E - E_n + i0} \\ \times d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2}(\theta'') \quad (2.47)$$

avec $p = (-2Ma^2E/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}$, $p_n = (b^2 - n'^2)/2n'$ et $n' = n + \beta$.

Les pôles de la fonction de Green (2.47) nous permettent d'extraire l'expression de l'énergie E_n .

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2} \left[\frac{(b^2 - n'^2)}{2n'} \right]^2 \quad (2.48)$$

où $b^2 = 2Ma^2(V_0 + V_1)/\hbar^2$.

Pour calculer les fonctions d'onde associées, nous substituons l'énergie par son expression dans la relation (2.10).

Nous obtenons alors,

$$K_0(r'', r'; t'', t') = (i/2ma) \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n'} \int \frac{p + p_n}{E - E_n + i0} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t'' - t')\right) dE$$

$$d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2}(\theta'') \quad (2.49)$$

l'intégration par rapport à la variable énergie E , nous permet d'arriver aux résidus aux pôles pour $E = E_n$,

$$K_0(r'', r'; t'', t') = \sum_{n=1}^{\infty} N_n^2 \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \frac{1}{n'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t'' - t')\right) d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2}(\theta'') \quad (2.50)$$

où $N_n^2 = 2p_n/an'$, $p_n = (b^2 - n'^2)/2n'$; $b^2 = 2Ma^2(V_0 + V_1)/\hbar^2$, $n' = n + \beta$, $V_0 = \frac{A}{ka^2}$ et $V_1 = \frac{\beta(\beta - 1)}{ka^2}$

en identifiant (2.50) à (2.6), nous obtenons :

$$\chi_n(r) = [2p_n/an']^{1/2} (1 - e^{-\frac{r}{a}})^{\frac{1}{2}} d_{p+\beta-\frac{1}{2}, p-\beta+\frac{1}{2}}^{n'-p+1/2} (2 \cos^{-1}(e^{-\frac{r}{2a}})) \quad (2.51)$$

Nous pouvons via la relation ci-dessous [51], exprimer $\chi_n(r)$ en terme des fonctions hypergéométriques $F(\alpha, \beta, \delta, z)$.

$$d_{m,m'}^l(\beta') = \frac{1}{2^m} \sqrt{\frac{(l+m)!(l-m)!}{(l+m')!(l-m')!}} (1-x)^{\frac{m-m'}{2}} (1+x)^{\frac{m+m'}{2}} P_{l-m}^{(m-m', m+m')}(x) \quad (2.52)$$

où $x = \cos \beta'$

et

$$P_n^{(\alpha, \beta')}(z) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! + \Gamma(\alpha + 1)} F(-n, n + \alpha + \beta' + 1, \beta' + 1, \frac{1+z}{2}) \quad (2.53)$$

$P_n^{(\alpha, \beta')}(z)$ étant le polynôme de Jacobi.

Enfin $\chi_n(r)$ devient :

$$\begin{aligned} \chi_n(r) = & [2p_n/(a(n + \beta))]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(n - 2p + 2) \Gamma(2\beta + 1)} \\ & \sqrt{\frac{\Gamma(n + 2\beta + 1) \Gamma(n - 2p + 2) \Gamma(n - 2p + 2\beta + 1)}{\Gamma(n + 2)}} (1 - e^{-\frac{r}{a}})^\beta e^{-\frac{pnr}{a}} \\ & F(-n + 2p_n - 1, n + 2p_n + 1, 2p_n + 1, e^{-\frac{r}{a}}) \end{aligned} \quad (2.54)$$

Si nous posons $k = \frac{2M}{\hbar^2}$ dans l'expression du potentiel de Bargmann, nous constatons que les expressions (2.54) et (2.48) reproduisent le spectre des énergies ainsi que les fonctions d'ondes associées obtenus par Millard [43] en étudiant le même problème dans le cadre de la mécanique quantique standard.

2.6 Cas spécial

Nous pouvons ramener le potentiel de Bargmann à celui de Hulthen [41], en posant $\beta = 0$. En effet, pour cette valeur de β , le spectre des énergies E_N ainsi que les fonctions d'onde associées relatifs au potentiel de Bargmann, se réduisent exactement à ceux du potentiel de Hulthen [41] :

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2} \left[\frac{(b^2 - n^2)}{2n} \right]^2$$

et

$$\begin{aligned} \chi_n(r) = & [2p_n/(an)]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(n - 2p + 2) \Gamma(1)} \\ & \sqrt{\frac{\Gamma(n + 1) \Gamma(n - 2p + 2) \Gamma(n - 2p + 1)}{\Gamma(n + 2)}} e^{-\frac{pnr}{a}} \\ & F(-n + 2p_n - 1, n + 2p_n + 1, 2p_n + 1, e^{-\frac{r}{a}}) \end{aligned}$$

Nous pouvons également noter, qu'il est possible de passer au potentiel de Yukawa en faisant tendre le paramètre " a " vers l'infini ($a \rightarrow \infty$) et en posant $V_0 = Ze^2/a$.

2^{ème} Partie

Chapitre 3

Nouvelle méthode d'approximation basée sur les potentiels quasi-exactement solubles

3.1 Introduction

De nombreuses méthodes de calculs ont été élaborées [52-57] dans le but de résoudre l'équation de Schrödinger relative à un système physique donné. Néanmoins, il n'est pas toujours possible de trouver une solution exacte aux problèmes où interviennent des potentiels de formes compliquées [58, 59]. Dans de pareils cas, nous faisons appel à des techniques de calcul permettant une approche plus ou moins réaliste du problème étudié [60, 61]. Nous pouvons citer parmi ces techniques, la méthode des perturbations, la méthode variationnelle et les méthodes numériques etc.... Dans la méthode des perturbations, l'Hamiltonien du système se sépare en deux parties : Une première partie prépondérante dont les fonctions d'ondes sont connues, et une interaction supplémentaire supposée faible. Lorsque le terme perturbatif devient important, cette technique devient inadéquate et la méthode variationnelle est la plus appropriée. Enfin, lorsque toutes ces méthodes deviennent inadéquates, un traitement numérique de l'équation de Schrödinger s'avère plus que nécessaire [62].

D'autres méthodes basées sur un traitement quasi-exact de l'équation de Schrödinger [63-65] s'appliquent à une grande classe de potentiels, pourvu que leurs paramètres obéissent à certaines contraintes ; ce sont les potentiels Q.E.S (quasi exactement solubles

). De nombreux travaux ont été réalisés ces dernières années [66-70] en faisant appel à cette technique.

Nous nous proposons de développer dans cette seconde partie de notre thèse, une méthode de résolution plus générale que celle des Q.E.S. L'idée de base consiste à séparer le potentiel étudié en deux parties : une première partie s'identifiant à un potentiel Q.E.S alors que la seconde sera considérée comme une perturbation.

3.2 la méthode des potentiels Q.E.S

Considérons la famille de potentiels donnée par :

$$V(r) = \sum_{n=1}^N a_{2n} r^{2n} \quad (3.1)$$

Nous pouvons considérer cette dernière comme une généralisation de potentiels anharmoniques souvent utilisés en physique. La particularité de cette famille de potentiels, réside dans le fait que son équation de Schrödinger n'admet de solutions exactes que dans le cas où certains de ses paramètres sont assujettis à des contraintes.

Partons de l'équation radiale de Schrödinger :

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \right) + \left(V(r) - E_l + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) \right] R_l(r) = 0 \quad (3.2)$$

Il est commode de poser :

$$R_l(r) = \frac{U_l(r)}{r} \quad \text{et } m = \hbar = 1$$

L'équation (3.2) se met alors, sous la forme suivante :

$$\frac{d^2}{dr^2} U_l(r) + \left(2E_l - 2V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) U_l(r) = 0 \quad (3.3)$$

Choisissons pour l'équation ci-dessus, une solution de la forme :

$$U_l(r) = A_N \exp [g_l(r)] \quad (3.4)$$

où

$$g_l(r) = \sum_{i=1}^m b_{2i} r^{2i} + \gamma \ln r \quad (3.5)$$

b_{2i} et γ sont des paramètres à déterminer.

Après une double dérivation de la fonction $U_l(r)$, nous obtenons :

$$\frac{d^2}{dr^2} U_l(r) - (g'' + g'^2) U_l(r) = 0 \quad (3.6)$$

nous pouvons également écrire :

$$\begin{aligned} (g'' + g'^2) = & -\gamma r^{-2} + \sum_{i=1}^m 2i(2i-1)b_{2i}r^{2(i-1)} + \gamma^2 r^{-2} \\ & + \sum_{i,j}^m 4ijb_{2i}b_{2j}r^{2(i+j)-2} + 4\gamma \sum_{i=1}^m ib_{2i}r^{2i-2} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Ceci conduit à :

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} U_l(r) - (-\gamma r^{-2} + \sum_{i=1}^m 2i(2i-1)b_{2i}r^{2(i-1)} + \gamma^2 r^{-2} \\ + \sum_{i,j}^m 4ijb_{2i}b_{2j}r^{2(i+j)-2} + 4\gamma \sum_{i=1}^m ib_{2i}r^{2i-2}) U_l(r) = 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

nous pouvons, après identification des équations (3.3) et (3.8), arriver aux contraintes auxquelles sont assujettis certains paramètres du potentiel de départ. L'écriture des b_{2n} en fonction des a_{2n} nous conduit à la détermination de la forme exacte de la fonction d'onde ainsi qu'à l'énergie propre correspondante. Il est à signaler que cette méthode limite le choix des paramètres du potentiel. En effet, seuls les paramètres notés a_{2nQES} nous conduisent aux solutions exactes.

3.3 Nouvelle méthode d'approximation appliquée aux potentiels centraux :

La méthode développée précédemment résoud le problème aux valeurs propres de façon partielle. En effet, le domaine de validité de cette méthode se limite à certaines valeurs des paramètres du potentiel. Afin d'étendre son champ d'application, nous séparons le potentiel central étudié comme suit :

$$V(r) = V_{QES} + W \quad (3.9)$$

où V_{QES} est un potentiel Q.E.S admettant une fonction d'onde exacte, et la partie restante W sera considérée comme une perturbation.

Ceci nous permet d'écrire l'énergie E_l relative à la valeur l du moment orbital, sous la forme suivante :

$$E_l = E_{lQES} + \Delta E_l \quad (3.10)$$

Appliquons notre technique de calcul à quelques potentiels, souvent utilisés comme modèles mathématiques dans la description de nombreux phénomènes physiques.

3.3.1 1^{er} cas : Le potentiel sextique

Ce potentiel a pour expression :

$$V_1(r) = a_2 r^2 - a_4 r^4 + a_6 r^6 \quad (3.11)$$

Il a fait l'objet de nombreuses études aussi bien au niveau quantique que dans le domaine classique ; notamment dans la description de phénomènes physiques faisant intervenir de hauts degrés d'anharmonicité du potentiel. Il a été utilisé dans l'interprétation du spectre vibrationnel des molécules [71] , et la description des phénomènes tricritiques [72, 73].

Choisissons pour l'équation (3.3) une solution de la forme :

$$U_l(r) = A_N \exp [g_l(r)] \quad (3.12)$$

avec $g_l(r) = \frac{\beta}{2}r^2 + \frac{\theta}{4}r^4 + \gamma_l \ln r$

où β, θ et γ_l sont des paramètres à déterminer.

Le remplacement de $U_l(r)$ par son expression (3.12), dans l'équation (3.3) conduit à :

$$\frac{d^2}{dr^2}U_l(r) + \left(-(2\beta\gamma_l + \beta) - \gamma_l(\gamma_l - 1)/r^2 - (3\theta + \beta^2 + 2\theta\gamma_l)r^2 - 2\beta\theta r^4 - \theta^2 r^6 \right) U_l(r) = 0 \quad (3.13)$$

en identifiant l'équation ci-dessus à celle donnée par (3.3) nous arrivons aux relations suivantes :

$$\begin{cases} l(l+1) = \gamma_l(\gamma_l - 1) \\ -\beta/2 - \beta\gamma_l = E_l \\ 2a_2 = 3\theta + \beta^2 + 2\theta\gamma_l \\ -2a_4 = 2\beta\theta \\ 2a_6 = \theta^2 \end{cases} \quad (3.14)$$

Pour que $U_l(r)$ soit réellement solution de l'équation de Schrödinger (3.3), il faut que les relations ci-dessus soient satisfaites simultanément.

De l'équation (3.14), nous tirons aisément l'expression de l'énergie :

$$E_{lQES} = -\beta [1/2 + \gamma_l] \quad (3.15)$$

où $\beta = - [2a_2 + (3 + 2(l+1)) \sqrt{2a_6}]^{1/2}$ et $\gamma_l = (l+1)$

Nous constatons que δ_l est positive; ce qui assure la régularité de la fonction d'onde à l'origine.

Dans le but d'élargir le domaine de variation des paramètres de $V_1(r)$, introduisons le paramètre a_{4QES} , qui vérifie la contrainte $a_{4QES} = \beta\sqrt{2a_6}$ obtenue à partir de la résolution du système d'équations (3.14), dans l'expression du potentiel de départ. Ceci nous permet de séparer le potentiel $V_1(r)$ comme suit :

$$V_1(r) = a_2 r^2 - a_{4QES} r^4 + a_6 r^6 - (a_4 - a_{4QES}) r^4 \quad (3.16)$$

La plus grande contribution à la valeur de l'énergie provient du terme prédominant $(a_2 r^2 - a_{4QES} r^4 + a_6 r^6)$. Il est utile de souligner qu'il est possible de choisir d'autres formes pour le potentiel $V(r)$. En effet, le choix de la forme du potentiel transformé (3.16) dépend

des paramètres du potentiel de départ (3.2) où la meilleure approximation correspond au plus petit écart ($a_{2i} - a_{2iQES}$). Les deux autres formes possibles sont :

$$V_1(r) = a_{2QES} r^2 - a_4 r^4 + a_6 r^6 + (a_2 - a_{2QES}) r^2 \quad (3.17)$$

et

$$V_1(r) = a_2 r^2 - a_4 r^4 + a_{6QES} r^6 + (a_6 - a_{6QES}) r^6. \quad (3.18)$$

Vu que l'énergie E_l s'écrit comme :

$$E_l = E_{lQES} + \Delta E_l \quad (3.19)$$

la correction en énergie, ΔE_l , qui apparaît dans l'expression de E_l est donnée par :

$$\Delta E_l = \int \Psi_l(\vec{r}) V_{int} \Psi_l^*(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.20)$$

V_{int} étant le terme perturbatif du potentiel :

$$V_{int} = [a_4 - a_{4QES}] r^4 \quad (3.21)$$

d'une manière explicite :

$$V_{int} = [a_4 - \beta\sqrt{2a_6}] r^4 \quad (3.22)$$

En utilisant la fonction d'onde d'essai $\Psi_l(r)$ donnée par (3.12), nous obtenons :

$$\Delta E_l = -4\pi A_N^2 \int_0^\infty [a_4 - a_{4QES}] r^4 e^{(\beta r^2 + \frac{\rho}{2} r^4 + 2\delta_l \ln r)} dr \quad (3.23)$$

Pour calculer l'expression (3.23), nous faisons appel au résultat suivant [74] :

$$\int_0^\infty x^{\nu-1} e^{-nx^2 - mx} dx = (2n)^{-\nu/2} \Gamma(\nu) e^{-\frac{m}{8n}} D_{-\nu} \left(\frac{m}{\sqrt{2n}} \right) \quad (3.24)$$

où les $D_\nu(x)$ sont les fonctions paraboliques cylindriques de Weber [74, 75].

L'expression (3.23) devient après intégration,

$$\begin{aligned} \Delta E_l = & - [a_4 - \beta\sqrt{2a_6}] (-\theta)^{-(5/2+\delta_l)/2} \Gamma\left(\frac{5}{2} + \delta_l\right) \exp\left(-\frac{\beta}{4\theta}\right) D_{-(5/2+\delta_l)}\left(-\frac{\beta}{\sqrt{-\theta}}\right) \\ & / (-\theta)^{-(1/2+\delta_l)/2} \Gamma\left(\frac{1}{2} + \delta_l\right) \exp\left(-\frac{\beta}{4\theta}\right) D_{-(1/2+\delta_l)}\left(-\frac{\beta}{\sqrt{-\theta}}\right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Nous avons ainsi, par cette technique, étendu le champ d'application de la méthode *Q.E.S* à toutes les valeurs des paramètres a_{2n} .

3.3.2 2^{ème} Cas : Le potentiel de Killingbeck

Le potentiel de Killingbeck s'écrit comme :

$$V_2(r) = -\frac{e}{r} + \lambda r + \omega r^2 \quad (3.26)$$

Nous pouvons rencontrer ce potentiel en physique des particules où Gupta et Khare [29] l'ont suggéré comme potentiel de confinement des quarks. Il a été également utilisé dans l'étude des atomes hydrogénéoïdes perturbés [76]. Il fait également partie de la classe des potentiels *Q.E.S*.

Il est possible de ramener le potentiel $V_2(r)$ à une forme connue. Pour cela, effectuons le changement $r = f(u)$ qui transforme l'équation radiale de Schrödinger :

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} \Psi_l(r) + \left(V_2(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \Psi_l(r) = E \Psi_l(r) \quad (3.27)$$

en

$$\frac{1}{2} \frac{f''}{f'^3} \frac{d}{du} \Psi - \frac{1}{2f'^2} \frac{d^2}{du^2} \Psi + \left(V_2(f(u)) + \frac{l(l+1)}{(f(u))^2} \right) \Psi = E \Psi \quad (3.28)$$

où f' , f'' représentent respectivement, les dérivées première et seconde de la fonction $f(u)$.

En posant $\Psi = \sqrt{f'} \Phi$, l'équation (3.28) devient,

$$\frac{d^2}{du^2} \Phi - 2(W - E f'^2) \Phi = 0 \quad (3.29)$$

$$\text{avec } W = f'^2 V_2(f(u)) + \frac{3}{8} \left(\frac{f''}{f'} \right)^2 - \frac{1}{4} \frac{f''}{f'}$$

En outre, le changement de variable :

$$r \rightarrow u^2$$

conduit à :

$$-2(W - Ef'^2) = -\frac{(4l^2 + 4l + \frac{3}{4})}{u^2} + 8e + 8Eu^2 - 8\lambda u^4 - 8\omega u^6 \quad (3.30)$$

Ces changements de variables nous ont permis de transformer le potentiel de départ en un potentiel sextique.

En Choisisant pour l'équation (3.29), une solution de la forme $\Phi_l(u) = \exp[g(u)]$ où $g(u) = -b_1u^2 - b_2u^4 + p \ln u$.

Nous obtenons,

$$\begin{aligned} -(g'' + g'^2) &= -\frac{p^2 - p}{u^2} + (4b_1p + 2b_1) - (4b_1^2 - 8b_2p - 12b_2)u^2 \\ &\quad - 16b_1b_2u^4 - 16b_2^2u^6. \end{aligned} \quad (3.31)$$

L'identification de (3.30) à (3.31), conduit à :

$$\begin{cases} p^2 - p - (4l^2 + 4l + \frac{3}{4}) = 0, \\ 8e - (4b_1p + 2b_1) = 0, \\ 4b_1^2 - 8b_2p - 12b_2 + 8E = 0, \\ 16b_1b_2 - 8\lambda = 0, \\ 16b_2^2 - 8\omega = 0. \end{cases} \quad (3.32)$$

La résolution de ce système d'équations nous donne :

$$\begin{aligned} p &= \frac{3}{2} + 2l, \\ b_1 &= \frac{e}{l+1}, \\ b_2 &= \frac{1}{2}\sqrt{2\omega}, \\ \lambda_{QES} &= \frac{e\sqrt{2\omega}}{l+1}, \end{aligned}$$

et

$$E_l = -\frac{1}{2} - \frac{7l^2\sqrt{2\omega} + 8l\sqrt{2\omega} + 3\sqrt{2\omega} + 2l^3\sqrt{2\omega} + e^2}{(l+1)^2} \quad (3.33)$$

..

L'extension du domaine d'étude aux autres valeurs de λ se fait, comme auparavant, en scindant le potentiel $V_2(r)$ en deux parties :

$$V_2(r) = V_{2QES}(r) + (\lambda - \lambda_{QES})r \quad (3.34)$$

Le premier terme de l'équation (3.34) est un potentiel QES dont les solutions ont été déterminées précédemment, alors que le second terme sera considéré comme une perturbation. Ainsi, l'énergie aura pour forme :

$$E_{2l} = E_{lQES} + \Delta E_l \quad (3.35)$$

La correction en énergie, ΔE_l , s'obtient à partir de l'équation (3.20). Nous avons calculé pour différentes valeurs des paramètres du potentiel $V_2(r)$, les énergies E_{2l} relatives à quelques valeurs du moment orbital l . Nos résultats numériques ont été consignés dans le tableau (Tab.3.2).

3.3.3 3^{ème} Cas : Le potentiel de Varshni.

Le potentiel de Varshni est donné par :

$$V_3(r) = \frac{1}{2} \left[r^2 + \frac{Ar^2}{1 + Gr^2} \right] \quad (3.36)$$

Ce potentiel a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche notamment en physique nucléaire où Varshni [29] a montré que pour un choix approprié des paramètres A et G, le potentiel $V_3(r)$ reproduit convenablement le spectre des énergies d'un noyau, obtenu dans le modèle en couches. Ces résultats s'expliquent par le fait que ce type de potentiel est supposé intermédiaire entre le potentiel oscillateur harmonique à 3 D, et celui du puits carré.

Plusieurs méthodes ont été proposées pour étudier cette famille de potentiels. M.R.M Witwit [77, 78] a utilisé la méthode des différences finies et les approximants de Padé pour le calcul de son spectre des énergies. A .K . Mitra [79] a calculé l'énergie de son

état fondamental et celles de ses deux premiers états excités via la méthode variationnelle de Rayleigh-Ritz conjuguée à l'algorithme de Givens-Householder. Roy et Roychondhury [80] ont utilisé, pour leur part, la méthode 1/N modifiée dans leur étude.

Pour des valeurs arbitraires des paramètres de $V_3(r)$, l'équation de Schrödinger n'admet pas de solutions exactes. Nous pouvons néanmoins, appliquer notre technique pour arriver à l'ensemble du spectre des énergies. Pour ce faire, développons le potentiel $V_3(r)$ comme suit :

$$V_3(r) = (A + 1)r^2 + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n-1} AG^{n-1} r^{2n} \quad (3.37)$$

ou encore :

$$V_3(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_{2n} r^{2n} \quad (3.38)$$

avec $\alpha_2 = A + 1$ et $\alpha_{2n} = (-1)^{n-1} AG^{n-1}$ pour $n \geq 2$

Nous avons remarqué que la forme du potentiel est parfaitement reproduite lorsque nous nous contentons des 5 premiers termes ($n=5$) de la série (3.38) donnant $V_3(r)$.

Nous avons appliqué le même traitement que précédemment pour arriver aux résultats escomptés (Tab.3.3).

3.4 Résultats et discussion

Nous avons calculé par notre technique, et pour différentes valeurs des paramètres des potentiels étudiés, les énergies propres pour différentes familles de potentiels. Nos résultats sont consignés avec ceux obtenus par d'autres méthodes, dans les tableaux (Tab.3.1), (Tab.3.2) et (Tab.3.3).

Nous avons constaté que pour le potentiel sextique (Tab.3.1), et pour les petites valeurs du moment l , les résultats donnés par notre méthode sont comparables à ceux obtenus numériquement. Néanmoins, lorsque l augmente, nos résultats s'écartent sensiblement des résultats exacts sans que l'erreur relative ne dépasse 10 %.

Pour le potentiel de Killingbeck, les valeurs des énergies calculées par notre méthode (Tab.3.2) sont en accord avec celles calculées via la méthode numérique.

Enfin, pour le potentiel de Varshni, les résultats auxquels nous avons aboutis (Tab.3.3)

sont en parfaite adéquation avec ceux extraits numériquement. Vu la qualité des résultats donnés par notre technique de calcul, nous pouvons affirmer que cette dernière constitue une alternative valable aux autres méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger.

a_2	a_4	a_6	l	E_l	$E_{num.}$
0.55	5.10^{-3}	5.10^{-4}	0	1.5769	1.5623
			1	2.6417	2.5991
			2	3.7229	3.6365
			3	4.8233	4.6766
			4	5.9451	5.7216
1	0.05	5.10^{-3}	0	2.1161	2.0480
			1	3.5619	3.3783
			2	5.0505	4.6919
			3	6.5884	6.0165
			4	8.1709	7.3466
5.5	0.5	0.05	0	4.8975	4.8156
			1	8.1621	7.9182
			2	11.4525	10.9496
			3	14.7832	13.9158
			4	18.1643	16.8280
2	0.05	5.10^{-4}	0	2.9598	2.9538
			1	4.9113	4.8878
			2	6.8488	6.7963
			3	8.7748	8.6772
			4	10.6917	10.5296
0.51	5.10^{-4}	5.10^{-5}	0	1.5155	1.5142
			1	2.5281	2.5224
			2	3.5434	3.5313
			3	4.5625	4.5404
			4	5.5858	5.5502

Tab. 3.1 : Energies E_l relatives au potentiel (3.11) pour différentes valeurs des paramètres a_{2n} .

- E_l : L'énergie calculée par notre méthode.
- $E_{num.}$: L'énergie calculée numériquement.

l	λ	ω	E_l	$E_{num.}$
0	0.3	0.2	0.14583	0.1467
1	0.3	0.2	1.4362	1.4308
2	0.3	0.2	2.1580	2.3374
3	0.3	0.2	3.0333	3.1517
0	0.4	1.2	0.9950	1.0330
1	0.4	1.2	3.3669	3.3432
2	0.4	1.2	5.2327	5.2088
3	0.4	1.2	6.9560	6.9602
0	0.4	10	5.9025	6.0121
1	4	10	12.4683	12.2059
2	4	10	17.8449	17.6183
3	4	10	22.8797	22.7829

TAB. 3.2 – Energies E_l relatives au potentiel (3.26) pour différentes valeurs des paramètres avec $e=1$.

A	l	E_l	$E_{num.}$
0.2	0	1.6408	1.6407
	1	2.7329	2.7315
	2	3.8245	3.8214
	3	4.9155	4.9098
0.6	0	1.8914	1.8913
	1	3.1493	3.1462
	2	4.4052	4.3985
	3	5.6598	5.6472
1.0	0	2.1133	2.1130
	1	3.5179	3.5140
	2	4.9198	4.9112
	3	6.3197	6.3037
5	0	3.6601	3.6608
	1	6.0918	6.0874
	2	8.5179	8.5080
	3	10.9389	10.9203
10	0	4.9591	4.9614
	1	8.2556	8.2519
	2	11.5152	11.5370
	3	14.8228	14.8127

TAB. 3.3 – Energies E_l relatives au potentiel (3.36) pour différentes valeurs du paramètre A et avec $G=0.01$.

Conclusion

Conclusion

Cette thèse avait deux objectifs :

Le premier étant la détermination, dans le cadre du formalisme de Feynman, du spectre des énergies exactes ainsi que les fonctions d'onde des états "s" pour le potentiel de Bargmann. Pour traiter ce potentiel, nous avons divisé notre propagateur en deux parties l'une radiale et l'autre angulaire. Nous avons ensuite, effectué une transformation de coordonnées suivie d'une transformation du temps afin d'arriver à une expression transformée du potentiel de Bargmann, mais difficile à manipuler. Nous avons pu, en utilisant la théorie des groupes, ramener notre intégrale de chemins à une dimension, en une intégrale de chemin à trois dimensions moins difficile à calculer. Ainsi, nous avons abouti à une forme relativement simple de la fonction de Green, où les pôles de cette dernière nous conduisent aux énergies pour différentes valeurs de n . Les fonctions d'onde correspondantes ont été extraites à partir des résidus aux pôles. Nos résultats sont en parfaite adéquation avec ceux donnés par la mécanique quantique standard. Nous avons montré, en outre, que pour $\beta = 0$ le potentiel de Bargmann se ramène à celui de Hulthen. Les résultats obtenus pour ce potentiel, concordent parfaitement avec ceux publiés dans la littérature [41].

Il est intéressant de noter qu'il est possible en faisant tendre le paramètre " a " vers l'infini ($a \rightarrow \infty$) et en posant $V_0 = Ze^2/a$, de passer du potentiel de Hulthen à celui de Yukawa.

Le second travail effectué dans cette thèse, avait pour but l'élaboration d'une nouvelle méthode d'approximation basée sur les potentiel quasi exactement solubles. En effet, l'écriture d'un potentiel comme la somme d'un potentiel QES et d'un terme perturbatif, a conduit à des résultats très satisfaisants. Pour le premier cas, nos résultats sont comparables aux énergies calculées numériquement pour les petites valeurs du moment l . Néanmoins quand l augmente, nos résultats s'écartent sensiblement des résultats exacts. Pour le potentiel de Killingbeck, l'accord entre nos énergies et celles données par la mé-

thode numérique, est très satisfaisant. De même, les résultats obtenus pour le potentiel de Varshni concordent parfaitement avec ceux calculés numériquement.

Au vu, de l'importance des résultats obtenus, nous pouvons affirmer que cette méthode constitue une sérieuse alternative aux autres méthodes d'approximation.

Nous comptons dans un avenir proche, étendre une méthode d'approximation, dite de Feynman-Kleinert corrigée, au calcul de l'énergie de l'état fondamental d'un potentiel complexe à symétrie PT. La famille de potentiels qui sera étudiée contient divers ordre d'anharmonicité, ce qui lui permet d'englober plusieurs cas de potentiels phénoménologiques utilisés en physique.

Bibliographie

- [1] Colin Ronam, Histoire mondiale des sciences, (*Edition du Seuil*, 1988).
- [2] D. Stauffer, H.E. Stanley, A. Lesne, Cours de Physique de Newton à Mandelbrot (*Springer*,1999).
- [3] P. A. Martin, Une initiation à l'intégrale fonctionnelle en physique quantique et statistique (*Presse polytechnique*, 1996).
- [4] J. Schwinger, Quantum Electrodynamics, p312 (*Dover*, New York, 1985).
- [5] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20** (1948) 367.
- [6] R. P. Feynman and Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (*Mc Graw – Hill*, 1965).
- [7] C. Groshe, *Phys. Lett.* **A 182** (1993) 28.
- [8] D. C. Khandekar, S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, Path integral Methods and Their Applications (*World Sientific*, Singapore, 1986).
- [9] C. Itzykson and J. B. Zuber, Quantum Field Theory (*Mc Graw – Hill*, 1985).
- [10] I. H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett.* **B 84** (1979) 185.
- [11] A. Chouchaoui, L. Chetouani and T. F. Hamann, *Fortschr. Phys.* **41** (1993)3, 201.
- [12] G. Tanner, P. Scherer, E. B. Bogomonly, E. Eckhardt and D. Wintgen, *Phys. Rev.Lett.* **67**(1991)2410.
- [13] A. Inomata, H. Kuratsuji and C. C. Gerry, Path Integrals and coherent states of $SU(2)$ and $SU(1,1)$ (*World Sientific*, Singapore, 1986).
- [14] C. Groshe, *J. Phys. A : Math. Gen.* **28** (1995) 5889.
- [15] Avaro De Souza Dutra, *Phys. Rev.* **A 47**, N°4 (1993).
- [16] I. H. Duru and H. Kleinert, *Fortschr. Phys.* **30** (1982)401.

-
- [17] N.K. Pak and I.sokmen ; *Phys. lett.* **A103**(1984)298.
- [18] C. Groshe, *J. Phys. A : Math. Gen.* **22** (1989) 5073.
- [19] H. Kleinert , Path integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets (*World scientific*, Singapore, 2004).
- [20] R. P. Feynman and H. Kleinert , *Phys. Rev.* **A 34** (1986) 5080.
- [21] M. Bachman, H. Kleinert and A. Pelster, *Phys. Rev*, **A V60 N°5** (1999) 3429.
- [22] A. P. Hantot, *Phys. Lett.* **A 38** (1972) 305.
- [23] G.P. Flessas, *Phys. Lett.* **A 72** (1979) 289.
- [24] R. Adhsikari, R. Dutt and Y.P Varshni, *J. Math. Phys.* **32** (1991) 447.
- [25] Y. P. Varshni, *Phys. Lett.* **A 183** (1993) 9.
- [26] C. F. De Souza and A. De Souza, *Phys. Lett.* **A 123** (1987) 297.
- [27] A. De Souza, *Phys. Lett.* **A 131** (1988) 319.
- [28] S. Coleman, Aspects of symmetry, Selected Erice lecture, p234, (*Cambridge University Press*,1988).
- [29] Y.P. Varshni, *Phys. Rev.* **A 36** (1987) 3009.
- [30] S. N. Biswas, K. Datta, R. P. Saxena, P.K. Srivastava and V.S Varma, *J. Math. Phys.* **14** (1973) 1190.
- [31] S. N. Biswas, G. P. Malik and E. C. G. Sudarshan, *Phys. Rev*, **D 7** (1973) 2884.
- [32] N. G. Meyer and J. H. D. Jensen, Elementary theory of Nuclear Shell Structure Wiley (*Wiley, NewYork*,1955).
- [33] H. Rider. Quantum Field Theory (*Cambridge University Press*, 1988).
- [34] R. A. M. Dirac, The Principles of quantum Mechanics (*Oxford University Press*, Oxford, 1958).
- [35] L. S. Schulman, Technics and applications of path integrals (*Wiley*, New York,1981).
- [36] A. Chouchaoui, L. Chetouani, T.F Hamann, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 4.
- [37] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products (*Academic Press*, New York, 1980).
- [38] M.A. Shifman, int. *J. Mod. Phys.* **A 4** (1989) 2897.

- [39] R. Dutt, A. Khare and Y. P. Varshni, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28** (1995) L 107.
- [40] C. Grosche, F. Steiner, Handbook of Feynman Path integrals (*Springer*, 1998).
- [41] J. Cai, P. Cai and A. Inomata, *Phys. Rev.* **A 34** N°6(1986) 4621.
- [42] L. Chetouani, A. Chouchaoui, T. F. Hamann, *J. Math. Phys.* **31** (1990) 983.
- [43] Millard F. Manning, *Phys. Rev.* **44** (1933) 951 .
- [44] L. Chetouani, L. Guechi, M. Letlout and T. F. Hamann, *Nuovo Cimento* **B 105** (1990)387.
- [45] P. Y. Cai, A. Inomata and R. Wilson, *Phys. Rev. Lett.*, **A 96** (1983) 117.
- [46] A. Inomata and M. A. Kayed, *Phys. Lett.* **A 108**(1985)9.
- [47] A. Inomata and M. A. Kayed, *J. Phys.* **A18** (1985) L235.
- [48] A. Frank and K. B. Woff, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984)1735.
- [49] Junker. G, Inomata A, Path Integrals on S^3 and its applications to the Rosen-Morse Oscillator, Path integrals From mev to Mev (*World Scientific* 1989).
- [50] N. J. Vilinkin, Special Functions and the theory of group representation (*American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1968*)p 130.
- [51] A. Nikiforov, V. Ouvarov, Fonctions speciales de la physique Mathématique (Mir, 1977) p321.
- [52] M. F. Manning, *Phys. Rev.* **48** (1935) 161.
- [53] P. M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics (*Mc Graw – Hill*, 1953).
- [54] I. I. Goldman and V.D. Krinchikov, Problems in Quantum Mechanics (*Pergamon, Mc London, 1961*).
- [55] A. Bhattacharjie and E. C. G. Sudarshan, *Nuovo cimento* **25** (1962) 864.
- [56] S. Flügge, Partial Quantum Mechanics (*Springer*, Berlin 1971).
- [57] C. L. Yang, *Jour. Phys.* **A 18** (1985) 2531.
- [58] D. Amin, *Phys. Today* 35 (1982) 35; *Phys. Rev. Lett.* 36 (1976) 323.
- [59] S. Coleman, in : Aspects of Symmetry, Selected Erice Lectures (*Cambridge University Press, Cambridge, 1988*) p. 234.
- [60] J.D. Cramer and J. R. Nix , *Phys. Rev.* **C 2** (1970) 1048.

-
- [61] R.C. Sharma, J.N. Leboeuf, *Phys. Rev.* **C 6** (1976) 2340.
- [62] K. Datta, A. Rampal, *Phys. Rev.* **D 23** (1981) 2875.
- [63] G. P. Flessas, *Phys. Lett.* **A 81** (1981) 17.
- [64] R. S. Kaushal, *Phys. Lett.* **A 142** (1979) 57.
- [65] L. Chetouani, A. Chouchaoui, T. F. Hamann, *Fortschr. Phys.* **41** (1993) 209.
- [66] A. P. Hantot, *Phys. Lett.* **A 38** (1972) 305.
- [67] G.P. Flessas, *Phys. Lett.* **A 72** (1979) 289.
- [68] R. Adhsikari, R. Dutt and Y.P Varshni, *J. Math. Phys.* **32** (1991) 447.
- [69] Y. P. Varshni, *Phys. Lett.* **A 183** (1993) 9.
- [70] C. F. De Souza and A. De Souza, *Phys. Lett.* **A 123** (1987) 297.
- [71] D.G. Lister, J.N. MacDonald, N.L. Owen, Internal Rotation and Inversion (*Academic Press*, New York, 1978).
- [72] M.E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **46** (1974) 597.
- [73] C.A. Aragao de Carvalho, *Nucl. Phys.* **B 119** (1977) 401.
- [74] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products (*Academic Press*, New York, 1980).
- [75] M. Abramowitz, I.A. Stegun (Eds.), Handbook of Mathematical Functions (*Dover*, New York, 1972).
- [76] J. Killingbeck, *Phys. Lett.* **A 67** (1978) 13.
- [77] M.R.M. Witwit, *J. Phys.* **A 25** (1992) 503.
- [78] M.R.M. Witwit, *J. Phys.* **A 24** (1991) 5291.
- [79] A. K. Mitra, *J. Math. Phys.* **19** (1978) 2018.
- [80] R. Roy and R. Roychoudhury, *Z. Natur. Forch. Phys.* **43** (1988) 360.



ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE @ DIRECT®

Annals of Physics 317 (2005) 354–365

ANNALS
of
PHYSICS

www.elsevier.com/locate/aop

Feynman integral treatment of the Bargmann potential

A. Diaf^a, A. Chouchaoui^{a,*}, R.J. Lombard^b

^a *Laboratoire de physique théorique, USTHB, BP 32 El-Alia, 16111 Bab Ezzouar, Alger, Algeria*

^b *Groupe de physique théorique, Institut de physique nucléaire, Orsay Cedex 91406, France*

Received 9 November 2004; accepted 23 November 2004

Available online 21 January 2005

Abstract

A method based on path integral formulation is given for obtaining exact solution of the s states for the Bargmann potential

$$V(r) = \frac{1}{ka^2} \left[\frac{\beta(\beta - 1)e^{-2r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2} - \frac{Ae^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} \right],$$

where β and k are parameters. The exact energy spectrum and the normalised s -state eigenfunctions are obtained from the poles of the Green function and their residues, respectively. The results are compared with their of Schrödinger formalism, special cases are also discussed. © 2004 Elsevier Inc. All rights reserved.

PACS: 03.65.ca; 03.65-w

Keywords: Path integrals; Bergmann potential

1. Introduction

During the last decades, several studies were aimed to the search in non-relativistic quantum mechanics of exact solutions of the Schrödinger equation with

* Corresponding author. Fax: +2132124 73 44.

E-mail address: akchouchaoui@yahoo.fr (A. Chouchaoui).

complicated potentials. The interest of such works arises from the fact that such exact solutions will serve as starting point to improve as much perturbative methods as non-perturbative approaches used for phenomenological potentials encountered in various domains of Physics [1,2].

Besides the Schrödinger formalism, the application of path integral method in non-relativistic quantum mechanics allows us to study in a satisfactory way the problems of the free particle, the harmonic oscillator, etc. [3]. However, this last formalism has met serious difficulties in the case of the hydrogen atom. It is only after several years that these difficulties have been resolved by the introduction of the time–space transformation of Duru–Kleinert [4,5]. Since that, numerous potentials have been studied exactly [6–8].

Our work has for goal the determination, within the Feynman integral method, of the energy spectrum and wave functions of the Bargmann potential. This last is given by:

$$V(r) = \frac{1}{ka^2} \left[\frac{\beta(\beta - 1)e^{-2r/a}}{(1 - e^{-r/a})^2} - \frac{Ae^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} \right], \tag{1}$$

where k , a , and β are parameters.

This potential is used for the description of di-atomic molecular vibrations, and it constitutes a convenient model for other physical situations. Its spectra have already been calculated via the Schrödinger formalism [9].

2. The path integral for the Bargmann potential

The Bargmann potential being central, it is possible to separate its path integral into two parts: the first is radial, the other one is angular. The polar coordinates seem to be the best suitable ones in this problem. Several similar cases have been treated [10,11] by diverse techniques, such as the Hulthen potential, in which case Cai et al. [7] have converted the radial path integral for $l=0$, into an angular in S^3 , where the angular variables describe a group field of the dynamic symmetry. The results already obtained for this potential will serve in the discussion of our results. Indeed, we can go from the Bargmann potential to the Hulthen potential by setting $\beta = 1$.

The propagator related to the Bargmann potential, between two time–space points (r', t') and (r'', t'') is written [4]:

$$K(r'', t''; r', t') = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(r'r'')^{-1} k_l(r'', t''; r', t') Q_l(\theta, \varphi), \tag{2}$$

where

$$K_l(r'', t''; r', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \epsilon} \right]^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j, \tag{3}$$

where

$$S_j = \frac{M}{2\varepsilon} (\Delta r_j)^2 + \frac{l(l+1)}{2Mr_j r_{j-1}} \varepsilon + \varepsilon \left(V_0 \frac{e^{-2r_j/a}}{(1 - e^{-r_j/a})^2} - V_1 \frac{e^{-r_j/a}}{1 - e^{-r_j/a}} \right),$$

$\Delta r_j = r_j - r_{j-1}$, $\varepsilon = t_j - t_{j-1}$, $t' = t_0$, and $t'' = t_N$.

On the other hand, we know that the green function related to a propagator allows us to get the energy spectrum from its poles, and the corresponding wave functions from the Fourier transform of the propagator $K_l(r'', r'; \tau)$ in the following way:

$$G(r'', r', E) = \frac{1}{(i\hbar)} \int e^{iE\tau/\hbar} K_l(r'', r'; \tau) d\tau, \tag{4}$$

where $\tau = t'' - t'$.

Taking into account the condition

$$K_l(r'', r'; \tau) = \delta(r'' - r') \tag{5}$$

it follows,

$$K_l(r'', t''; r', t') = \sum_n \chi_{ln}^*(r'') \chi_{ln}(r') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_{l,n} (t'' - t') \right], \tag{6}$$

where $\chi_n(r)$ is the radial wave function.

To calculate the energy eigenvalue corresponding to the eigen function of the s state, we rewrite (4):

$$G(r'', r', E) = (i\hbar)^{-1} \int P_l(r'', r'; \tau) d\tau, \tag{7}$$

where

$$P_l(r'', r', \tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} W_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right]^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j \tag{8}$$

with

$$W_j = S_j + E\varepsilon. \tag{9}$$

This leads to:

$$K_l(r'', r', \tau) = (2\pi\hbar)^{-1} \iint P_l(r'', r'; \tau) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_{l,n} (t'' - t') \right] dE d\tau. \tag{10}$$

3. Space–time coordinate transformation

We often introduce a local time transformation followed by a coordinate transformation, in order to reach the expression of the searched Green function.

The local time transformation is Given by [4,6]:

$$t \rightarrow s \iff ds = F(r) dt. \tag{11}$$

We carry out also the following space coordinate change:

$$r = -a \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \cos \theta) \right] \tag{12}$$

or

$$r = -2a \ln \left[\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] \tag{13}$$

with

$$r \in [0, \infty] \quad \text{and} \quad \theta \in [0, \pi]$$

which leads to a new expression for the potential:

$$V(r) = -V_0 \cot^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) + V_1 \cot^4 \left(\frac{\theta}{2} \right), \tag{14}$$

where

$$V_0 = \frac{A}{ka^2}, \quad V_1 = \frac{\beta(\beta - 1)}{ka^2}$$

we have only retained terms proportional to ε and ε^2 in the series expansion of the discretised action S_j . The other terms will have no contribution to the final calculation of the propagator.

The kinetic energy term being of the form $(\Delta r_j)^2/\varepsilon^2$, we can then use the result [12–14] given below to transform the part where this very term appears

$$\begin{aligned} & \int_0^c x^{2n} \exp[-\alpha_1 x^2 + \alpha_2 x^2 + \beta_1 x^4 + \beta_2 x^4 + o[x^6]] dx \\ &= \int_0^c x^{2n} \exp \left[-\alpha_1 x^2 + \frac{1}{2} \alpha_2 \alpha_1^{-1} + \beta_1 x^4 + \frac{3}{4} \beta_2 \alpha_1^{-2} + o[\alpha_1^{-3}] \right] dx \end{aligned} \tag{15}$$

c is a positive constant and n is an integer. We can use this result by setting $\alpha = \varepsilon$ and $x = \Delta r_j$.

Thus the term $\beta_2(\Delta r_j)^4$ appearing in the discretised action S_j transform into $\frac{3}{4}\beta_2\alpha_1^{-2}$.

By setting $g(\theta) = -a \ln[\frac{1}{2}(1 + \cos \theta)]$, $\bar{\theta}_j = \frac{1}{2}(\theta_j + \theta_{j-1})$, and $\Delta r_j = g(\theta_j) - g(\theta_{j-1})$. The Taylor series expansion of Δr_j leads to:

$$\Delta r_j = g'(\bar{\theta}_j)\Delta\theta_j + \frac{1}{24}g'''(\bar{\theta}_j)^3 + o[(\Delta\theta_j)^5]$$

or

$$(\Delta r_j)^2 = f^2(\bar{\theta}_j)(\Delta\theta_j)^2 + \frac{1}{12}f(\bar{\theta})f''(\theta)(\Delta\theta_j)^4 + o[(\Delta\theta_j)^6] \tag{16}$$

with

$$f(\theta_j) = g'(\theta_j).$$

To put the kinetic energy term in the standard form, it is necessary to introduce the local time transformation defined by:

$$\varepsilon = \rho(r_j)\rho(r_{j-1})\sigma_j. \tag{17}$$

This transformation must necessarily satisfy the condition $\int_0^c dt = \int_0^\sigma ds$ or $\tau = \rho(r')\rho(r'')\sigma$.

We can also set:

$$\tilde{f}^2(\theta_j) = f(\theta_j)f(\theta_{j-1}). \tag{18}$$

Explicitly,

$$\tilde{f}^2(\theta_j) = f^2(\bar{\theta}_j) + \frac{1}{4}[f(\bar{\theta}_j)f''(\bar{\theta}_j) - f^2(\bar{\theta}_j)](\Delta\bar{\theta}_j)^2 + o[(\Delta\theta_j)^3]. \tag{19}$$

We could check later that it is convenient to replace the term $(\Delta\theta)^2$ by:

$$(\Delta\theta_j)^2 = 8 \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}(\Delta\theta_j)\right) + \frac{1}{48}(\Delta\theta_j)^4 + o((\Delta\theta_j)^6) \right]. \tag{20}$$

By substituting (19) and (20) by their expressions in (15), we get

$$(\Delta r_j)^2 = 8\tilde{f}^2(\theta_j) \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}(\Delta\theta_j)\right) \right] + \frac{1}{48}[f^2(\bar{\theta}_j) + 12f'^2(\bar{\theta}_j) - 8f(\bar{\theta}_j)f''(\bar{\theta}_j)](\Delta\theta_j)^4. \tag{21}$$

On the other hand, the transformation (12) allows us to write the expression of the derivatives of $f(\theta)$ at different orders:

$$f(\theta_j) = g'(\theta_j) = a \tan\left(\frac{1}{2}\theta_j\right),$$

$$f'(\theta_j) = g''(\theta_j) = \frac{1}{2}a \sec\left(\frac{1}{2}\theta_j\right),$$

$$f''(\theta_j) = g'''(\theta_j) = \frac{1}{2}a \tan\left(\frac{1}{2}\theta_j\right)\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right)$$

by taking into account: $[f^2(\theta)]^\sim = f(\theta_j)f(\theta_{j-1})$ and for $l = 0$, the action (9) becomes:

$$\begin{aligned} W_j = & 4Ma^2 \left[\tan^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}\Delta\theta_j\right) \right] \\ & + \frac{Ma^2 \tan^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right)}{96\epsilon} \left\{ 1 - \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + 3 \left[\csc^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \right\} (\Delta\theta_j)^4 \\ & + V_0\epsilon \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + E\epsilon + V_1\epsilon \left[\cot^4\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim. \end{aligned} \tag{22}$$

We can also write the transformed potential (14) as:

$$\begin{aligned} V(r_j) = & -V_0 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + V_1 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim{}^2 \\ = & -V_0 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + V_1 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \csc^2\left(\frac{\theta_j}{2}\right)^\sim \\ & - V_1 \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]. \end{aligned} \tag{23}$$

The relation (15) allows us to replace the term $(\Delta\theta_j)^4$ by:

$$-\frac{\hbar^2\epsilon}{32Ma^2} \left[\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \left\{ 1 - \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim + 3 \left[\csc^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right) \right]^\sim \right\}. \tag{24}$$

Moreover, the local time transformation allows us to write

$$\sigma_j = \frac{1}{4}\varepsilon[\cot^2(\frac{1}{2}\theta_j)]^\sim. \tag{25}$$

The action W_j becomes then,

$$W_j = \left(\frac{Ma^2}{\sigma_j}\right) \left[1 - \cos\left(\frac{1}{2}\Delta\theta_j\right)\right] + A\sigma_j \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\Delta\theta_j\right)\right]^\sim + B'\sigma_j \left[\csc^2\left(\frac{1}{2}\theta_j\right)\right]^\sim + E'\sigma_j \tag{26}$$

with

$$A = 4E + \frac{\hbar^2}{8Ma^2}, \quad B' = -\frac{3}{8Ma^2} - 4V_1, \quad E' = 4V_0 - 4E - \frac{\hbar^2}{8Ma^2} + 4V_1.$$

The space–time transformation (11) and (12) allows us in addition to write the measure in the following way:

$$\prod_{j=1}^N \left[\frac{M}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right]^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} dr_j = a^{-1} \left[\cot\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cot\left(\frac{1}{2}\theta''\right)\right]^{1/2} \left[\frac{Ma^2}{8\pi i\hbar\sigma_j}\right]^{1/2} \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j. \tag{27}$$

4. Group theoretical derivation of the path integral

Through the time–space transformation, the aim is to transform an integral difficult to calculate into a simpler for more tractable.

The action (26) is similar to the Pöschl–Teller one, for which the dynamical group is $SO(3)$ [15].

This group can be obtained by considering that $S^3 = SO(4)/SO(3)$. These proprieties allow us to transform the one dimensional path integral into a path integral in S^3 , which can be calculated in a relatively easy way. To achieve this, we use the following asymptotic expression [13]:

$$\int_0^{2\pi} \exp[2ip\alpha - z(1 - \cos \alpha)] d\alpha = (2\pi/z)^{1/2} \exp\left[-\left(4p^2 - \frac{1}{4}\right) / (2z)\right], \tag{28}$$

where p is assumed integer or half integer. It allows us to write:

$$\begin{aligned} & \left\{ \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right)A\sigma_j \left[\sec^2\left(\frac{1}{2}\theta\right)\right]^\sim\right] \right\} \\ & = 2 \left\{ Ma^2 \left[\cos^2\left(\frac{1}{2}\theta\right)\right]^\sim / 8\pi i\hbar\sigma_j \right\}^{1/2} \\ & \quad \times \int_0^{2\pi} \exp\left[2ip\alpha + (iMa^2/\hbar\sigma_j) \left[\cos^2\left(\frac{1}{2}\theta\right)\right]^\sim (1 - \cos \alpha)\right] d\alpha \end{aligned} \tag{29}$$

and

$$\begin{aligned} & \left\{ \exp \left[\left(\frac{i}{\hbar} \right) B' \sigma_j \left[\csc^2 \left(\frac{1}{2} \theta \right) \right] \right] \right\} \\ &= 2 \left\{ Ma^2 \left[\sin^2 \left(\frac{1}{2} \theta \right) \right] \right\}^{\frac{1}{2}} / 8\pi i \hbar \sigma_j \\ & \times \int_0^{2\pi} \exp \left[2iq\beta + (iMa^2/\hbar\sigma_j) \left[\sin^2 \left(\frac{1}{2} \theta \right) \right] \right] (1 - \cos \beta) d\beta \end{aligned} \tag{30}$$

with

$$p = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - 2AMa^2/\hbar^2 \right)^{1/2} = (-2Ma^2E/\hbar^2)^{1/2}, \tag{31}$$

$$q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - 2B'Ma^2/\hbar^2 \right)^{1/2} = (\beta - 1/2). \tag{32}$$

The solution $q = \frac{1}{2} - \beta$ is voluntarily withdrawn, since β is a positif parameter. Taking into account (29) and (30), the promotor expression $P_l(r'', r'; \tau)$ becomes

$$\begin{aligned} P_l(r'', r'; \tau) &= 4a^{-1} \cos \left(\frac{1}{2} \theta'' \right) \cos \left(\frac{1}{2} \theta'' \right) \\ & \times \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\alpha'' d\beta'' \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{w}_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{Ma^2}{8\pi i \hbar \sigma_j} \right]^{3/2} \\ & \times \prod_{j=1}^{N-1} \left[4 \sin \left(\frac{1}{2} \theta_j \right) \cos \left(\frac{1}{2} \theta_j \right) \right] d\theta_j d\alpha_j d\beta_j \end{aligned} \tag{33}$$

with

$$\tilde{w}_j = \frac{Ma^2}{\sigma_j} \left[1 - \cos \left(\frac{1}{2} \Omega_j \right) \right] + E' \sigma_j + 2\hbar p \alpha_j + 2\hbar q \beta_j \tag{34}$$

and

$$\cos \left(\frac{1}{2} \Omega_j \right) = \cos \left(\frac{1}{2} \theta_j \right) \cos \left(\frac{1}{2} \theta_{j-1} \right) \cos \alpha_j + \sin \left(\frac{1}{2} \theta_j \right) \sin \left(\frac{1}{2} \theta_{j-1} \right) \cos \beta_j. \tag{35}$$

Consequently, we have transformed a one dimensional complicated path integral into a three dimensional functional integral relatively easy to handle.

Furthermore we can express the angles α_j and β_j in terms of the Euler angles

$$\alpha_j = \frac{1}{2} (\Delta \Psi_j + \Delta \Phi_j), \quad \beta_j = \frac{1}{2} (\Delta \Psi_j - \Delta \Phi_j) \tag{36}$$

and

$$\int_0^{2\pi} d\alpha_j \int_0^{2\pi} d\beta_j = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\Phi_j \int_{-2\pi}^{2\pi} d\Psi_j \tag{37}$$

setting $\Phi' = \Psi' = 0$, the relationship (33) becomes for $l = 0$,

$$\begin{aligned} P_0(r'', r'; \tau) &= 2a^{-1} \cos \left(\frac{1}{2} \theta'' \right) \cos \left(\frac{1}{2} \theta'' \right) \exp \left[\left(\frac{2i\hbar}{Ma^2} \right) (b^2 + p^2 - 1/4) \sigma \right] \\ & \times \int_0^{2\pi} d\Phi'' \int_{-2\pi}^{2\pi} d\Psi'' \exp [i(p - q)\Phi'' + i(p + q)\Psi''] \\ & \times \tilde{K}(\theta'', \Phi'', \Psi''; \theta', 0, 0; \sigma), \end{aligned} \tag{38}$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{K}(\theta'', \Phi'', \Psi''; \theta'0, 0; \sigma) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^N \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{S}_j \right] \prod_{j=1}^N \left[\frac{Ma^2}{8\pi i \hbar \sigma_j} \right]^{3/2} \\ &\times \prod_{j=1}^{N-1} \sin \theta_j d\theta_j d\Phi_j d\Psi_j \end{aligned} \tag{39}$$

with

$$\tilde{S}_j = \left(\frac{Ma^2}{\sigma_j} \right) \left[1 - \cos \left(\frac{1}{2} \Omega_j \right) \right] + \left(\frac{3\hbar^2}{8Ma^2} \right) \sigma_j \tag{40}$$

and

$$b^2 = \frac{2Ma^2}{\hbar^2} (V_0 + V_1). \tag{41}$$

The isomorphism between S^3 and $SU(2)$ [16,17] leads to integrability of the expression (39). Thus we can write [7]:

$$\tilde{K}(\theta'', \Phi'', \Psi''; \theta', 0, 0; \sigma) = \frac{1}{16\pi^2} \sum_j (2J+1) C_{2J}^1 \left(\cos \left(\frac{1}{2} \Omega \right) \right) \exp \left[-\frac{2i\hbar}{Ma^2} \sigma J(J+1) \right], \tag{42}$$

where the sum extend on the integer and half integer values of J . Expressing the Gegenbauer polynomials $C_{2J}^1(\cos(\frac{1}{2}\Omega))$ as a function of the Wigner polynomials [18], we get:

$$\begin{aligned} C_{2J}^1 \left(\cos \left(\frac{1}{2} \Omega \right) \right) &= (J+1/2)^{-1} \sum_{\mu, \nu=-J}^J \exp(-i\mu(\Phi'' - \Phi')) \\ &\times \exp(-i\nu(\Psi'' - \Psi')) d_{\mu, \nu}^J(\theta') d_{\mu, \nu}^J(\theta'') \end{aligned} \tag{43}$$

$$\int_0^\pi |d_{\mu, \nu}^J(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1.$$

After summation over μ, ν , the expressions (42) and (43) allow us to put $P_0(r'', r', \tau)$ under the form:

$$\begin{aligned} P_0(r'', r', \tau) &= 2a^{-1} \cos \left(\frac{1}{2} \theta' \right) \cos \left(\frac{1}{2} \theta'' \right) \\ &\times \sum_J \exp \left[-\left(\frac{2i\hbar}{Ma^2} \right) \sigma \left(\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - (b^2 + p^2) \right) \right] d_{p+q, p-q}^{J*}(\theta') d_{p+q, p-q}^J(\theta''), \end{aligned} \tag{44}$$

where p and q have been defined previously.

Since the Wigner polynomials $d_{K,L}^J(\theta)$ are zero for $J < \max\{|K|, |L|\}$, and knowing that the minimal value of J in (44) is $p + \beta - \frac{1}{2}$, and since for this value the function $d_{K,L}^J(\theta)$ is zero, it is convenient to write: $n = J - (p + \beta - \frac{1}{2})$.

The expression (44) becomes:

$$\begin{aligned}
 P_0(r'', r'; \tau) &= 2a^{-1} \cos\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \\
 &\times \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{4i\hbar n'}{Ma^2}\right)\sigma(p - p_n)\right] d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'+p-1/2*}(\theta') d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'+p-1/2}(\theta'')
 \end{aligned}
 \tag{45}$$

with

$$P_n = \left(\frac{b^2 - n^2}{2n'}\right)$$

and $n' = n + \beta$.

5. Energy spectrum and wave function

Calculating $P_0(r'', r'; \tau)$ allows us to reach the green function, which is nothing but the Fourier transform of the propagator.

The green function being known, the whole energy spectrum is obtained from its poles, and from the residues at the poles the corresponding wave function.

Substituting (45) in (7), and integrating over the time parameters τ , we get

$$\begin{aligned}
 G_0(r'', r'; E) &= \left(\frac{4Ma}{\hbar^2}\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \\
 &\times \sum_{n=1}^{\infty} \exp[2n'(p_n - p)]^{-1} d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2}(\theta'')
 \end{aligned}
 \tag{46}$$

or

$$\begin{aligned}
 G_0(r'', r'; E) &= 2a^{-1} \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \\
 &\times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n'} \frac{p + p_n}{E - E_n + i0} d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2}(\theta'')
 \end{aligned}
 \tag{47}$$

with $p = (-2Ma^2E/\hbar^2)^{1/2}$, $p_n = (b^2 - n'^2)/2n'$ and $n' = n + \beta$.

The poles of the Green function (47) allow us to extract the energy eigenvalues for different n :

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2} \left[\frac{(b^2 - n'^2)}{2n'}\right]^2,
 \tag{48}$$

where $b^2 = 2Ma^2(V_0 + V_1)/\hbar^2$.

To get the associated wave functions, we substitute the energy by its expression in (10).

Then we obtain,

$$\begin{aligned}
 K_0(r'', r'; t'', t') &= (i/2ma) \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \\
 &\times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n'} \int \frac{p + p_n}{E - E_n + i0} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t'' - t')\right) \\
 &\times d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n''-p+1/2}(\theta'') dE.
 \end{aligned} \tag{49}$$

Integrating with respect to the energy E , allow us to reach the residues at the poles $E = E_n$,

$$\begin{aligned}
 K_0(r'', r'; t'', t') &= \sum_{n=1}^{\infty} N_n^2 \sin\left(\frac{1}{2}\theta'\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta''\right) \frac{1}{n'} \int \frac{p + p_n}{E - E_n + i0} \\
 &\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t'' - t')\right) d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2*}(\theta') d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n''-p+1/2}(\theta''),
 \end{aligned} \tag{50}$$

where $N_n^2 = 2p_n/an'$, $p_n = (b^2 - n'^2)/2n'$; $b^2 = 2Ma^2(V_0 + V_1)/\hbar^2$, $n' = n + \beta$,

$$V_0 = \frac{A}{ka^2}$$

and

$$V_1 = \frac{\beta(\beta - 1)}{ka^2}$$

identifying (50) to (6), we get:

$$\chi_n(r) = [2p_n/an']^{1/2} (1 - e^{-r/a})^{1/2} d_{p+\beta-1/2, p-\beta+1/2}^{n'-p+1/2}(2\cos^{-1}(e^{-r/2a})). \tag{51}$$

We can express $\chi_n(r)$ in terms of the hypergeometric functions $F(\alpha, \beta, \delta, z)$, by using [19]:

$$d_{m,m'}^l(\beta') = \frac{1}{2^m} \sqrt{\frac{(l+m)!(l-m)!}{(l+m')!(l-m')!}} (1-x)^{\frac{m-m'}{2}} (1+x)^{\frac{m+m'}{2}} P_{l-m}^{(m-m', m+m')}(x) \tag{52}$$

with $x = \cos\beta'$ and

$$P_n^{(\alpha, \beta')}(z) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! + \Gamma(\alpha + 1)} F\left(-n, n + \alpha + \beta' + 1, \beta' + 1, \frac{1+z}{2}\right), \tag{53}$$

where $P_n^{(\alpha, \beta')}(z)$ is the Jacobi polynomial.

This leads us to the right wave function [9]:

$$\begin{aligned}
 \chi_n(r) &= [2p_n/(a(n + \beta))]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(n - 2p + 2)\Gamma(2\beta + 1)} \\
 &\times \sqrt{\frac{\Gamma(n + 2\beta + 1)\Gamma(n - 2p + 2)\Gamma(n - 2p + 2\beta + 1)}{\Gamma(n + 2)}} \\
 &\times (1 - e^{-r/a})^\beta e^{-pnr/a} F(-n + 2p_n - 1, n + 2p_n + 1, 2p_n + 1, e^{-r/a}).
 \end{aligned} \tag{54}$$

6. Special case

The Bargmann potential reduces to the Hulthen potential [7] by setting $\beta = 0$. Indeed for this value of β , the energy spectrum E_N , as well as the associated wavefunctions reduce exactly to the ones of the Hulthen potential:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2Ma^2} \left[\frac{(b^2 - n^2)}{2n} \right]^2$$

and

$$\begin{aligned} \chi_n(r) &= [2p_n/(an)]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(n-2p+2)\Gamma(1)} \\ &\times \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)\Gamma(n-2p+2)\Gamma(n-2p+1)}{\Gamma(n+2)}} \\ &\times e^{-p_n r/a} F(-n+2p_n-1, n+2p_n+1, 2p_n+1, e^{-r/a}). \end{aligned}$$

We note also that it is possible to recover the Yukawa potential by letting $a \rightarrow \infty$ and setting $V_0 = Ze^2/a$.

7. Conclusion

If we set $k = 2M/\hbar^2$ in the expression of the Bargmann potential, we observe that equations (54) and (48) are perfectly identical to the energy spectrum and the associated wave function obtained within the framework of the Schrödinger formalism [9].

Moreover, we have shown that for $\beta = 0$, the present solution reduces to the one of the Hulthen potential.

The ensemble of the results we have ended up shows that the Feynman formalism constitutes a reliable alternative to the Schrödinger formalism, while solving such problems.

References

- [1] M.A. Shifman, *Int. J. Mod. Phys. A* 4 (1989) 2897.
- [2] R. Dutt, A. Khare, Y.P. Varshni, *J. Phys. A* 28 (1995) L107.
- [3] R.P. Feynman, Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [4] D.C. Khandekar, S.V. Lawande, K.V. Bhagmat, *Path Integral Methods and their Applications*, World Scientific, Singapore, 1986.
- [5] I.H. Duru, H. Kleinert, *Phys. Lett. B* 84 (1979) 185.
- [6] C. Grosche, F. Steiner, *Handbook of Feynman Path Integrals*, Springer, Berlin, 1998.
- [7] J. Cai, P. Cai, A. Inomata, *Phys. Rev. A* 34 (6) (1986) 4621.
- [8] L. Chetouani, A. Chouchaoui, T.F. Hamann, *J. Math. Phys.* 31 (1990) 983.
- [9] M.F. Manning, *Phys. Rev.* 44 (1933) 951.
- [10] L. Chetouani, L. Guechi, M. Letlout, T.F. Hamann, *Nuovo Cimento B* 105 (1990) 387.

- [11] P.Y. Cai, A. Inomata, R. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* A 96 (1983) 117.
- [12] A. Inomata, M.A. Kayed, *Phys. Lett. A* 108 (1985) 9.
- [13] A. Inomata, M.A. Kayed, *J. Phys. A* 18 (1985) L235.
- [14] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley, New York, 1981.
- [15] A. Frank, K.B. Woff, *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984) 1735.
- [16] V.A. Inomata, H. Kuratsuji, C.C. Gerry, *Path Integrals and Coherent States of SU(2) and SU(1, 1)*, World Scientific, Singapore, 1992.
- [17] G. Junker, A. Inomata, *Path Integrals on S^3 and its applications to the Rosen-Morse Oscillator, Path integrals From mev to Mev*, World Scientific, Singapore, 1989.
- [18] N.J. Vilinkin, *Special Functions and the Theory of Group Representation*, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1968, p. 130.
- [19] A. Nikiforov, V. Ouvarov, *Fonctions speciales de la physique Mathématique (Mir, 1977)*, p. 321.



ACADEMIC
PRESS

Available online at www.sciencedirect.com

SCIENCE @ DIRECT®

Annals of Physics 306 (2003) 232–240

ANNALS
of
PHYSICS

www.elsevier.com/locate/aop

New approximating method applied to central potentials

A. Chouchaoui* and A. Diaf

Laboratoire de physique Théorique, USTHB BP 9 Dar Beida, Alger, Algeria

Received 8 February 2003

Abstract

A new approximating method, based on QES potentials, is applied to the radial Schrödinger equation. This technique consists in separating the studied potential into two parts: the first one represents an QES potential whereas the second part is considered as a perturbation. The obtained energies E_l are in good agreement with those obtained by other methods.

© 2003 Elsevier Science (USA). All rights reserved.

1. Introduction

Nowadays, the anharmonic oscillator is widely used as a mathematical model in the description of a great number of physical phenomena whose theoretical understanding might require the introduction of higher anharmonicity [1,2].

Unfortunately, the radial Schrödinger equation (rSe), for this class of potentials, does not always admit an exact solution. In the general case, the rSe is solved numerically [3] or by approximating the studied potential by solvable ones [4,5]. However, it is possible to obtain an exact solution by imposing constraints on the potential parameters [6,7]. These potentials are called Quasi Exactly Solvable potentials (QES) [8,9]. In this paper, we propose to apply a new technique, combining QES and perturbative method, to solve this problem without imposing any condition on the potential parameters. The basic idea consists in separating the studied potential into

* Corresponding author. Fax: +2132124-73-44.

E-mail address: akchouchaoui@yahoo.fr (A. Chouchaoui).

two parts: the first one is an QES potential whereas the second part is considered like a perturbation.

2. The QES method

Let us consider the radial Schrödinger equation

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \right) + \left(V(r) - E_l + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) \right] R_l(r) = 0. \tag{1}$$

We can, via the usual $R_l(r) = \frac{U_l(r)}{r}$ transformation, write Eq. (1) as

$$\frac{d^2}{dr^2} U_l(r) + \left(2E_l - 2V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} + \right) U_l(r) = 0, \tag{2}$$

where $m = \hbar = 1$.

Let us choose a solution in the form

$$U_l(r) = A_N \exp [g_l(r)],$$

which should satisfy necessary Eq. (2).

Differentiating $U_l(r)$ twice with respect to the variable r leads to

$$\frac{d^2}{dr^2} U_l(r) - (g'' + g'^2) U_l(r) = 0. \tag{3}$$

Considering

$$g(r) = \sum_{i=1}^{i=m} b_{2i} r^{2i} + \gamma \ln r$$

yields

$$\begin{aligned} (g'' + g'^2) = & -\gamma r^{-2} + \sum_{i=1}^{i=m} 2i(2i-1)b_{2i}r^{2(i-1)} + \gamma^2 r^{-2} + \sum_{i,j}^m 4ijb_{2i}b_{2j}r^{2(i+j)-2} \\ & + 4\gamma \sum_{i=1}^{i=m} ib_{2i}r^{2i-2}. \end{aligned}$$

If we consider the family of potentials given by

$$V(r) = \sum_{n=1}^{n=N} a_{2n} r^{2n} \tag{4}$$

this potential generalizes several potentials encountered in physics.

If we substitute $(g'' + g'^2)$ by its expression in Eq. (3), and by comparing Eqs. (2) and (3), we obtain relations between the a_{2n} , b_{2i} and l parameters. The b_{2i} in terms of the a_{2n} parameters lead to the exact form of the wave function $\Psi_l(r)$. However, the a_{2n} are not all free. Some of them, noted $a_{2n_{QES}}$, are linked to the free ones by

constraints. This method limits the choice of certain parameters occurring in the $V(r)$ expression, but ensures Eq. (2) exact wavefunction and energy.

3. A new approximating method to the central potentials

To allow a large choice of the a_{2n} parameters, we split the studied potential as follows:

$$V(r) = V_{QES} + W, \quad (5)$$

where V_{QES} is the *QES* potential and admits an exact wave function. The remaining term W will be treated like a perturbation. From there, we can write E_l energy in this manner

$$E_l = E_{QES} + \Delta E_l, \quad (6)$$

where ΔE_l represents the perturbation contribution to the energy.

Let us apply the new approximating method to some potentials relating to the generalized potential given by (4).

(a) Our first case is the sextic potential given by

$$V_1(r) = a_2 r^2 - a_4 r^4 + a_6 r^6. \quad (7)$$

This potential has been employed for interpreting the vibrational spectra of molecules [16] and the tricritical phenomena [17,18] and shows promise for improving the precision of results already obtained by considering the quartic anharmonic potential ($a_6 = 0$).

Let us chose a solution as follows:

$$U_l(r) = A_N \exp[g_l(r)]$$

with $g_l(r) = (\beta/2)r^2 + (\theta/4)r^4 + \delta_l \ln r$ and where β, θ and δ_l are three parameters to be determined. A_N is the normalisation constant.

This leads to the equation

$$\frac{d^2}{dr^2} U_l(r) + \left(- (2\beta\delta_l + \beta) - \frac{\delta_l(\delta_l - 1)}{r^2} - (3\theta + \beta^2 + 2\theta\delta_l)r^2 - 2\beta\theta r^4 - \theta^2 r^6 \right) U_l(r) = 0. \quad (8)$$

By comparing Eqs. (8) and (2), we arrive at the following constraints:

$$\begin{aligned} 2a_2 &= \beta^2 + 3\theta + 2\theta\delta_l, \\ l(l+1) &= \delta_l(\delta_l - 1), \\ -a_4 &= \beta\theta \quad \text{and} \quad 2a_6 = \theta^2 \end{aligned} \quad (9)$$

and

$$E_{QES} = -\beta[1/2 + \delta_l] \quad (10)$$

with $\delta_l = l + 1$ and $\beta = -[2a_2 + (3 + 2(l + 1))\sqrt{2a_6}]^{1/2}$.

δ_l parameter is now a positive value and thus ensures the regularity of the wave function at the origin o .

While the wave function is given by

$$R_l(r) = A_N \exp \left[\frac{\beta}{2} r^2 + \frac{\theta}{4} r^4 + l \ln r \right] \tag{11}$$

the chosen potential $V_1(r)$ given by (7) is not always a QES one because of the fact that its a_{2i} parameters ($i = 1, 2$ and 3) do not obligatory satisfy the constraints given by (9). We can introduce the parameter a_{4QES} , which complies with the constraint $a_{4QES} = \beta\sqrt{2a_6}$, in Eq. (7) according to the following expression:

$$V_1(r) = a_2 r^2 - a_{4QES} r^4 + a_6 r^6 - (a_4 - a_{4QES}) r^4. \tag{12}$$

The first three terms in the above equation constitute the QES potential whereas the last term is considered as a perturbation.

$$E_l = E_{QES} + \Delta E_l.$$

By using the virial theorem, the ΔE_l term can be written as

$$\Delta E_l = \int R_l^*(r) V_{\text{int}} R_l(r) d^3 r \tag{13}$$

with

$$V_{\text{int}} = [a_4 - \beta\sqrt{2a_6}] r^4. \tag{14}$$

ΔE_l is evaluated by mean of the wave function $R_l(r)$ given by (11). An explicit form of (13) can be reached easily

$$\begin{aligned} \Delta E_l = & - \left[a_4 - \beta\sqrt{2a_6} \right] (-\theta)^{-(5/2+\delta_l)/2} \Gamma\left(\frac{5}{2} + \delta_l\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{\beta}{4\theta}\right) D_{-(5/2+\delta_l)}\left(-\frac{\beta}{\sqrt{-\theta}}\right) / (-\theta)^{-(1/2+\delta_l)/2} \Gamma\left(\frac{1}{2} + \delta_l\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{\beta}{4\theta}\right) D_{-(1/2+\delta_l)}\left(-\frac{\beta}{\sqrt{-\theta}}\right), \end{aligned} \tag{15}$$

where $D_v(x)$ are the parabolic cylinder functions [10].

We note that, there are two others possibilities in transforming the $V(r)$ potential: namely,

$$V_1(r) = a_{2QES} r^2 - a_4 r^4 + a_6 r^6 + (a_2 - a_{2QES}) r^2, \tag{16}$$

$$V_1(r) = a_2 r^2 - a_4 r^4 + a_{6QES} r^6 + (a_6 - a_{6QES}) r^6, \tag{17}$$

we always choose the form which leads to the smallest perturbation term ($a_{2i} - a_{2iQES}$).

In this case, our E_l energies (see Table 1) are close to the E_{exact} for the low values of l . When l arises, the results given by our method are less good but with error everywhere less than 8%.

Table 1

The energies E_l relating to the sextic potential calculated by our method. Exact represents the results obtained numerically

	a_2	0.55	1	5.5	2	0.51
l	a_4	5×10^{-3}	0.05	0.5	0.05	5×10^{-4}
	a_6	5×10^{-4}	5×10^{-3}	0.05	5×10^{-4}	5×10^{-5}
0	E_l	1.5769	2.1161	4.8975	2.9598	1.5155
	E_{exact}	1.5623	2.0480	4.8156	2.9538	1.5142
1	E_l	2.6417	3.5619	8.1621	4.9113	2.5281
	E_{exact}	2.5991	3.3783	7.9182	4.8878	2.5224
2	E_l	3.7229	5.0505	11.45256	6.8488	3.5434
	E_{exact}	3.6365	4.6919	10.9496	6.7963	3.5313
3	E_l	4.8233	6.5884	14.7832	8.7748	4.5625
	E_{exact}	4.6766	6.0165	13.9158	8.6772	4.5404
4	E_l	5.9451	8.1709	18.1643	10.6917	5.5858
	E_{exact}	5.7216	7.3466	16.8280	10.5296	5.5502

(b) Our second case is

$$V_2(r) = -\frac{e}{r} + \lambda r + \omega r^2$$

Such a potential happens to be of great interest, indeed, especially for the study of the perturbed hydrogenoid atoms [14] and for the description of some events found in the field of particle physics. Gupta and Khare [15] suggested it as a quark confining potential on the basis of the 3P_j splittings of charmonium levels. The eigenfunctions spectrum for this potential can be determined by admitting restrictions on its parameters.

In order to make $V_2(r)$ into a sextic potential form, we firstly use the change of variable $r = f(u)$ which transforms,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} \Psi_l(r) + V_2(r) \Psi_l(r) = E \Psi_l(r), \tag{18}$$

into

$$-\frac{1}{2} \frac{f''}{f'^2} \frac{d\Psi}{du} - \frac{1}{2f'^2} \frac{d^2\Psi}{du^2} + V_2(f(u)) \Psi = E \Psi, \tag{19}$$

where f' and f'' denote, respectively, the first and the second derivatives of $f(u)$ with respect to the variable u .

By setting $\Psi = \sqrt{f'} \Phi$, Eq. (19) reduces to

$$\frac{d^2\Phi}{dr^2} - 2(W - E f'^2) \Phi = 0, \tag{20}$$

where

$$W = f'^2 V_2(f(u)) + \frac{3}{8} \left(\frac{f''}{f'} \right)^2 - \frac{1}{4} \frac{f'''}{f'}$$

The transformation $r \rightarrow u^2$ leads to

$$-2(W - Ef'^2) = -\frac{(4l^2 + 4l + \frac{3}{4})}{u^2} + 8e + 8Eu^2 - 8\lambda u^4 - 8\omega u^6. \tag{21}$$

By the choice

$$g(u) = -b_1u^2 - b_2u^4 + p \ln u$$

we get

$$\begin{aligned} -(g'' + g'^2) &= -\frac{p^2 - p}{u^2} + (4b_1p + 2b_1) - (4b_1^2 - 8b_2p - 12b_2)u^2, \\ &-16b_1b_2u^4 - 16b_2^2u^6. \end{aligned} \tag{22}$$

By comparing Eq. (21) to (22), we arrive at the following constraints:

$$p^2 - p - (4l^2 + 4l + \frac{3}{4}) = 0,$$

$$8e - (4b_1p + 2b_1) = 0,$$

$$4b_1^2 - 8b_2p - 12b_2 + 8E = 0,$$

$$16b_1b_2 - 8\lambda = 0,$$

$$16b_2^2 - 8\omega = 0.$$

The above system leads to

$$p = \frac{3}{2} + 2l,$$

$$b_1 = \frac{e}{l+1},$$

$$b_2 = \frac{1}{2}\sqrt{2\omega},$$

$$\lambda_{QES} = \frac{e\sqrt{2\omega}}{l+1},$$

and

$$E_l = -\frac{1}{2} - \frac{7l^2\sqrt{2\omega} + 8l\sqrt{2\omega} + 3\sqrt{2\omega} + 2l^3\sqrt{2\omega} + e^2}{(l+1)^2}. \tag{23}$$

The λ_{QES} value insures to the Schrödinger equation an exact solution which gives the exact energy given by (23). For the others values of λ , the potential $V(r)$ will be written as follows:

$$V_2(r) = -\frac{e}{r} + \lambda_{QES}r + \omega r^2 + (\lambda - \lambda_{QES})r,$$

$(\lambda - \lambda_{QES})r$ is considered like perturbation. In our study, $V_2(r)$ will be replaced by the sextic potential given by (21). So we can apply to $V_2(r)$ the same treatment as in the first case.

Our E_l energies corresponding to the second case (see Table 2) are nearly identical to the exact ones.

(c) Our third case is

$$V_3(r) = \frac{1}{2} \left[r^2 + \frac{Ar^2}{1 + Gr^2} \right].$$

Such a potential is to be found in laser theory and occurs in quantum field theory with a nonlinear Lagrangian. It has been largely investigated, especially by Varshni [11], Roy and Roychoudhury [12] who have used the shifted $1/N$ expansion method and by Witwit [13] who has used the hypervirial and Pade approximation method. The Schrödinger equation for this potential is not solvable analytically for arbitrary values of A and G . To overcome this difficulty, we expand the potential $V_3(r)$ as follows:

$$V_3(r) = (A + 1)r^2 + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n-1} A \cdot G^{n-1} r^{2n}$$

that may be written in a more closed form

$$V_3(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_{2n} r^{2n}$$

with $\alpha_2 = A + 1$ and $\alpha_{2n} = (-1)^{n-1} A \cdot G^{n-1}$ for $n \geq 2$.

It is identical to expression (4). So we can apply our new approximating method to this case. Our results have been obtained for a 10th-degree even-power polynomial potential ($n = 5$) which represents a very good approximation to $V_3(r)$. There, the energy contribution ΔE is calculated numerically because of the complicated form of the trial function argument $g(r)$.

Table 2
The energies E_l relating to our second case with e fixed ($e = 1$)

l	λ	ω	E_l	E_{exact}
0	0.3	0.2	0.14583	0.1467
1	0.3	0.2	1.4362	1.4308
2	0.3	0.2	2.1580	2.3374
3	0.3	0.2	3.0333	3.1517
0	0.4	1.2	0.9950	1.0330
1	0.4	1.2	3.3669	3.3432
2	0.4	1.2	5.2327	5.2088
3	0.4	1.2	6.9560	6.9602
0	4	10	5.9025	6.0121
1	4	10	12.4683	12.2059
2	4	10	17.8449	17.6183
3	4	10	22.8797	22.7829

Table 3

The energies E_l relating to our third case for A variable and G fixed ($G = 0.01$)

A	l	E_l	E_{exact}
0.2	0	1.6408	1.6407
	1	2.7329	2.7315
	2	3.8245	3.8214
	3	4.9155	4.9098
0.6	0	1.8914	1.8913
	1	3.1493	3.1462
	2	4.4052	4.3985
	3	5.6598	5.6472
1.0	0	2.1133	2.1130
	1	3.5179	3.5140
	2	4.9198	4.9112
	3	6.3197	6.3037
5	0	3.6601	3.6608
	1	6.0918	6.0874
	2	8.5179	8.5080
	3	10.9389	10.9203
10	0	4.9591	4.9614
	1	8.2556	8.2519
	2	11.5152	11.5370
	3	14.8228	14.8127

The energies E_l have been calculated for a set value of G and for different values of A (see Table 3). It can be observed that our results are in good agreement with E_{exact} .

4. Conclusion

It seems that this procedure is very convenient for spherical potentials transformable into QES ones. To illustrate its application, we have calculated by this method the energies E_l relating to some phenomenological potentials with different values of the parameters potentials and several values of the angular momentum l . The obtained results are everywhere close to those obtained numerically.

Eventually, we can say that in all studied cases, the E_l energies given by our method represent a good approximation of the exact ones.

References

- [1] D. Amin, *Phys. Today* 35 (1982) 35;
Phys. Rev. Lett. 36 (1976) 323.
- [2] S. Coleman, in: *Aspects of Symmetry, Selected Erice Lectures*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988, p. 234.
- [3] K. Datta, A. Rampal, *Phys. Rev. D* 23 (1981) 2875.
- [4] J.D. Cramer, J.R. Nix, *Phys. Rev. C* 2 (1970) 1048.
- [5] R.C. Sharma, J.N. Leboeuf, *Phys. Rev. C* 6 (1976) 2340.

- [6] C. Farina De Souza, A. De Souza Dutra, *Phys. Lett. A* 123 (1987) 297.
- [7] A. De Souza Dutra, *Phys. Lett. A* 131 (1988) 319.
- [8] L. Chetouani, A. Chouchaoui, T.F. Hammann, *Fortschr. Phys.* 41 (1993) 209–214, see also p. 3.
- [9] R.S. Kaushal, *Phys. Lett. A* 142 (1989) 57.
- [10] M. Abramowitz, I.A. Stegun (Eds.), *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, 1972.
- [11] Y.P. Varshni, *Phys. Rev. A* 36 (1987) 3009.
- [12] P. Roy, R. Roychoudhury, *Z. Naturforsch. a* 43 (1988) 360.
- [13] M.R.M. Witwit, *J. Phys. A* 24 (1991) 5291.
- [14] J. Killingbeck, *Phys. Lett. A* 67 (1978) 13.
- [15] V. Gupta, A. Khare, *Phys. Lett. B* 70 (1977) 313.
- [16] D.G. Lister, J.N. MacDonald, N.L. Owen, *Internal Rotation and Inversion*, Academic Press, New York, 1978.
- [17] M.E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* 46 (1974) 597.
- [18] C.A. Aragao de Carvalho, *Nucl. Phys. B* 119 (1977) 401.