Table des matières

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE JIJEL
Faculté des Sciences Exactes et Informatique
Département de Physique

N° d'ordre :
Série :

Mémoire

présenté pour obtenir le diplome de

Master en physique

Option : Physique Théorique

Par

Houli Amina

Thème

Intégrale de chemins : - Méthode des perturbations

- Traitement de potentiel

Soutenu le : 18 / 07 / 2019

Devant le Jury :

Président :	S.Haouat	Prof.	Univ. Jijel
Rapporteur :	T. Boudjedaa	MCA	Univ. Jijel
Examinatrice :	R.Rekioua	MAA	Univ. Jijel

Chapitre 1

Introduction générale

L'intégrale de chemin a été introduite par Feynman comme une nouvelle version de quantification se basant sur la notion des trajectoires. Par conséquent, elle offre une souplesse et une maniabilité impréssionante par rapport aux autres méthodes de quantification. Un seul détail tel que l'absence des opérateurs dans son formalisme témoigne de cette puissance et lui confère, en plus, une place très particulière vis à vis la mécanique classique basée sur cette notion de trajectoire. D'un point de vue mathématique, on peut la considérer comme une intégrale fonctionnelle portant sur un ensemble de chemins (fonctions) et donc une intégrale en dimension infinie. Formellement, elle est équivalente à une intégrale de Wiener qui décrit stochastiquement le mouvement Bronwien. Bien que sa nature mathématique n'est pas encore cernée, elle a envahi tous les domaines de la physique comme moyen simple et efficace dans sa description du phénomène microscopique. Cette méthode de quantification est basée sur la notion d'action et donc du Lagrangien. L'idée principale a été proposée par Dirac en essayant de faire un trait d'union entre les systèmes quantiques et leurs correspondants classiques. Il a montré qu'une transformation unitaire sur un système quantique peut être approchée par une expenentielle de l'action classique. Cette idée générale a été exploitée par Feynman, qui a postulé que cette remarque reste aussi valable pour des propagations en temps infinitésimal. Ceci, lui a permis alors de formuler son bijou comme moyen général de quantification ; qui est l'intégrale de chemin.

Le noyau central de son calcul est dit propagateur (dit aussi fonction de Green). Cette fonction à deux point (dans l'espace-temps) contient toute l'information sur le système quantique et la calculer suffit presque toute la description utile au système quantique. Ce propagateur peut être calculé exactement pour des systèmes quadratiques, mais pour des systèmes fondamentaux en physique comme le système Coulombien il faudrait plus de subtilité. Dans ce but, la technique des transformations spatio-temporelles a été introduite pour réduire ces cas non quadratiques aux cas quadratiques ou pour convertir un problème à un autre déja traité par le même formalisme. L'approche semi-classique dans ce formalisme est très naturelle vue la présence des trajectoires comme moyen de calcul. L'extension de ce formalisme aux cas des systèmes à dimension infinie est d'une souplesse extrême et la preuve en est que les diagrammes de Feynman en théorie quantique des champs sont déduits avec une fluidité inouie. Comme on le sait, ces diagrammes est un développement en perturbation de la matrice de diffusion correspondante à la théorie des champs considérée et en mécanique quantique ce développement en perturbation permet d'approcher la solution petit à petit suivant un petit paramétre qu'on se fixe au préalable. La question suivante est-ce qu'il est possible dans des situations particulières de sommer toute la série de perturbation suivant ce petit paramètre quand la convergence est assuré. Bien sûr, en théorie quantique des champs, on peut montrer que cette série est convergeante sans qu'on essaye de la sommer ; ce qui est impossible de toute façon, par contre en mécanique quantique (i.e. dimension finie) cette série peut être montrée qu'elle converge et des fois être sommée dans des cas particuliers.

L'objet de ce mémoire est d'étudier ces cas solubles exactement par la méthode des perturbation en dimension 1 et 3. Ces cas portent essentiellement sur les modèles importants de la physique, tels que le potentiel $\delta(x-a)$ et en général la somme des $\delta(x-a_i)$, le potentiel centrifuge $\frac{1}{x^2}$ en dimension 1 et le potential de Coulomb en dimension 3.

Ce mémoire comporte quatre chapitres. Dans le *premier chapitre*, nous avons présenté les généralités sur les intégrales de chemin et les notions fondamentales, et nous avons étudié l'expérience de Feynman des fentes de Young.

Dans le *deuxiéme chapitre*, on exposera quelques concepts et techniques concernant la formulation des intégrales de chemins pour le cas du potentiel central (cas non relativiste) en coordonnées polaires.

Dans le *chapitre trois*, nous avons exposé la théorie de perturbation pour le propagateur et la fonction de Green, ainsi que la présentation de trois applications en 1 et 3 dimension (delta de Dirac, l'inverse quadratique et potentiel de coulomb).

Dans le *dernier chapitre*, nous avons présenté la méthode générale qui utilise cette série de perturbation et nous avons présenté les mêmes applications.

Finalement nous allons discuter les résultat comme une conclusion générale.

Chapitre 2

Généralités sur les intégrales de chemins

2.1 Approche intuitive de Feynman

En mécanique quantique standard, on attribue à un système quantique un nombre complexe qu'on appelle fonction d'onde ou amplitude de probabilité $\Psi(x;t)$ qui contient toute l'information sur le système. Les prévisions quantiques sur le système se calcule par le module carré de ce nombre complexe $P = |\Psi(x,t)|^2$.

La probabilité P d'un certain événement quantique est un résultat statistique d'une certaine expérience quantique et on la définie dans un sens classique, où l'on sous-entend pratiquement une expérience qui se répète indéfiniment et donne le même résultat avec cette en même probabilité P.

L'introduction de cette probabilité en mécanique est due au quantum de Planck, qui indique une imprévisibilité indéfinissable classiquement de l'interaction du système microscopique avec l'appareil de mesure. Par exemple, l'expérience des fentes de Young permet de mettre en évidence ce caractère quantique et de clarifier les lois de la mécanique quantique sous-jacente à l'expérience.

Dans l'expérience illustrée par la $Fig.1.1$, on avons des particules (électrons) émises par une source d'électrons S en A, dont ces particules ont tous la même énergie, mais sortent dans toutes les directions pour rencontrer un écran B. Cet écran a deux fentes, 1 et 2, à travers lesquels les électrons peuvent passer.

Enfin, derrière l'écran B sur un plan C, nous avons un détecteur d'électrons qui peut être placé à différentes distances x du centre de l'écran. (voir la référence [3])

Fig.1.1.expérience à deux fentes 1 et 2 , les électrons émis en A se dirigent vers le détecteur sur l'écran C, mais un écran B à deux trous est interposé. Le détecteur enregistre un comptage d'arrivée pour chaque électron ; la fraction qui arrive lorsque le détecteur est placé à une distance x du centre de l'écran est mesurée et est représentée par x.

Cette expérience peut être décrite au moyen d'une amplitude de transition dépendante de deux points et en suivant les principes de la mécanique quantique, dont le plus important est le principe de superposition, nous pouvons expliquer la figure d'interférence qui sort sur l'écran C. Par ailleurs, si on imagine l'écran B troué d'une multitude de fentes (en nombre infini même) et qu'en plus imaginons aussi une multitude d'écran $B', B'', B''', ...$(en nombre infini même), alors on comprends intuitivement l'approche de Feynman à la mecanique quantique si on postule en plus, Hypothèse de la correspondance classique pour des temps infinitésimaux. Dans ce qui suit, cette approche intuitive est illustrée conformement aux lois quantiques.

2.1.1 L'amplitude en mécanique quantique

Suivant l'expérience à double fentes, nous avons une quantité de base à la formulation de Feynman qui est l'amplitude de probabilité $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ pour un particule non relativiste pour aller d'un point d'espace-temps (x_a, t_a) à (x_b, t_b). Nous devons ensuite faire la somme de toutes les possibilités intermédiaires, c'est-à-dire notre somme doit inclure les contributions de chaque trajectoire reliant (x_a, t_a) à (x_b, t_b). Si on note l'amplitude de probabilité pour un trajectoire $x(t)$ pour aller d'un point d'espace-temps (x_a, t_a) à (x_b, t_b) par $\Phi[x(t)]$, l'amplitude totale $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ est la somme des contributions de chaque chemin.

Cette amplitude de probabilité est appellée "propagateur", et il est donné par :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\{x(t)\}} \Phi[x(t)] \tag{2.1}$$

où $\Phi[x(t)]$ est l'amplitude de probabilité pour le chemin $x(t)$, tel que $x(t_b) = x_b, x(t_a) = x_a$

Feynman propose de discrétiser chaque chemin, en divisant l'intervalle $[t_a, t_b]$ en N divisions régulières $[t_{j-1}, t_j]$ pour $j = 0, 1, ...; N-1$ où $t_0 = t_a, t_N = t_b$, tel que $\varepsilon = t_{j+1} - t_j$ et $N\varepsilon = t_b - t_a$, où l'on note par $x(t_j) = x_j$ pour $j = 0, 1, ..., N$.

Dans sa forme discrète, cette amplitude totale est notée K_N et est donnée par la somme sur tous les points $x_1, x_2, ..., x_{N-1}$ intermédiaires entre $x(t_a) = x_a$,et $x(t_b) = x_b$ pendant la durée du trajet $[t_a, t_b]$.

$$\begin{aligned} K_N &= \int ... \int \Phi\left(x_a, x_1, ..., x_{N-1}, x_b\right) dx_1 ... dx_{N-1} \\ K_N &= \int K_\varepsilon(x_N, t_N; x_{N-1}, t_{N-1}) \prod_{j=1}^{N-1} K_\varepsilon(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) dx_j \end{aligned} \tag{2.2}$$

où $K_\varepsilon(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1})$ est l'amplitude de transition élémentaire qu'on écrira comme suit :

$$K_\varepsilon(x_j, t_j; x_{j-1}, t_{j-1}) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})\right] \tag{2.3}$$

où l'on postule que $S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})$ est l'action classique sur l'intervalle infinitésimal $[t_{j-1}, t_j]$

$$K_N(x_b, t_b; x_a, t_a) = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})\right] dx_1 ... dx_{N-1} \tag{2.4}$$

Ce propagateur $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ est écrit comme limite de $K_N(x_b, t_b; x_a, t_a)$ pour $N \to \infty$

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= N \sum_{\{x(t)\}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x\left(t\right)\right]\right\} = \lim_{N\to\infty} K_N(x_b, t_b; x_a, t_a) \\ &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})\right] dx_1 ... dx_{N-1} \\ &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S_\varepsilon(x_j, x_{j-1})\right] \prod_{j=1}^{N} dx_j \end{aligned} \tag{2.5}$$

Où cette constante N est choisie pour la normalisation suivante :

$$\lim_{t_b \to t_a} K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \delta(x_b - x_a) \tag{2.6}$$

Une forme alternative plus conventionnelle est "l'intégrale de chemin" definit dans :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S\left[x\left(t\right)\right]\right\} D\left[x\left(t\right)\right] \tag{2.7}$$

où le symbole $D[x(t)]$ est la "mesure sur l'espace des chemins" qui signifie la sommation ou l'intégration sur tous les chemins possibles, avec

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L dt \tag{2.8}$$

l'action "classique" évaluée entre les deux points finaux. L'équation (2.5) est généralement appelée expression ou approximation polygonale de l'intégrale de chemin de (2.7) .

En résumé, la quantité physique centrale dans l'approche de Feynman est le propagateur K qui représente l'amplitude de probabilité (ou de transition) d'une particule passant d'un point spatio-temporel à un autre. La limite semi-classique est quand il n'y a qu'un seul chemin ou trajectoire (trajectoire classique) qui relie les deux points finaux dans ce cas la particule se déplace sur un chemin où l'action est minimale.

Finalement, en mécanique quantique, tous les chemins contribue à l'évolution du système, y compris le chemin classique. La contribution des ces chemins en phase de l'amplitude se mesure en terme de $\hbar$ dans l'action et leur intéference est là pour faire emerger leur effet quantique.

2.2 Approche via l'opérateur d'évolution

Dans cette section, nous allons construire cette intégrale de chemin de Feynman partant de l'opérateur d'évolution. Il est vrai que Feynman l'avait présenté via des postulats indépendants du mode opératoriel se basant seulement sur les propriétés de l'amplitude de transition (connue aussi sous le nom de fonction de transformation ou encore de transformation unitaire). Nous définissons cette amplitude de transition comme élément de matrice de l'opérateur d'évolution et on lenomme aussi propagateur de Feynman puisque cette amplutude propage la fonction d'onde associée au système quantique d'un point spatio-temporel initial à un point spatio-temporel final.

Ce propagateur noté $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ est défini comme suit :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) =< x_b|U(t_b, t_a)|x_a > \tag{2.9}$$

où $U(t_b, t_a)$ est l'opérateur d'évolution entre l'instant initial t_a et l'instant final t_b. Il n'est pas difficile de s'assurer que ce propagateur propage l'état initial $\Psi(x_a, t_a)$ à l'état final $\Psi(x_b, t_b)$ suivant la formule :

$$\begin{aligned}\Psi\left(x_b,t_b\right) &= \int <x_b|U(t_b,t_a)|x_a> \Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \\ &= \int K(x_b,t_b;x_a,t_a)\Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \end{aligned} \tag{2.10}$$

sachant que, dans la représentation de Schrödinger, l'évolution dans le temps des états est définie par l'équation :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \quad ,\text{avec } H = \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \tag{2.11}$$

et dont la solution formelle est donnée sous la forme suivante :

$$|\Psi\left(t_b\right)>= T.\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+V\right)\right)|\Psi\left(t_a\right)> \tag{2.12}$$

avec, T est l'opérateur qui ordonne suivant les temps.

2.2.1 Construction du propagateur

Dans le but d'obtenir la construction naturelle de l'intégrale de chemin proposée par Feynman, partons de la formule précédente c'est à dire de

$$\begin{aligned} K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= <x_b|U(t_b,t_a)|x_a> \\ &= <x_b|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t_b-t_a)\right]|x_a> \end{aligned} \tag{2.13}$$

où $U(t_b,t_a) = \exp -\frac{i}{\hbar}HT$, avec $T = t_b - t_a$ et divisons l'intervalle de temps $[t_b,t_a]$ en N intervalles égaux à $\varepsilon = \frac{T}{N}$, et remarquons qu'on peut écrire cette expenentielle comme :

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}HT\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\varepsilon\right]^N \tag{2.14}$$

Décomposons l'opérateur hamiltonien comme suit :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = A + B \tag{2.15}$$

avec $A = \frac{p^2}{2m}$ et $B = V(x)$. Pour $\varepsilon = \frac{T}{N} << 1$ ($N >> 1$) nous pouvons utiliser la formule de Trotter suivante :

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(A+B\right)\varepsilon\right]=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}A\varepsilon\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}B\varepsilon\right]\times\exp(\text{ordre supérieur en puissance de }\varepsilon) \tag{2.16}$$

Insérons maintenant la relation de fermeture suivante en base des coordonnées $\int |x_j><x_j|dx_j = 1$, où l'on note chaque x_j comme coordonnée correspondante aux extrémité de la subdivision en temps, autrement dit, écrivons et prenons en plus la limite sur $N \to \infty$ pour satisfaire la formule de Trotter précédente

$$\begin{aligned} K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \lim_{N\to\infty} < x_b| \left[\exp\left[-\frac{i}{\hbar}A\varepsilon\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}B\varepsilon\right]\right]^N |x_a> \\ &= \lim_{N\to\infty}\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N} < x_j|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}A\varepsilon\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}B\varepsilon\right]|x_{j-1}> \end{aligned} \tag{2.17}$$

qui peut se mettre aussi comme suit :

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a) = \lim_{N\to\infty}\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N} < x_j|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\varepsilon\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon\right)|x_{j-1}> \tag{2.18}$$

Pour une deuxième fois, insèrons la relation de fermeture en base des impulsions $\int |p_j><p_j|dp_j = 1$, où l'on note chaque p_j comme impulsion correspondante à chacun des intervalles en temps, on obtient alors

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a) = \lim_{N\to\infty}\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N}\int dp_j < x_j|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\varepsilon\right)|p_j><p_j|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon\right)|x_{j-1}> \tag{2.19}$$

Par ailleurs, on a les actions d'opérateurs suivants :

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\varepsilon\right)|p_j>=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{p_j^2}{2m}\varepsilon\right)|p_j> \tag{2.20}$$

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon\right)|x_{j-1}>=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x_{j-1})\varepsilon\right)|x_{j-1}> \tag{2.21}$$

Par conséquent, le propagateur (2.19) est écrit comme suit :

$$\begin{aligned} K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \lim_{N\to\infty}\int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N}\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_jx_j\right) \\ &\quad\times\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{p_j^2}{2m}\varepsilon\right]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}V(x_{j-1})\varepsilon\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_jx_{j-1}\right) \end{aligned} \tag{2.22}$$

avec $< x_j|p_j >= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}p_j x_j\right)$, $< p_j|x_j >= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_j x_j\right)$

On écrira alors

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \lim_{N\to\infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N} \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \\ &\times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j\left(x_j - x_{j-1}\right) - \frac{p_j^2}{2m}\varepsilon - V(x_{j-1})\varepsilon\right]\right\} \end{aligned} \tag{2.23}$$

ou bien

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N\to\infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \int \prod_{j=1}^{N} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[p_j\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}\right) - \left(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_{j-1})\right)\right]\varepsilon\right\} \tag{2.24}$$

Remarquons que les intégrations sur les p_j sont Gaussiennes et peuvent être effectuées

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N\to\infty} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \int \prod_{j=1}^{N} \left\{\frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{-i}{\hbar}\frac{p_j^2}{2m}\varepsilon + \frac{i}{\hbar}p_j(x_j - x_{j-1})\right]\right\} \exp\left[\frac{-i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} V(x_{j-1})\varepsilon\right] \tag{2.25}$$

Nous utilisons alors l'identité la formule suivante :

$$\int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{-i}{\hbar}\frac{p_j^2}{2m}\varepsilon + \frac{i}{\hbar}p_j(x_j - x_{j-1})\right] = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}m\frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2\varepsilon}\right] \tag{2.26}$$

On remplace cette relation dans l'intégrale (2.25) , on arrive à l'expression donnée naturellement pour le propagateur de Feynman

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{m}{2\varepsilon}(x_j - x_{j-1})^2 - V(x_{j-1})\varepsilon\right)\right] \tag{2.27}$$

Notons qu'à la limite $N \to \infty$, où l'intervalle de temps ε tend vers zéro, l'exponentiel dans l'intégrale vue comme intégrale de Rienmman est proportionelle au lagrangien classique du système

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{m}{2\varepsilon}(x_j - x_{j-1})^2 - V(x_{j-1})\varepsilon\right) &= \sum_{j=1}^{N}\varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_{j-1})\right] \\ &= \int_{t_a}^{t_b}(\frac{m}{2}\dot{x}_j^2 - V(x_j))dt = \int_{t_a}^{t_b} L\left(x_j, \dot{x}_j, t_j\right) dt \end{aligned} \tag{2.28}$$

où $\dot{x}_j = \lim_{\varepsilon \to \infty} \frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}$ est la vitesse de la particule à l'instant t_j et enfin on a la formulation d'intégrale de chemin pour le propagateur $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ donnée par Feynman et qu'on écrira sous la forme continue suivante :

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \int_{(x_a,t_a)}^{(x_b,t_b)} D[x(t)] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dtL(x(t), \dot{x}(t), t)\right] \\ &= \int_{(x_a,t_a)}^{(x_b,t_b)} D[x(t)] \exp\left[\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right] \end{aligned} \tag{2.29}$$

où $S[x(t)]$ est nommée l'action classique

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} Ldt \tag{2.30}$$

La mesure de Feynman est noté par

$$D[x(t)] = \lim_{N\to\infty} (\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon})^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \tag{2.31}$$

2.2.2 Propriétés du propagateur

La propriété 01 :

L'équation de Schrödinger pour un état $\mid \Psi(t) >$ est

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \mid \Psi(t) >= H \mid \Psi(t) > \tag{2.32}$$

où H est l'opérateur Hamiltonien du système qui dans notre cas est $H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V$. Nous supposons que H est indépendant du temps.

Pour $\Delta t = t - t_0 << 1$ on a

$$\begin{aligned} \mid \quad & \Psi(t+\Delta t) >=\mid \Psi(t) > + \left[\frac{\partial}{\partial t} \mid \Psi(t) >\right] \Delta t + O\left((\Delta t)^2\right) \\ = \quad & \left(I - \frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) \mid \Psi(t) >= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right) \mid \Psi(t) > \end{aligned} \tag{2.33}$$

et comme la solution formelle en fonction de l'opérateur d'évolution est donnée par

$$\mid \Psi(t) >= U(t, t_0) \mid \Psi(t_0) > \tag{2.34}$$

avec

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\left(t-t_0\right)\right) \tag{2.35}$$

Partons de l'équation

$$\mid \Psi(t_b) >= U(t_b,t_a) \mid \Psi(t_a) > \tag{2.36}$$

et multiplions à gauche par le bra $< x_b|$

$$< x_b|\Psi(t_b) >=< x_b|U(t_b,t_a) \mid \Psi(t_a) > \tag{2.37}$$

En insérant une relation de ferméture$\int dx_a|x_a >< x_a| = 1$; nous obtenons

$$\begin{aligned} < \ x_b|\Psi(t_b) >&= \int dx_a|x_a >< x_a| < x_b|U(t_b,t_a) \mid \Psi(t_a) > \\ = &\int dx_a < x_b|U(t_b,t_a)|x_a >< x_a|\Psi(t_a) > \end{aligned} \tag{2.38}$$

et $< x_b|\Psi(t_b) >= \Psi\left(x_b,t_b\right), < x_a|\Psi(t_a) >= \Psi\left(x_a,t_a\right),$

$$\begin{aligned} \Psi\left(x_b,t_b\right) &= \int dx_a < x_b|U(t_b,t_a)|x_a > \Psi\left(x_a,t_a\right) \\ &= \int K(x_b,t_b;x_a,t_a)\Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \end{aligned} \tag{2.39}$$

Avec $t_b > t_a$

où $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ le propagateur donné par (2.27)

La propriété 02 :

$K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ vérifie l'équation de Schrodinger

$$\lim_{t_b \to t_a} K(x_b,t_b;x_a,t_a) = \delta\left(x_b - x_a\right) \tag{2.40}$$

La propriété 03 :

Si le Lagrangien ou l'Hamiltonien sont indépendants du temps alors le propagateur $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ vérifie la propriété suivante :

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a) = K(x_b,t_b - t_a;x_a,0) \tag{2.41}$$

La propriété 04 :

Considérons les états $\Psi\left(x_1,t_1\right), \Psi\left(x_a,t_a\right)$ et $\Psi\left(x_b,t_b\right)$ avec $t_a < t_1 < t_b$

suivant la définition (2.10) , nous avons

$$\Psi\left(x_1,t_1\right)=\int K(x_1,t_1;x_a,t_a)\Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \tag{2.42}$$

$$\Psi\left(x_b,t_b\right)=\int K(x_b,t_b;x_1,t_1)\Psi\left(x_1,t_1\right)dx_1 \tag{2.43}$$

et

$$\Psi\left(x_b,t_b\right)=\int K(x_b,t_b;x_a,t_a)\Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \tag{2.44}$$

En insérant (2.43) dans (2.42) nous obtenons ;

$$\begin{aligned}\Psi\left(x_b,t_b\right) &= \int K(x_b,t_b;x_1,t_1)dx_1\int K(x_1,t_1;x_a,t_a)\Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \\ &= \int\int K(x_b,t_b;x_1,t_1)K(x_1,t_1;x_a,t_a)dx_1\Psi\left(x_a,t_a\right)dx_a \end{aligned}\tag{2.45}$$

L'équation obtenue a la même forme que l'équation (2.44)

Donc le propagateur $K(x_b,t_b;x_a,t_a)$ vérifie la propriété suivante :

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\int K(x_b,t_b;x_1,t_1)K(x_1,t_1;x_a,t_a)dx_1 \tag{2.46}$$

Cette dernière équation est dite l'équation de Chapman-Kolmogorov.

La propriété 05 :

Partons de l'équation

$$|\Psi(t_b)>=U(t_b,t_a)\mid\Psi(t_a)> \tag{2.47}$$

avec

$$U(t_b,t_a)=\exp\left(\frac{-i}{\hbar}H\left(t_b-t_a\right)\right) \tag{2.48}$$

et on a

$$|\Psi(t_a)>=\sum_n<\varphi_n|\Psi(t_a)>|\varphi_n> \tag{2.49}$$

il vient que

$$\begin{aligned}|\Psi(t_b) &> =\sum_n\exp\left(\frac{-i}{\hbar}H\left(t_b-t_a\right)\right)<\varphi_n|\Psi(t_a)>|\varphi_n> \\ &= \sum_n<\varphi_n|\Psi(t_a)>\exp\left(\frac{-i}{\hbar}E_n\left(t_b-t_a\right)\right)|\varphi_n> \end{aligned}\tag{2.50}$$

Avec les vecteurs $|\varphi_n>$ état propre à H

$$H|\varphi_n>=E_n|\varphi_n> \tag{2.51}$$

En multipliant par le bra $<x_b|$ et en insérant la relation de fermeture $\int dx_a|x_a><x_a|=1$, on obtient

$$<x_b|\Psi(t_b)>=\sum_n\int dx_a<\varphi_n|x_a><x_a|\Psi(t_a)>\exp\left(\frac{-i}{\hbar}E_n\left(t_b-t_a\right)\right)<x_b|\varphi_n> \tag{2.52}$$

Avec

$$\begin{cases} <x_b|\Psi(t_b)>=\Psi(x_b,t_b) \\ <x_a|\Psi(t_a)>=\Psi(x_a,t_a) \\ <x_b|\varphi_n>=\varphi_n(x_b) \\ <\varphi_n|x_a>=\varphi_n^*(x_a) \end{cases} \tag{2.53}$$

Donc

$$\Psi(x_b,t_b)=\int dx_a\left[\sum_n\exp\left(\frac{-i}{\hbar}E_n\left(t_b-t_a\right)\right)\varphi_n(x_b)\varphi_n^*(x_a)\right]\Psi(x_a,t_a) \tag{2.54}$$

en comparé par (2.10), alors le propagateur écrit comme

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a)=\sum_n\exp\left(\frac{-i}{\hbar}E_n\left(t_b-t_a\right)\right)\varphi_n(x_b)\varphi_n^*(x_a) \tag{2.55}$$

Fonction de Green

En mécanique quantique non relativiste la propagation se fait vers le futur (causalité non relativiste) nous définissons alors la propagation par la fonction de Green en temps suivante

$$G(t_b,t_a)=\Theta\left(t_b-t_a\right)(\exp\frac{-i}{\hbar}\left(t_b-t_a\right)\hat{H}) \tag{2.56}$$

où $\Theta\left(t_b-t_a\right)$est la fonction de Heaviside assure cette causalité.

L'élément de matrice entre les états $|x_a>$ et $|x_b>$ s'écrit alors comme

$$\begin{aligned} G(x_b,x_a;t_b,t_a) &= <x_b|G(t_b,t_a)|x_a>=\Theta\left(t_b-t_a\right)<x_b|(\exp\frac{-i}{\hbar}\left(t_b-t_a\right)\hat{H})|x_a> \\ &= \Theta\left(t_b-t_a\right)K(x_b,t_b;x_a,t_a) \end{aligned} \tag{2.57}$$

Dans ce cas, $G(x_b,x_a;t_b,t_a)$ est une solution de l'équation

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_b}-\hat{H}(x_b)\right]G(x_b,x_a;t_b,t_a)=i\hbar\delta\left(x_b-x_a\right)\delta\left(t_b-t_a\right) \tag{2.58}$$

En introduisant la transformée de Fourier de cette fontion de Green en temps, on obtient la fonction de Green en énergie définit par

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dT \exp\left[\frac{iE\,(t_b - t_a)}{\hbar}\right] G(x_b, x_a; t_b, t_a) \tag{2.59}$$

Pour $\hat{H}$ indépendant du temps, cette fonction de Green vérifie

$$\left(E - \hat{H}\right) G(x_b, x_a; E) = \delta\,(x_b - x_a) \tag{2.60}$$

$G(x_b, x_a; E)$ est l'élément de matrice d'un opérateur $\hat{G}(E)$

$$G(x_b, x_a; E) =< x_b|\hat{G}(E)|x_a > \tag{2.61}$$

et où formellement on écrira

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{\left(E - \hat{H}\right)} \tag{2.62}$$

et comme

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_n \exp\left(\frac{-i}{\hbar} E_n\,(t_b - t_a)\right) \varphi_n(x_b)\varphi_n^*(x_a) \tag{2.63}$$

alors cette fonction de Green dépendante de l'énergie s'écrira comme

$$G(x_b, x_a; E) = \sum_n \frac{\varphi_n(x_b)\varphi_n^*(x_a)}{(E - E_n)} \tag{2.64}$$

Chapitre 3

L'intégrale de chemin en coordonnée polaire

3.1 Propagateur non relativiste en présence d'un potentiel central

3.1.1 En deux dimensions

Le propagateur de Feynman d'une particule de masse m se déplaçant dans un espace euclidien à deux dimensions dans un potentiel $V(x,y)$ est donné par :

$$K(x_b, y_b, x_a, y_a; T) = \int D\left[x(t)\right] D\left[y(t)\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T \left(\frac{m}{2}\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2\right) - V(x,y)\right) dt\right] \tag{3.1}$$

Sous la forme discréte, il est défini par :

$$K\left(r_b, r_a; T\right) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j dy_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S(j, j-1)\right] \tag{3.2}$$

avec $S(j,j-1)$ représente l'action discrète, qui est donnée par :

$$S(j,j-1) = \frac{m}{2\varepsilon}(\Delta x_j^2 + \Delta y_j^2) - \varepsilon V(x_j, y_j) \tag{3.3}$$

où ε et $\Delta u_j (u = x, y)$ sont respectivement l'intervalle élémentaire de temps et l'intervalle position définis selon les notations standard par :

$$\varepsilon = t_j - t_{j-1}$$

$$T = t_b - t_a = N\varepsilon$$

$$\Delta u_j = u_j - u_{j-1}$$

$$u_j = u(t_j)$$

Passons en coordonnées polaires : $x = r\cos\theta,\ y = r\sin\theta$

Suivant la décomposition polaire habituelle, le propagateur s'écrira dans la représentation polaire comme :

$$K\left(r_b, r_a; T\right) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\theta_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S(j,j-1)\right] \tag{3.4}$$

avec

$$S(j,j-1) = \frac{m}{2\varepsilon}\left[\left(r_j\cos\theta_j - r_{j-1}\cos\theta_{j-1}\right)^2 + \left(r_j\sin\theta_j - r_{j-1}\sin\theta_{j-1}\right)^2 - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j)\right] \tag{3.5}$$

qui peut se mettre aussi comme suit

$$\begin{aligned} S(j,j-1) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1}\cos\Delta\theta_j\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + 2r_j r_{j-1}\left(1-\cos\Delta\theta_j\right)\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + 4r_j r_{j-1}\frac{\sin^2\Delta\theta_j}{2}\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j) \end{aligned} \tag{3.6}$$

où

$$\bar{u}_j = \frac{u_j + u_{j-1}}{2},\ u_j = r_j, \theta_j$$

A ce stade, notons que les corrections qu'on va introduire en Δu_j doit être de telle manière que l'action soit du premier ordre en ε, sachant que $\Delta u_j = u_j - u_{j-1}$ sont de l'ordre en $\sqrt{\varepsilon}$. Ceci nous permet alors les développements (corrections quantiques) suivants dans l'action et la mesure

$$S(j,j-1) = \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + 4(\bar{r}_j^2 - \frac{\Delta r_j^2}{4})(\frac{\Delta\theta_j^2}{4} - \frac{\Delta\theta_j^4}{48})\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j) \tag{3.7}$$

qui s'ecrira

$$S(j,j-1) = \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + \bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j) - \frac{m}{2\varepsilon}\left[\frac{\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^4}{12} + \frac{\Delta r_j^2\Delta\theta_j^2}{4}\right] \tag{3.8}$$

ou bien

$$S(j,j-1)=\frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2+\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2\right]-\varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j)-\frac{m}{8\varepsilon}\left[\frac{\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^4}{3}+\Delta r_j^2\Delta\theta_j^2\right] \tag{3.9}$$

où nous n'avons retenu que les termes $\Delta\theta_j^4$ et $\Delta r_j^2\Delta\theta_j^2$ qui sont tous d'ordre ε^2

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}S\left(j,j-1\right)\right) &= \sum_{j=1}^{N}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\left(j,j-1\right)\right)\\ &= \sum_{j=1}^{N}\left[1-\frac{i}{\hbar}\frac{m}{8\varepsilon}\left(\frac{\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^4}{3}+\Delta r_j^2\Delta\theta_j^2\right)\right]\\ &\quad\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2+\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2\right]-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j)\right]\end{aligned} \tag{3.10}$$

et pour la mesure $dxdy=rdrd\theta$ on prendra l'expression suivante :

$$\begin{aligned}\prod_{j=1}^{N-1}dx_jdy_j &= \prod_{j=1}^{N-1}r_jdr_jd\theta_j=\frac{1}{\sqrt{r_br_a}}\prod_{j=1}^{N}\left(r_jr_{j-1}\right)^{\frac{1}{2}}\prod_{j=1}^{N-1}dr_jd\theta_j\\ &= \frac{1}{\sqrt{r_br_a}}\prod_{j=1}^{N}(\bar{r}_j^2-\frac{\Delta r_j^2}{4})^{\frac{1}{2}}\prod_{j=1}^{N-1}dr_jd\theta_j\\ &= \frac{1}{\sqrt{r_br_a}}\prod_{j=1}^{N}\bar{r}_j(1-\frac{\Delta r_j^2}{8\bar{r}_j^2})\prod_{j=1}^{N-1}dr_jd\theta_j\end{aligned} \tag{3.11}$$

En suivant la procédure de Laughlin-Schulman ([6]) et la formule suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}U^{2n}\exp(\frac{-\alpha U^2}{2\beta})dU=\frac{(2n-1)!!}{(\frac{\alpha}{\beta})^n}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\frac{-\alpha U^2}{2\beta})dU \text{ avec } \quad \beta=\frac{m}{2\hbar\varepsilon} \tag{3.12}$$

les corrections quantiques seront remplacées respectivement par :

$$\Delta r_j^2\to(\frac{i\hbar\varepsilon}{m}),\Delta\theta_j^2\to\frac{1}{\bar{r}_j^2}(\frac{i\hbar\varepsilon}{m}),\Delta\theta_j^4\to\frac{3}{\bar{r}_j^4}(\frac{i\hbar\varepsilon}{m})^2 \tag{3.13}$$

et par conséquent, le propagateur (3.4) devient

$$K\left(r_b,r_a;T\right)=\frac{1}{\sqrt{r_br_a}}\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^N\int\prod_{j=1}^{N-1}dr_jd\theta_j\prod_{j=1}^{N}\bar{r}_j\exp\left[\frac{i}{\hbar}A\left(j,j-1\right)\right] \tag{3.14}$$

Avec

$$\begin{aligned} A\left(j,j-1\right) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2+\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2\right]-\varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j)-\frac{\hbar\Delta r_j^2}{i8\bar{r}_j^2}-\frac{m}{8\varepsilon}\left(\frac{\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^4}{3}+\Delta r_j^2\Delta\theta_j^2\right) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2+\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2\right]-\varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j)-\frac{\hbar^2\varepsilon}{8m\bar{r}_j^2}-\frac{m}{8\varepsilon}\left(\frac{\bar{r}_j^2}{3}\frac{3}{\bar{r}_j^4}(\frac{i\hbar\varepsilon}{m})^2+\frac{1}{\bar{r}_j^2}(\frac{i\hbar\varepsilon}{m})^2\right) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2+\bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2\right]-\varepsilon\left[V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j)-\frac{\hbar^2\varepsilon}{8m\bar{r}_j^2}\right] \end{aligned} \tag{3.15}$$

qui s'écrira sous une forme continue

$$S=\int_0^T\left[\frac{m}{2}(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2)-V_q(r,\theta)\right]dt \tag{3.16}$$

avec le potentiel $V_q(r,\theta)$ corrigé par le terme quantique

$$V_q(r,\theta)=V(r,\theta)-\frac{\hbar^2}{8mr^2} \tag{3.17}$$

3.1.2 En trois dimensions

Le propagateur de Feynman d'une particule de masse m se déplaçant dans un espace euclidien à trois dimensions dans un potentiel $V(x,y,z)$ est donné par :

$$\begin{aligned} K(x_b,y_b,z_b,x_a,y_a,z_a;T) &= \int D\left[x(t)\right]D\left[y(t)\right]D\left[z(t)\right] \\ &\quad\times\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T(\frac{m}{2}\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2\right)-V(x,y,z)dt)\right] \end{aligned} \tag{3.18}$$

et sous sa forme discréte il est défini par :

$$K(x_b,y_b,z_b,x_a,y_a,z_a;T)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}}\int\prod_{j=1}^{N-1}dx_jdy_jdz_j\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}S(j,j-1)\right] \tag{3.19}$$

avec $S(j,j-1)$ l'action discrète donnée par :

$$S(j,j-1)=\frac{m}{2\varepsilon}(\Delta x_j^2+\Delta y_j^2+\Delta z_j^2)-\varepsilon V(x_j,y_j,z_j) \tag{3.20}$$

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

$x=r\sin\theta\cos\phi$, $y=r\sin\theta\sin\phi$, $z=r\cos\theta$

Le propagateur s'écrira dans ces coordonnées sphériques comme suit :

$$K(r_b, r_a; T) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j^2 \sin\theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S(j, j-1)\right] \tag{3.21}$$

avec

$$\begin{aligned} S(j, j-1) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left(r_j \sin\theta_j \cos\phi_j - r_{j-1}\sin\theta_{j-1}\cos\phi_{j-1}\right)^2 + \left(r_j \sin\theta_j \sin\phi_j - r_{j-1}\sin\theta_{j-1}\sin\phi_{j-1}\right)^2 \\ &\quad + \left(r_j\cos\theta_j - r_{j-1}\cos\theta_{j-1}\right)^2 - \varepsilon V(\bar{r}_j, \bar{\theta}_j, \bar{\phi}_j) \end{aligned} \tag{3.22}$$

qui écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} S(j, j-1) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1}\sin\theta_j\sin\theta_{j-1}\cos(\phi_j - \phi_{j-1}) + \cos\theta_j\cos\theta_{j-1}\right] \\ &\quad -\varepsilon V(\bar{r}_j, \bar{\theta}_j, \bar{\phi}_j) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1}\cos\Psi_{j,j-1}\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j, \bar{\theta}_j, \bar{\phi}_j) \end{aligned} \tag{3.23}$$

où $\cos\Psi_{j,j-1} = \cos\theta_j\cos\theta_{j-1} + \sin\theta_j\sin\theta_{j-1}\cos(\phi_j - \phi_{j-1})$

$$\begin{aligned} S(j, j-1) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1} + 2r_j r_{j-1} - 2r_j r_{j-1}\cos\Psi_{j,j-1}\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j, \bar{\theta}_j, \bar{\phi}_j) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + 2r_j r_{j-1}(1 - \cos\Psi_{j,j-1})\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j, \bar{\theta}_j, \bar{\phi}_j) \\ &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + 4r_j r_{j-1}\sin^2\frac{\Psi_{j,j-1}}{2}\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j, \bar{\theta}_j, \bar{\phi}_j) \end{aligned} \tag{3.24}$$

et pour la mesure $dxdydz = r^2\sin\theta dr d\theta d\phi$, on prendra l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^{N-1} dx_j dy_j dz_j &= \prod_{j=1}^{N-1} r_j^2 \sin\theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j \\ &= \frac{1}{\sqrt{r_b r_a \sin\theta_b \sin\theta_a}} \prod_{j=1}^{N-1} \bar{r}_j^2 \sin\bar{\theta}_j \left[1 - \frac{1}{4}\left(\Delta r_j^2 + \frac{\Delta\theta_j^2}{2}\sin^2\bar{\theta}_j\right)\right] \end{aligned} \tag{3.25}$$

et l'action écrit comme suite :

$$\begin{aligned}
S(j,j-1) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + 4r_j r_{j-1}\sin^2\frac{\Psi_{j,j-1}}{2}\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j,\bar{\phi}_j) \\
&= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + \bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2 + \bar{r}_j^2\sin^2\bar{\theta}_j\Delta\phi_j^2 - \frac{1}{4}\left(\Delta r_j^2 + \Delta\theta_j^2 + \Delta r_j^2\Delta\phi_j^2\sin^2\bar{\theta}_j + \Delta\theta_j^2\Delta\phi_j^2 r_j^2\right.\right. \\
&\quad \left.\left. + \frac{1}{3}\Delta\theta_j^4\bar{r}_j^2 + \frac{1}{3}\Delta\phi_j^4\bar{r}_j^2\sin^2\bar{\theta}_j\right)\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j,\bar{\phi}_j)
\end{aligned} \tag{3.26}$$

ou bien

$$\begin{aligned}
S(j,j-1) &= \frac{m}{2\varepsilon}\left[\Delta r_j^2 + \bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2 + \bar{r}_j^2\sin^2\bar{\theta}_j\Delta\phi_j^2\right] - \varepsilon V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j,\bar{\phi}_j) - \frac{m}{8\varepsilon}\left[\Delta r_j^2\Delta\theta_j^2 + \Delta r_j^2\Delta\phi_j^2\sin^2\bar{\theta}_j\right. \\
&\quad \left. + \Delta\theta_j^2\Delta\phi_j^2\bar{r}_j^2 + \frac{1}{3}\Delta\theta_j^4\bar{r}_j^2 + \frac{1}{3}\Delta\phi_j^4\bar{r}_j^2\sin^2\bar{\theta}_j\right]
\end{aligned} \tag{3.27}$$

De la même manière, en suivant la procédure de Laughlin-Schulman ([6]) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U^{2n}\exp(\frac{-\alpha U^2}{2\beta})dU = \frac{(2n-1)!!}{(\frac{\alpha}{\beta})^n}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\frac{-\alpha U^2}{2\beta})dU \tag{3.28}$$

pour évaluer les corrections quantiques on remplaçant dans le propagateur, il devient :

$$\begin{aligned}
K(r_b,r_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}}\frac{1}{\sqrt{r_b r_a\sin\theta_b\sin\theta_a}}\int\prod_{j=1}^{N-1}dr_j d\theta_j d\phi_j \\
&\quad \times\prod_{j=1}^{N}\bar{r}_j^2\sin\bar{\theta}_j\times\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2\varepsilon}\left(\Delta r_j^2 + \bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2 + \bar{r}_j^2\sin^2\theta_j\Delta\phi_j^2\right)\right.\right. \\
&\quad \left.\left. -\varepsilon\left(V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j,\bar{\phi}_j) + \frac{-\hbar^2}{8m\bar{r}_j^2}\left(1+\frac{1}{\sin^2\theta_j}\right)\right)\right]\right\}
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Qui s'écrira :

$$\begin{aligned}
K(r_b,r_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}}\frac{1}{\sqrt{r_b r_a\sin\theta_b\sin\theta_a}}\int\prod_{j=1}^{N-1}dr_j d\theta_j d\phi_j \\
&\quad \times\prod_{j=1}^{N}\bar{r}_j^2\sin\bar{\theta}_j\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{m}{2\varepsilon}\left(\Delta r_j^2 + \bar{r}_j^2\Delta\theta_j^2 + \bar{r}_j^2\sin^2\theta_j\Delta\phi_j^2\right)\right.\right. \\
&\quad \left.\left. -\varepsilon\left(V(\bar{r}_j,\bar{\theta}_j,\bar{\phi}_j) + \Delta V_j\right)\right]\right\}
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Où ΔV_j est la correction quantique donnée par :

$$\Delta V_j = \frac{-\hbar^2\left(1+\frac{1}{\sin^2\theta_j}\right)}{8m\bar{r}_j^2} \tag{3.31}$$

On remplace $\bar{r}_j^2$ par $r_j r_{j-1}$ et $sin^2\bar{\theta}_j$ par $\sin\theta_j \sin\theta_{j-1}$, la forme équivalente écrit comme :

$$\begin{aligned} K(r_b, r_a; T) &= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j^2 \sin\theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j \\ &\times \prod_{j=1}^{N} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}\left(\Delta r_j^2 + r_j r_{j-1}\Delta\theta_j^2 + r_j r_{j-1}\sin\theta_j \sin\theta_{j-1}\Delta\phi_j^2\right)\right. \\ &\left. -\varepsilon(V_j + \Delta V_j)\right\} \end{aligned} \tag{3.32}$$

3.2 Propagateur de la particule libre

Dans ce qui suit, nous allons déterminer la partie radiale du propagateur libre en intégrant sur la partie angulaire, puis sur la partie radiale du propagateur. Ceci va nous permettra de manipuler quelques formules utiles au calcul de perturbation, telles que les fonctions de Bessel. On considére une particule libre $V = 0$ se déplaçant dans un espace à deux et trois dimensions.

3.2.1 En deux dimensions

Dans ce cas, le propagateur est défini comme suit :

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a, T) &= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\theta_j \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\varepsilon}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2 - 2r_j r_{j-1}\cos\Delta\theta_j\right)\right)\right] \\ &= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j d\theta_j \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2\right)\right] \\ &\times \exp\left[\frac{-imr_j r_{j-1}}{\hbar\varepsilon}\cos(\theta_j - \theta_{j-1})\right] \end{aligned} \tag{3.33}$$

En utilisant le développement en fonctions de Bessel modiées I_k suivant :

$$\exp(z\cos\theta) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} I_k(z)\exp(ik\theta) \tag{3.34}$$

alors le terme angulaire de l'action s'écrit comme suit :

$$\exp\left[\frac{-imr_j r_{j-1}}{\hbar\varepsilon}\cos(\theta_j - \theta_{j-1})\right] = \sum_{k=-\infty}^{\infty} I_k\left(\frac{-imr_j r_{j-1}}{\hbar\varepsilon}\right)\exp\left(ik(\theta_j - \theta_{j-1})\right) \tag{3.35}$$

Et le propagateur (3.33) se reécrira comme suit :

$$\begin{aligned}
K(r_b,\theta_b,r_a,\theta_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right] \\
&\quad \times \int \prod_{j=1}^{N-1} d\theta_j \sum_{l_j=-\infty}^{\infty} I_{l_j}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\hbar\varepsilon}\right)\exp\left(il_j(\theta_j-\theta_{j-1})\right) \\
&= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right] \\
&\quad \sum_{l_1=-\infty}^{\infty}\sum_{l_2=-\infty}^{\infty}....\sum_{l_N=-\infty}^{\infty} I_{l_1}\left(\frac{-imr_1r_0}{\hbar\varepsilon}\right) I_{l_2}\left(\frac{-imr_1r_0}{\hbar\varepsilon}\right) \\
&\quad \times ...I_{l_N}\left(\frac{-imr_1r_0}{\hbar\varepsilon}\right)\int_0^{2\pi} d\theta_1 \exp\left[i\left(l_1-l_2\right)\theta_1\right]\int_0^{2\pi} d\theta_2 \exp\left[i\left(l_2-l_3\right)\theta_2\right] \\
&\quad \times ... \int_0^{2\pi} d\theta_N \exp\left[i\left(l_N-l_{N-1}\right)\theta_N\right] \qquad (3.36)
\end{aligned}$$

Ou encore

$$\begin{aligned}
K(r_b,\theta_b,r_a,\theta_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right] \\
&\quad \times \sum_{l=-\infty}^{\infty} I_{l_1}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\hbar\varepsilon}\right)(2\pi)^N \exp\left[il\left(\theta_b-\theta_a\right)\right] \qquad (3.37)
\end{aligned}$$

Les intégrations sur les angles ont été simplement effectuée en utilisant la propriété d'orthogonalité de fonction $\exp(ik\theta)$ sur l'intervalle $[0,2\pi]$. La forme du propagateur se simplifie alors à

$$K(r_b,\theta_b,r_a,\theta_a;T) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} K_l(r_b,r_a;T)\exp\left[il(\theta_b-\theta_a)\right] \qquad (3.38)$$

Où $K_l(r_b,r_a;T)$ est le propagateur radial qui a la forme suivante :

$$K_l(r_b,r_a;T) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\varepsilon}\right)^N(2\pi)^N \int \prod_{j=1}^{N-1} r_j dr_j \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(r_j^2+r_{j-1}^2)\right] I_l\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\hbar\varepsilon}\right) \qquad (3.39)$$

C'est une intégrale de chemin sur le rayon et on va l'intégrer d'une manière recurrente en procédant ordre par ordre.

Pour l'ordre 1

$$\begin{aligned}
K_l(r_0, r_2; 2\varepsilon) &= \int r_1 dr_1 K_l(r_0, r_1; \varepsilon) K_l(r_1, r_2; \varepsilon) \\
&= (\frac{m}{i\hbar\varepsilon})^2 \exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(r_0^2 + r_2^2)\right] \int r_1 dr_1 \exp\left[\frac{im}{\hbar\varepsilon} r_1^2\right] \\
&\quad \times I_l\left(\frac{-imr_0}{\hbar\varepsilon} r_1\right) I_l\left(\frac{-imr_2}{\hbar\varepsilon} r_1\right) \qquad (3.40)
\end{aligned}$$

Nous introduisons la formule suivante des fonctions de Bessel (la formule (2) section 6.633, p.699) ([2]) :

$$\int_0^\infty \exp(i\alpha x^2) I_v(-ibx) I_v(-icx) x dx = \frac{i}{2\alpha} \exp\left[-i\frac{(b^2 + c^2)}{4\alpha}\right] I_v\left(\frac{-ibc}{2\alpha}\right) \qquad (3.41)$$

avec $\mathrm{Re}(\alpha) > 0, \mathrm{Re}(v) > -1.$ où $a = \frac{m}{\hbar\varepsilon}$, $b = \frac{mr_0}{\hbar\varepsilon}$, $c = \frac{mr_2}{\hbar\varepsilon}$

$$\frac{b^2 + c^2}{4a} = \frac{m}{2} \frac{(r_0^2 + r_2^2)}{2\varepsilon\hbar}$$

$$\frac{bc}{2a} = \frac{mr_0 r_2}{2\varepsilon\hbar}$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}
K_l(r_0, r_2; 2\varepsilon) &= (\frac{m}{i\hbar\varepsilon})^2 \exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}(r_0^2 + r_2^2)\right] \left(\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\right) \exp\left(\frac{-im}{2} \frac{(r_0^2 + r_2^2)}{2\varepsilon\hbar}\right) I_l\left(\frac{mr_0 r_2}{2i\hbar\varepsilon}\right) \\
&= \frac{m}{2i\hbar\varepsilon} \exp\left(\frac{im}{2} \frac{(r_0^2 + r_2^2)}{2\varepsilon\hbar}\right) I_l\left(\frac{mr_0 r_2}{2i\hbar\varepsilon}\right) \qquad (3.42)
\end{aligned}$$

On remarque qu'on obtient la même forme du propagateur où juste la durée de temps ε est remplacée par 2ε. Ceci nous inspire à la formule recurrente suivante :

pour l'ordre n

$$\begin{aligned}
K_l(r_b, r_a; N\varepsilon) &= \int dr_{N-1} r_{N-1} K_l(r_b, r_{N-1}; (N-1)\varepsilon) K_l(r_{N-1}, r_a; \varepsilon) \\
&= \int dr_{N-1} r_{N-1} \left(\frac{m}{i\hbar(N-1)\varepsilon}\right) \exp\left(\frac{im}{2} \frac{(r_b^2 + r_{N-1}^2)}{(N-1)\varepsilon\hbar}\right) I_l\left(\frac{mr_b r_{N-1}}{(N-1)i\hbar\varepsilon}\right) \\
&\quad \times(\frac{m}{i\hbar\varepsilon}) \exp\left(\frac{im}{2} \frac{(r_{N-1}^2 + r_a^2)}{\varepsilon\hbar}\right) I_l\left(\frac{mr_{N-1} r_a}{i\hbar\varepsilon}\right) \qquad (3.43)
\end{aligned}$$

et avec la même formule des fonctions de Bessel ([2]), alors on obtient :

$$K_l(r_b, r_a; N\varepsilon) = \frac{m}{i\hbar N\varepsilon} \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{1}{N\varepsilon}\left(r_b^2 + r_a^2\right)\right] I_l\left(\frac{mr_b r_a}{i\hbar N\varepsilon}\right) \tag{3.44}$$

Sachant que $T = \varepsilon N$, la forme finale du propagateur radial de la particule libre est donnée par :

$$K_l(r_b, r_a; T) = \frac{m}{i\hbar T} \exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(r_b^2 + r_a^2)\right] I_l\left(\frac{mr_b r_a}{i\hbar T}\right) \tag{3.45}$$

On remplace la formule (3.45) dans (3.38) et on utilise la formule (3.34), On obtient la forme du propagateur libre

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a, T) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{m}{i\hbar T} \exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(r_b^2 + r_a^2)\right] I_l\left(\frac{mr_b r_a}{i\hbar T}\right) \exp\left[il(\theta_b - \theta_a)\right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right) \exp\left[\frac{im}{2\hbar T}\left[\left(r_b^2 + r_a^2\right) - 2r_b r_a \cos(\theta_b - \theta_a)\right]\right] \end{aligned} \tag{3.46}$$

Et qui se déduira comme

$$K(\mathbf{x}_b, \mathbf{x}_a, T) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right) \exp\left[\frac{im}{2\hbar T}(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)^2\right] \tag{3.47}$$

3.2.2 En trois dimensions

Dans ce cas, le propagateur est défini comme

$$\begin{aligned} K(r_b, r_a; T) &= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}} \int \prod_{j=1}^{N-1} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r_j^2 \sin\theta_j dr_j d\theta_j d\phi_j \\ &\quad \times \prod_{j=1}^{N} \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2 + r_{j-1}^2\right)\right] \exp\left[\frac{-imr_j r_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\cos\Psi_{j,j-1}\right] \end{aligned} \tag{3.48}$$

nous allons utiliser la formule suivante (section.8.534 ,p.980) ([2])

$$\exp\left(Z\cos\Psi\right) = \left(\frac{Z}{2}\right)^{-\upsilon} \Gamma\left(\upsilon\right) \sum_{l=0}^{\infty} \left(l+\upsilon\right) I_{l+\upsilon}\left(Z\right) C_l^{\upsilon}\left(\cos\Psi\right) \tag{3.49}$$

qui est valable pour tout $(\upsilon \neq 0, -1, -2, ..)$ où $I_\upsilon(Z)$ sont les fonctions de Bessel modifiées et $C_l^{\upsilon}(\cos\Psi)$ représentent les polynômes de Gegenbauer généralisant les polynômes de Legendre.

Pour nos les calculs, on identifie $\upsilon = \frac{1}{2}$, on aura alors :

$$\begin{aligned}\exp\left(Z\cos\Psi\right) &= \left(\frac{Z}{2}\right)^{-\frac{1}{2}}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\sum_{l=0}^{\infty}\left(l+\frac{1}{2}\right)I_{l+\frac{1}{2}}\left(Z\right)C_l^{\frac{1}{2}}\left(\cos\Psi\right)\\ &= \left(\frac{Z}{2\pi}\right)^{-\frac{1}{2}}\sum_{l=0}^{\infty}\left(l+\frac{1}{2}\right)I_{l+\frac{1}{2}}\left(Z\right)C_l^{\frac{1}{2}}\left(\cos\Psi\right)\\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2Z}}\sum_{l=0}^{\infty}\left(2l+1\right)I_{l+\frac{1}{2}}\left(Z\right)\left(P_l\cos\Psi\right) \qquad (3.50)\end{aligned}$$

où $C_l^{\frac{1}{2}}\left(\cos\Psi\right)=P_l(\cos\Psi)$ est un polynôme de Legendre de degré l en $\cos\Psi$

$$\exp\left[\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\cos\Psi_{j,j-1}\right]=\sqrt{\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2mr_jr_{j-1}}}\sum_{l_j=0}^{\infty}\left(2l_j+1\right)I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right)P_{l_j}(\cos\Psi_{j,j-1}) \qquad (3.51)$$

Le propagateur (3.48) devient alors :

$$\begin{aligned}K(r_b,r_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}}\int\prod_{j=1}^{N-1}\left(\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}r_j^2\sin\theta_jdr_jd\theta_jd\phi_j\right)\prod_{j=1}^{N}\exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right]\\ &\times\sqrt{\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2mr_jr_{j-1}}}\sum_{l_j=0}^{\infty}\left(2l_j+1\right)I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right)P_{l_j}(\cos\Psi_{j,j-1}) \qquad (3.52)\end{aligned}$$

Ou bien

$$\begin{aligned}K(r_b,r_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}}\sum_{l_1,l_2,..,l_N=0}^{\infty}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_0^{\infty}r_j^2dr_j\right]\prod_{j=1}^{N}\left(\sqrt{\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2mr_jr_{j-1}}}\right)\exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right]\\ &\times\prod_{j=1}^{N-1}\left[\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left(2l_j+1\right)I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right)P_{l_j}(\cos\Psi_{j,j-1})\sin\theta_jd\theta_jd\phi_j\right]\\ &\times...\left[\left(2l_N+1\right)I_{l_N+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right)P_{l_N}(\cos\Psi_{N,N-1})\right] \qquad (3.53)\end{aligned}$$

Qui peut se mettre aussi sous la forme :

$$\begin{aligned}
K(r_b, r_a; T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3N}{2}} \sum_{l_1,l_2,..,l_N=0}^{\infty}\left(\frac{1}{r_b r_a}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_0^{\infty} r_j dr_j\right]\prod_{j=1}^{N}\left(\sqrt{\frac{i\pi\hbar\varepsilon}{2mr_jr_{j-1}}}\right) \\
&\times \exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right] \\
&\times \prod_{j=1}^{N-1}\left[\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left(2l_j+1\right) I_{l_j+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right) P_{l_j}(\cos\Psi_{j,j-1})\sin\theta_j d\theta_j d\phi_j\right] \\
&\times ... \left[\left(2l_N+1\right) I_{l_N+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right) P_{l_N}(\cos\Psi_{N,N-1})\right] \qquad (3.54)
\end{aligned}$$

et à l'aide du théorème d'addition pour les harmoniques sphériques ([11]) :

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}^{*}\left(\vec{\Omega}^{(j-1)}\right) Y_{l,m}\left(\vec{\Omega}^{(j)}\right) = \frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\Psi_{j,j-1}) \qquad (3.55)$$

avec $\vec{\Omega}^{(j-1)} = \left(\theta_{n-1}, \phi_{n-1}\right)$ et $\vec{\Omega}^{(j)} = (\theta_n, \phi_n)$

$$P_l(\cos\Psi_{j,j-1}) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}\left(\theta_n,\phi_n\right) Y_{l,m}^{*}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right) \qquad (3.56)$$

le développement (3.50) devient :

$$\begin{aligned}
\exp\left(Z\cos\Psi\right) &= \left[2\pi\sqrt{\frac{2\pi}{Z}}\sum_{l=0}^{\infty} I_{l+\frac{1}{2}}\left(Z\right)\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}\left(\theta_n,\phi_n\right) Y_{l,m}^{*}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right)\right] \qquad (3.57) \\
&= \left[\sqrt{\frac{2i\varepsilon\hbar\pi}{mr_jr_{j-1}}}\sum_{l=0}^{\infty} I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right)\sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}\left(\theta_n,\phi_n\right) Y_{l,m}^{*}\left(\theta_{n-1},\phi_{n-1}\right)\right]
\end{aligned}$$

et en insérant cette derniére dans (3.52), on obtient :

$$\begin{aligned}
K(r_b, r_a; T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{i\hbar\varepsilon}\right)^{N}\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}}\sum_{l_1,l_2,..,l_N=0}^{\infty}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_0^{\infty} r_j dr_j\right]\prod_{j=1}^{N}\exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right] \\
&\times \sum_{l=0}^{\infty} I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right) I_{l_N+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_jr_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right) \\
&\times \sum_{m=-l_j}^{l_j} Y_{l_j,m_j}\left(\theta_j,\phi_j\right) Y_{l_j,m_j}^{*}\left(\theta_{j-1},\phi_{j-1}\right)\sin\theta_j d\theta_j d\phi_j \\
&\times \sum_{m=-l_N}^{l_N} Y_{l_N,m_N}\left(\theta_N,\phi_N\right) Y_{l,m}^{*}\left(\theta_{N-1},\phi_{N-1}\right) \qquad (3.58)
\end{aligned}$$

En procédant de la même manière que dans le cas deux dimansions, l'orthogonalité des harmoniques sphériques décrite par la relation :

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{l,m}(\theta,\phi)\, Y^{*}_{l',m'}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \tag{3.59}$$

nous permet alors de ramener le propagateur à la forme suivante :

$$K(r_b,r_a;T) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{4\pi}K_l(r_b,r_a;T)P_l(\cos\Psi_{a,b}) \tag{3.60}$$

et $\Psi_{a,b} = \cos(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a)$

Dans ce cas le propagateur radial est donné par l'expression intégrale de chemin suivante :

$$\begin{aligned} K_l(r_b,r_a;T) &= \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{i\hbar\varepsilon}\right)^N \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}}\left[\prod_{j=1}^{N-1}\int_0^{\infty} r_j dr_j\right] \\ &\quad \times\prod_{j=1}^{N} I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_j r_{j-1}}{\varepsilon\hbar}\right)\exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_j^2+r_{j-1}^2\right)\right] \end{aligned} \tag{3.61}$$

Cette intégrale de chemin peut encore être intégrée comme le cas deux dimensions suivant la même formule des fonctions de Bessel.

Pour l'ordre 1

$$\begin{aligned} K_l(r_0,r_2;2\varepsilon) &= \int r_1 dr_1 K_l(r_0,r_1;\varepsilon)K_l(r_1,r_2;\varepsilon) \\ &= \left(\frac{1}{r_0 r_2}\right)\left(\frac{m}{i\hbar\varepsilon}\right)\frac{m}{i\hbar\varepsilon}\sqrt{r_0 r_2}\exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_0^2+r_2^2\right)\right] \\ &\quad \times\int_0^{\infty} r_1 dr_1 \exp\left[\frac{im}{\varepsilon\hbar}r_1^2\right] I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_0}{\varepsilon\hbar}r_1\right) I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_2}{\varepsilon\hbar}r_1\right) \end{aligned} \tag{3.62}$$

on utilise la formule (7.11) avec

$$\frac{b^2+c^2}{4a} = \frac{m\left(r_0^2+r_2^2\right)}{4\hbar\varepsilon}$$

$$\frac{bc}{2a} = \frac{mr_0 r_2}{2\hbar\varepsilon}$$

ce qui donne immédiatement

$$\begin{aligned} K_l(r_0,r_2;2\varepsilon) &= \left(\frac{1}{r_0 r_2}\right)\left(\frac{m}{i\hbar\varepsilon}\right)\frac{m}{i\hbar\varepsilon}\sqrt{r_0 r_2}\exp\left[\frac{im}{2\varepsilon\hbar}\left(r_0^2+r_2^2\right)\right] \\ &\quad \times\frac{i\hbar\varepsilon}{2m}\exp\left[\frac{-im\left(r_0^2+r_2^2\right)}{4\hbar\varepsilon}\right] I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_0 r_2}{2\hbar\varepsilon}\right) \\ &= \left(\frac{1}{r_0 r_2}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{m}{2i\hbar\varepsilon}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\frac{1}{2\varepsilon}\left(r_0^2+r_2^2\right)\right] I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{-imr_0 r_2}{2\hbar\varepsilon}\right) \end{aligned} \tag{3.63}$$

et l'on voit dans la forme du propagateur la durée de temps ε est remplacée par 2ε. Par conséquent, une recurence s'impose et on a le résultat

$$\begin{aligned} K_l(r_b, r_a; N\varepsilon) &= \int dr_{N-1} r_{N-1} K_l(r_b, r_{N-1}; (N-1)\varepsilon) K_l(r_{N-1}, r_a; \varepsilon) \\ &= \frac{1}{2N} \frac{m}{i\hbar\varepsilon} \left(\frac{1}{r_b r_a}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \frac{1}{N\varepsilon} \left(r_b^2 + r_a^2\right)\right] I_{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{m r_b r_a}{i\hbar N\varepsilon}\right) \end{aligned} \tag{3.64}$$

avec $T = N\varepsilon$. Enfin, on obtient la forme du propagateur radial

$$K_l(r_b, r_a; T) = \left(\frac{m}{i\hbar T}\right) \left(\frac{1}{r_b r_a}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar T} \left(r_b^2 + r_a^2\right)\right] I_{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{m r_b r_a}{i\hbar T}\right) \tag{3.65}$$

Chapitre 4

La théorie de perturbation pour le propagateur

En mécanique quantique non relativiste dans sa version de formulation de Schrödinger, ou sur celle de Heisenberg, la théorie des perturbations peut être introduite comme schéma d'approximation qui permet d'étudier une interaction comme perturbation par rapport à une autre interaction considérée comme principale. Cette méthode peut être également employée dans le cadre de l'approche des intégrales de chemin de Feynman de façon très simple et avec une grande efficacité et comme nous allons le voir dans notre cas sa série de perturbation est convergente et peut être sommée.

Considérons le Lagrangien du systéme comme étant la somme de deux termes l'un dit principal ; libre (dans notre cas), dont on connait la solution et l'autre dit terme de perturbation, donné par :

$$L(x,\dot{x}) = L_0(x,\dot{x}) - \alpha V(x) = (\frac{m}{2})\dot{x}^2 - \alpha V(x) \tag{4.1}$$

à L_0 correspond le propagateur libre $K_0(x_b, x_a; T)$ et nous supposons que le terme de perturbation $\alpha V(x)$ faible par son coefficient α pour assurer la convergence du développement. Le propagateur total du systéme $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ s'écrira comme suit :

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \int D\left[x\left(t\right)\right]\exp[\frac{i}{\hbar}\int_0^T L(x,\dot{x})dt] \\ &= \int D\left[x\left(t\right)\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right]\exp\left[\frac{-i\alpha}{\hbar}\int_0^T V(x)dt\right] \end{aligned} \tag{4.2}$$

Développons l'exponentielle comme :

$$\exp\left[\frac{-i\alpha}{\hbar}\int_0^T V(x)dt\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\left(\int_0^T V(x)dt\right)^n \tag{4.3}$$

alors ceci nous permet de reécrire

$$\begin{aligned}K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \int D\left[x\left(t\right)\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^T \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right]\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n}{n!}\left(\int_0^T V(x)dt\right)^n\right] \\ &= K_0(x_b,t_b;x_a,t_a) + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n}{n!}K_n(x_b,t_b;x_a,t_a)\end{aligned} \tag{4.4}$$

où

$$K_n(x_b,t_b;x_a,t_a) = \int Dx\left[x\left(t\right)\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^T (\frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right)\left(\int_0^T V(x)dt\right)^n \tag{4.5}$$

et sachant que

$$\left(\int_{t_a}^{t_b} V dt\right)^n = n!\int_{t_a}^{t_b} dt_1 V(x_1)\int_0^{t_1} dt_2 V(x_2)....\int_0^{t_{n-1}} dt_n V(x_n) \tag{4.6}$$

où l'on pose $x_n = x(t_n), k = 1,2,...,n$, alors on aura

$$K_n(x_b,t_b;x_a,t_a) = \int Dx\left[x\left(t\right)\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^T (\frac{m}{2}\dot{x}^2 dt\right) n!\int_{t_a}^{t_b} dt_1\int_0^{t_1} dt_2...\int_0^{t_{n-1}} dt_n V(x_1)V(x_2)...V(x_n) \tag{4.7}$$

Insérons alors la discrétisation de l'intégrale de Riemann suivante

$$\int_{t_a}^{t_b} L_0(x,\dot{x})dt = \sum_{j=0}^{N} \int_{t_j}^{t_{j+1}} L_0(x,\dot{x})dt \tag{4.8}$$

ou bien

$$\int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt = \int_{t_n}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt_n + ...\int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt_2 + \int_{t_a}^{t_1} \frac{m}{2}\dot{x}^2 dt_1 \tag{4.9}$$

et celle de la mesure de Feynman suivante :

$$Dx\Big|_{t_a}^{t_b} = Dx\left[x\left(t\right)\right]\Big|_{t_n}^{t_b} dx_n Dx\left[x\left(t\right)\right]\Big|_{t_{n-1}}^{t_n} dx_{n-1}...dx_2 D\left[x\left(t\right)\right]\Big|_{t_1}^{t_2} dx_1 D\left[x\left(t\right)\right]\Big|_{t_a}^{t_1} \tag{4.10}$$

Alors nous aurons le développement suivant :

$$\begin{aligned} K_n(x_b,t_b;x_a,t_a) &= n!\int_{t_a}^{t_b} dt_n \int_{t_a}^{t_n} dt_{n-1}...\int_{t_a}^{t_3} dt_2 \int_{t_a}^{t_2} dt_1 \int \prod_{j=1}^{n} dx_j K_0(b,n)V(x_n)K_0(n,n-1) \\ &\quad \times ...V(x_2)K_0(2,1)V(x_n)K_0(1,a) \end{aligned} \tag{4.11}$$

avec $K_0(n,n-1)$ est le propagateur libre entre les points spatio-temporels (x_n,t_n) et (x_{n-1},t_{n-1}).

Enfin, on obtient la série de perturbation suivante :

$$\begin{aligned} K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= K_0(x_b,t_b;x_a,t_a) + \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n \int_{t_a}^{t_b} dt_n \int_{t_a}^{t_n} dt_{n-1}...\int_{t_a}^{t_3} dt_2 \int_{t_a}^{t_2} dt_1 \\ &\quad \times \int \prod_{j=1}^{n} dx_j K_0(b,n)V(x_n)K_0(n,n-1) \\ &\quad \times ...V(x_2)K_0(2,1)V(x_n)K_0(1,a) \end{aligned} \tag{4.12}$$

Dans le cas général, on procéde de la même manière pour un Lagrangien :

$$L_{tot} = L_1(x,\dot{x}) - \alpha_2 V_2(x) \tag{4.13}$$

et on aura, avec la notation $K_1(n,n-1)$ propagateur entre les points spatio-temporels (x_n,t_n) et (x_{n-1},t_{n-1}) dont le Lagrangian classique est $L_1(x,\dot{x})$, la formule suivante :

$$
\begin{aligned}
K_{tot}(x_b,t_b;x_a,t_a) &= K_1(x_b,t_b;x_a,t_a)+\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n\int_{t_a}^{t_b}dt_n\int_{t_a}^{t_n}dt_{n-1}...\int_{t_a}^{t_3}dt_2\int_{t_a}^{t_2}dt_1 \\
&\times\int\prod_{j=1}^{n}dx_jK_1(b,n)V_2(x_n)K_1(n,n-1) \\
&\times...V_2(x_2)K_1(2,1)V_2(x_n)K_1(1,a) \qquad (4.14)
\end{aligned}
$$

4.1 La théorie de perturbation pour la fonction de Green

La fonction de Green dépendante de l'énergie $G(x_b,x_a;E)$ est obtenue en passant à la transformée de Fourier :

$$G(x_b,x_a;E)=\int_0^{\infty}\exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right)K(x_b,x_a;T)dT \qquad (4.15)$$

Pour obtenir la série de perturbation associée à cette fonction de Green, on suppose le système indépendant du temps et on applique la transformation de Fourier, on obtient :

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\infty}dT\exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right)K(x_b,t_b;x_a,t_a) &= \int_0^{\infty}dT\exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right)K_0(x_b,t_b;x_a,t_a) \\
&+\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n\int_0^{\infty}dT\exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right) \\
&\times\int_0^{T}dt_n\int_0^{t_n}dt_{n-1}...\int_0^{t_3}dt_2\int_0^{t_2}dt_1 \\
&\times\int\prod_{j=1}^{n}dx_jK_0(b,n)V(x_n)K_0(n,n-1) \\
&\times...V(x_2)K_0(2,1)V(x_n)K_0(1,a) \qquad (4.16)
\end{aligned}
$$

Remarquons qu'on a une transformée d'un produit de convolution comme suit (dans l'écriture qui suit on ne s'occupe que de la variable temps, les variables espaces sont transparente dans cette transformée)

$$\int_0^{\infty}dT\exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right)\int_0^{T}dt_nK_0(T-t_n)F(t_n) \qquad (4.17)$$

où $K_0(T-t_n)$ est le propagateur libre et $F(t_n)$ donnée par (le nombre d'intégration figurant dans $F(t_n)$ est $(n-1)$

$$F(t_n) = \int_0^{t_n} dt_n K_0(t_n - t_{n-1}) F(t_{n-1}) \tag{4.18}$$

qui est lui même un produit de convolution. Le théorème de convolution nous permet alors d'effectuer cette transformée en multipliant les images successives et on obtient le développement en série de perturbation suivant pour la fonction de Green écrit comme suit :

$$G(x_b, x_a; E) = G_0(x_b, x_a; E) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n G_n(x_b, x_a; E) \tag{4.19}$$

avec

$$G_0(x_b, x_a; E) = \int K_0(x_b, t_b; x_a, t_a) \exp\left(\frac{iET}{\hbar}\right) dT \tag{4.20}$$

et où $G_n(x_b, x_a; E)$ est la transformée de Fourier du $K_n(x_b, x_a; T)$ donnée par :

$$G_n(x_b, x_a; E) = \int \prod_{j=0}^{n} G_0(x_{j+1}, x_j; E) \prod_{j=1}^{n} V(x_j) dx_j \tag{4.21}$$

4.2 Application :

4.2.1 Potentiel delta $V(x) = \delta(x)$

Dans ce cas on considère un potentiel ponctuel donné par la fonction de Dirac $V(x) = \delta(x)$. La fonction de Green qui est transformée de Fourier de $K_0(x_b, t_b; x_a, t_a)$ (voir APP1)

$$G_0(x_b, x_a; E) = \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(ik\left|x_b - x_a\right|\right) \text{ avec; } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{4.22}$$

A partir de cette fonction de Green, calculons la fonction de Green du potentiel delta en appliquant l'expression (4.21) :

1) Pour le premier ordre on a

$$\begin{aligned} G_1(x_b, x_a; E) &= \int G_0(x_b, x_1; E) V(x_1)\ G_0(x_1, x_a; E) dx_1 \\ &= \int G_0(x_b, x_1; E) \delta(x_1)\ G_0(x_1, x_a; E)\ dx_1 \end{aligned} \tag{4.23}$$

on utilise les propriétés de la fonction delta : $\int \delta(x)dx = 1$ et $\int \delta(x)f(x)dx = f(0)$

$$\begin{aligned} G_1(x_b, x_a; E) &= \int G_0(x_b, 0; E)G_0(0, x_a; E)\delta(x_1)\ dx_1 \\ &= G_0(x_b, 0; E)G_0(0, x_a; E) \end{aligned} \tag{4.24}$$

2) Pour le deuxieme ordre :

$$\begin{aligned} G_2(x_b, x_a; E) &= \int \prod_{j=0}^{2} G_0(x_{j+1}, x_j; E) \prod_{j=1}^{2} V(x_j)dx_j \\ &= \int G_0(x_b, x_2; E)\delta(x_2)\ G_0(x_2, x_1; E)\delta(x_1)G_0(x_1, x_a; E)dx_2dx_1 \\ &= G_0(x_b, 0; E)G_0(0, 0; E)G_0(0, x_a; E) \end{aligned} \tag{4.25}$$

3) Pour le troisiéme ordre même chose et on obtient :

$$G_3(x_b, x_a; E) = G_0(x_b, 0; E)\left(G_0(0, 0; E)\right)^2 G_0(0, x_a; E) \tag{4.26}$$

et par récurrence, le nième ordre est donné par

$$G_n(x_b, x_a; E) = G_0(x_b, 0; E)(G_0(0, 0; E))^{n-1}G_0(0, x_a; E) \tag{4.27}$$

En remplaçant $G_0(0, x_a; E), G_0(x_b, 0; E)$ et $G_0(0, 0; E)$, et utilisant (4.22), On obtient :

$$\begin{aligned} G_n(x_b, x_a; E) &= \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(ik|x_b|) \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(ik|x_a|) \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{n-1}{2}} \\ &= \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{n+1}{2}} \exp(ik\varepsilon)\ , \qquad \varepsilon = |x_b| + |x_a| \end{aligned} \tag{4.28}$$

Ainsi, la fonction de Green totale

$$G(x_b, x_a; E) = G_0(x_b, x_a; E) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{n+1}{2}} \exp(ik\varepsilon) \tag{4.29}$$

Considérons maintenant le potentiel $W(x)$ ayant la forme particulière suivante $W(x) = V(x) + \alpha\delta(x)$

où l'on a utilisé la formule (4.27)

$$
\begin{aligned}
G^{(\delta_0)}(x_b, x_a; E) &= G^{(V)}(x_b, x_a; E) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n G_n(x_b, x_a; E) \\
&= G^{(V)}(x_b, x_a; E) + \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right) G^{(V)}(x_b, 0; E) \\
&\quad \times \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i\alpha}{\hbar} G^{(V)}(0, 0; E)\right)^{n-1} G^{(V)}(0, x_a; E)
\end{aligned} \tag{4.30}
$$

on utilise

$$
\sum_{n=1}^{\infty} q^{n-1} = \frac{1}{1-q} \tag{4.31}
$$

Alors

$$
G^{(\delta_0)}(x_b, x_a; E) = G^{(V)}(x_b, x_a; E) + \frac{G^{(V)}(x_b, 0; E) G^{(V)}(0, x_a; E)}{\frac{i\hbar}{\alpha} - G^{(V)}(0, 0; E)} \tag{4.32}
$$

En utilisant le théorème de convolution des transformations de Fourier, la fonction de Green associée au potentiel $W(x) = V(x) + \alpha\delta(x - a)$ s'écrit sous la forme

$$
G^{(\delta_a)}(x_b, x_a; E) = G^{(V)}(x_b, x_a; E) + \frac{G^{(V)}(x_b, a; E) G^{(V)}(a, x_a; E)}{\frac{i\hbar}{\alpha} - G^{(V)}(a, a; E)} \tag{4.33}
$$

et **Pour** $W(x) = V(x) + \sum_{n=1}^{2} \alpha_n \delta(x - a_n)$

$$
G^{(\delta_{a_1}, \delta_{a_2})}(x_b, x_a; E) = \frac{\begin{vmatrix} G^{(V)}(x_b, x_a; E) & G^{(V)}(x_b, a_1; E) & G^{(V)}(x_b, a_2; E) \\ G^{(V)}(a_1, x_a; E) & \frac{i\hbar}{\alpha_1} - G^{(V)}(a_1, a_1; E) & G^{(V)}(a_1, a_2; E) \\ G^{(V)}(a_2, x_a; E) & G^{(V)}(a_2, a_1; E) & \frac{i\hbar}{\alpha_2} - G^{(V)}(a_2, a_2; E) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{i\hbar}{\alpha_1} - G^{(V)}(a_1, a_1; E) & G^{(V)}(a_1, a_2; E) \\ G^{(V)}(a_2, a_1; E) & \frac{i\hbar}{\alpha_2} - G^{(V)}(a_2, a_2; E) \end{vmatrix}} \tag{4.34}
$$

par réccurence,

Pour $W(x) = V(x) + \sum_{n=1}^{n} \alpha_n \delta(x - a_n)$

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{\begin{vmatrix} G^{(V)}(x_b, x_a) & G^{(V)}(x_b, a_1) & .... & G^{(V)}(x_b, a_n) \\ G^{(V)}(a_1, x_a) & \frac{i\hbar}{\alpha_1} - G^{(V)}(a_1, a_1) & .... & G^{(V)}(a_1, a_n) \\ : & & & \\ : & & & \\ G^{(V)}(a_n, x_a) & G^{(V)}(a_n, a_1) & .... & \frac{i\hbar}{\alpha_n} - G^{(V)}(a_n, a_n) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \frac{i\hbar}{\alpha_1} - G^{(V)}(a_1, a_1) & .... & G^{(V)}(a_1, a_n) \\ . & & \\ . & & \\ . & & \\ G^{(V)}(a_n, a_1) & .... & \frac{i\hbar}{\alpha_n} - G^{(V)}(a_n, a_n) \end{vmatrix}} \tag{4.35}$$

4.2.2 potentiel quadratique inverse

Soit le potentiel quadratique inverse suivant :

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{x^2} & , x > 0 \\ \infty & , x < 0 \end{cases}$$

la fonction de Green est donnée par :

$$G_0(x_b, x_a; E) = \sqrt{x_b x_a}(\frac{m\pi}{i\hbar}) J_{\frac{1}{2}}(kr_<) H^{(1)}_{\frac{1}{2}}(kr_>) \tag{4.36}$$

avec , $r_> = \max(r_b, r_a)$ et $r_< = \min(r_b, r_a)$.$H^{(1)}_{\upsilon}(z)$ et $J_{\upsilon}(z)$ sont les fonctions de Hankel et Bissel

alors $G_0(x_b, x_a; E)$ écrit comme suit :

$$G_0(x_b, x; E) = \frac{m}{i\hbar} (x_b x_a)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\upsilon \frac{\upsilon \sinh \upsilon\pi}{\upsilon^2 + \frac{1}{4}} H^{(1)}_{i\upsilon}(kx_b) H^{(1)*}_{i\upsilon}(kx_a) \tag{4.37}$$

on utilise l'expression (4.21)

pour le premier ordre

$$\begin{aligned} G_1(x_b, x_a; E) &= (\frac{m}{i\hbar})^2 (x_b x_a)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty d\upsilon_1 \frac{\upsilon_1 \sinh \upsilon_1\pi}{\upsilon_1^2 + \frac{1}{4}} H^{(1)}_{i\upsilon_1}(kx_b) H^{(1)*}_{i\upsilon_2}(kx_a) \\ &\times d\upsilon_2 \frac{\upsilon_2 \sinh \upsilon_2\pi}{\upsilon_2^2 + \frac{1}{4}} \frac{dx}{x} H^{(1)*}_{i\upsilon_1}(kx) H^{(1)}_{i\upsilon_2}(kx) \end{aligned} \tag{4.38}$$

pour effectuer cet calcule on utilise la relation d'orthogonalité ([2])

$$\int_0^\infty \frac{dx}{x} H_{iv}^{(1)*}(kx) H_{iv'}^{(1)}(kx) = \frac{2\delta\left(\upsilon - \upsilon'\right)}{\upsilon \sinh \upsilon\pi} \tag{4.39}$$

et on obtient

$$G_1(x_b, x_a; E) = 2(\frac{m}{i\hbar})^2 \left(x_b x_a\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dv \frac{\upsilon \sinh \upsilon\pi}{(\upsilon^2 + \frac{1}{4})^2} H_{iv}^{(1)}(kx_b) H_{iv}^{(1)*}(kx_a) \tag{4.40}$$

par récurrence,on détermine pour l'élément $G_n(x_b, x_a; E)$

$$\begin{aligned} G_n(x_b, x_a; E) &= \int_0^\infty G_0(x_b, x_n; E) G_{n-1}(x_n, x_a; E) V(x_n) dx_n \\ &= (\frac{2m}{i\hbar})^n (\frac{m}{i\hbar}) \frac{(x_b x_a)^{\frac{1}{2}}}{2} \int_0^\infty d\upsilon_2 \frac{\upsilon_2 \sinh \upsilon_2\pi}{\upsilon_2^2 + \frac{1}{4}} H_{i\upsilon_2}^{(1)}(kx_b) H_{i\upsilon_1}^{(1)*}(kx_a) \\ &\quad \times d\upsilon_1 \frac{\upsilon_1 \sinh \upsilon_1\pi}{(\upsilon_1^2 + \frac{1}{4})^n} \frac{dx_n}{x_n} H_{i\upsilon_2}^{(1)*}(kx_n) H_{i\upsilon_1}^{(1)}(kx_n) \end{aligned} \tag{4.41}$$

où on a utilisé la formule (4.39)

Donc, le nième ordre est donné par

$$G_n(x_b, x_a; E) = (\frac{2m}{i\hbar})^{n+1} \frac{(x_b x_a)^{\frac{1}{2}}}{2} \int_0^\infty dv \frac{\upsilon \sinh \upsilon\pi}{(\upsilon^2 + \frac{1}{4})^{n+1}} H_{iv}^{(1)}(kx_b) H_{iv}^{(1)*}(kx_a) \tag{4.42}$$

On remplace cette relation dans (4.19) et on ajoute la série géométrique résultante pour obtenir la fonction complète de fonction de Green, on obtient :

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar} \left(x_b x_a\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dv \frac{\upsilon \sinh \upsilon\pi}{\upsilon^2 + \frac{1}{4} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}} H_{iv}^{(1)}(kx_b) H_{iv}^{(1)*}(kx_a) \tag{4.43}$$

4.2.3 Potentiel Coulombien

L'interaction Coulombienne est décrite par le Lagrangien suivant :

$$\begin{aligned} L &= L_0 + \frac{Ze^2}{r} \\ &= \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{Ze^2}{r} \end{aligned} \tag{4.44}$$

Suivant la téchnique des perturbations, on considère le potentiel coulombien comme étant le terme perturbatif ce qui nous laisse écrire :

$$K(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a;T)=K_0(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a;T)+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{iZe^2}{\hbar}\right)^n\int D\left[x(t)\right]\int_0^T\frac{dt_1}{r_1}...\int_0^T\frac{dt_n}{r_n}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}\int_0^T\dot{x}^2dt\right) \tag{4.45}$$

Ou bien

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a;T) &= K_0(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a;T)+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{iZe^2}{\hbar}\right)^n\int_0^T dt_n\int_0^{t_n}dt_{n-1} \\ &\times...\int_0^{t_2}dt_1\int\prod_{j=0}^{n}K_0\left(\mathbf{x}_{j+1},t_{j+1}|\mathbf{x}_j,t_j\right)\prod_{j=1}^{n}\frac{dx_j}{r_j} \end{aligned} \tag{4.46}$$

Pour éviter les intégrations sur le temps, on passe à la fonction de Green par la transformation de Fourier :

$$G(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a;E)=G_0(\mathbf{x}_b,\mathbf{x}_a;E)+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{iZe^2}{\hbar}\right)^n\int\prod_{j=0}^{n}G_0(\mathbf{x}_{j+1},\mathbf{x}_j;E)\prod_{j=1}^{n}\frac{d\mathbf{x}_j}{r_j} \tag{4.47}$$

On note que pour le cas du potentiel central, dépendant uniquement de r, on peut introduire la forme séparée par l'intermédiaire des harmoniques sphériques : (voir APP2)

la fonction de Green libre est donnée comme :

$$G_0(x_b,x_a;E)=\sum_{l,m}Y_{lm}^*(x_a)Y_{lm}(x_b)G_{0l}(r_b,r_a;E) \tag{4.48}$$

Où $G_{0l}(r_b,r_a;E)$ est la fonction de Green radiale :

$$G_{0l}(r_b,r_a;E)=\frac{m}{i\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m(r_a^2+r_b^2)}{2T}\right)+ET\right]I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{mr_ar_b}{i\hbar T}\right)dT \tag{4.49}$$

qui est égale à

$$G_{0l}(r_b,r_a;E)=\frac{m\pi}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}J_{1+\frac{1}{2}}(kr_<)H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(kr_>) \tag{4.50}$$

Avec, $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $r_>=\max(r_b,r_a)$ et $r_<=\min(r_b,r_a)$. $H_\upsilon^{(1)}(z)$ et $J_\upsilon(z)$ sont les fonctions de Hankel et Bissel.

Alors pour $G_l(r_b,r_a;E)$

$$G_l(r_b,r_a;E)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n G_{nl}(r_b,r_a;E) \tag{4.51}$$

Avec

$$G_{nl}(r_b, r_a; E) = \int_0^{\infty} \left(\prod_{j=1}^{n} r_j dr_j \right) \prod_{j=0}^{n} G_{0l}(r_{j+1}, r_j; E) \tag{4.52}$$

A fin d'effectuer le calcul de la série des perturbation, la forme de $G_{0l}(r_b, r_a; E)$ dans l'équation (4.50) n'est pas approprié pour effectuer les intégrations radiales . Nous introduisons une représentation intégrale alternative pour le produit des fonctions de Hankel et Bessel dans (4.50) ,on aura

$$G_{0l}(r_b, r_a; E) = \frac{2m}{i\hbar} \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \int_0^{\infty} g_l(r_b, r_a, \omega) d\omega \tag{4.53}$$

Avec

$$g_l(r_b, r_a, \omega) = \frac{\exp\left[ik\left(r_b + r_a\right)\coth\omega\right]}{\sinh\omega} I_{2l+1}\left(\frac{2k\sqrt{r_a r_b}}{i\sinh\omega}\right) \tag{4.54}$$

Pour le premier terme, (voir APP3)

$$\begin{aligned} G_{1l}(r_b, r_a; E) &= \int_0^{\infty} r dr G_{0l}(r_b, r; E) G_{0l}(r, r_a; E) \\ &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right) \int_0^{\infty} \omega g_l(r_b, r_a; \omega) d\omega \end{aligned} \tag{4.55}$$

Avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Pour le deusiéme terme ;

$$\begin{aligned} G_{2l}(r_b, r_a; E) &= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} r_1 dr_1 r_2 dr_2 G_{0l}(r_b, r_1; E) G_{0l}(r_1, r_2; E) G_{0l}(r_2, r_a; E) \\ &= \left(\frac{m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^2 \int_0^{\infty} \omega^2 g_l(r_b, r_a, \omega) d\omega \end{aligned} \tag{4.56}$$

et par récurrence on obtient pour $G_{nl}(r_b, r_a; E)$:

$$\begin{aligned} G_{nl}(r_b, r_a; E) &= \int_0^{\infty} r_n dr_n G_{0l}(r_b, r_n; E) G_{(n-1)l}(r_n, r_a; E) \\ &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^{n-1} \frac{1}{(n-1)!} \int_0^{\infty} dr_n \int_0^{\infty} d\omega_2 \\ &\quad \times \int_0^{\infty} d\omega_1 \omega_1^{n-1} g_l(r_n, r_a, \omega_1) g_l(r_b, r_n, \omega_1) \end{aligned} \tag{4.57}$$

on pose

$$\begin{cases} \Omega = \omega_1 + \omega_2 \\ \omega = \omega_1 \end{cases} \quad , \text{ avec } 0 < \Omega < \infty \text{ , } 0 < \omega < \Omega$$

Qui peut se mettre aussi comme suit :

$$\begin{aligned} G_{nl}(r_b, r_a; E) &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^n \frac{1}{(n-1)!} \int_0^\infty d\Omega g_l(r_n, r_a, \Omega) \int_0^\Omega \omega^{n-1} d\omega \\ &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^n \frac{1}{n(n-1)!} \int_0^\infty d\Omega g_l(r_n, r_a, \Omega) \Omega^n \\ &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^n \frac{1}{n!} \int_0^\infty \Omega^n g_l(r_b, r_a, \Omega) d\Omega \end{aligned} \tag{4.58}$$

Alors,

$$G_{nl}(r_b, r_a; E) = \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^n \frac{1}{n!} \int_0^\infty \omega^n g_l(r_b, r_a, \omega) d\omega \tag{4.59}$$

On remplace dans (4.51) on trouve :

$$\begin{aligned} G_l(r_b, r_a; E) &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \sum_{n=0}^\infty \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n \left(\frac{2m}{\hbar k}\right)^n \frac{1}{n!} \int_0^\infty \omega^n g_l(r_b, r_a, \omega) d\omega \\ &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \int \exp\left(\frac{2m\alpha\omega}{i\hbar^2 k}\right) g_l(r_b, r_a, \omega) d\omega \end{aligned} \tag{4.60}$$

Pour évaluer ces intégrales dans (4.60),on utilise (la formule (4), section 6.669,p.716) ([2]) :

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty dx \exp(2\mu x - t(a+b)\coth x) I_{2\nu}(2t \cosh x (ab)^{\frac{1}{2}}) \cosh x \\ &= \frac{\Gamma\left(\nu - \mu + \frac{1}{2}\right)}{2t(ab)^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(2\nu + 1\right)} W_{\nu\mu}(2ta) M_{\nu\mu}(2tb) \end{aligned} \tag{4.61}$$

Où $W_{\nu\mu}$et $M_{\nu\mu}$ sont les fonctions de Whittaker avec $a \succ b$, $\operatorname{Re}\nu \succ 0, \operatorname{Re}\left(\nu - \mu + \frac{1}{2}\right) \succ 0,$

$$\begin{aligned} G_l(r_b, r_a; E) &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \int_0^\infty d\omega \exp\left(\frac{2m\alpha\omega}{i\hbar^2 k} + ik\left(r_b + r_a\right)\coth\omega\right) \\ &\quad \times I_{2l+1}\left(-2ik\sqrt{r_a r_b}\cosh\omega\right)\cosh\omega \end{aligned} \tag{4.62}$$

par conséquent, (4.62) est écrit comme suit :

$$G_l(r_b, r_a; E) = \left(\frac{2m}{i\hbar}\right) \frac{1}{\sqrt{r_a r_b}} \frac{\Gamma\left(l + \frac{1}{2} - \mu + \frac{1}{2}\right)}{-2ik(r_b r_a)^{\frac{1}{2}}\Gamma\left(2l + 1 + 1\right)} W_{\nu, l+\frac{1}{2}}(-2ikr_b) M_{\nu, l+\frac{1}{2}}(-2ikr_a) \quad (4.63)$$

Donc la fonction de Green radiale $G_l(r_b, r_a; E)$ prend la forme compacte finale suivante :

$$G_l(r_b, r_a; E) = \frac{m}{\hbar k} \frac{\Gamma\left(l + 1 - \nu\right)}{r_b r_a (2l + 1)!} W_{\nu, l+\frac{1}{2}}(-2ikr_b) M_{\nu, l+\frac{1}{2}}(-2ikr_a) \quad (4.64)$$

avec ; $\mu = i(\frac{m\alpha^2}{2E\hbar^2})^{\frac{1}{2}}$ et $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

Chapitre 5

Méthode générale

Dans les sections précédentes, on a réussit à présenter brièvement la série des perturbations pour obtenir les propagateurs exacts qui correspondent aux trois potentiels. Cela suggére qu'il pourrait être possible de parvenir à un schéma général de sommation de la série Feynman-dyson.

Dans cette section, on va développer une formulation systématique à cet effet.

Tout d'abord, nous rappelons que la fonction de Green dépendante de l'énergie $G(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E)$ associée au propagateur de Feynman $K(\vec{q}_b, \vec{q}_a; T)$ peut être représentée par la série de perturbations (4.19). Puisque G_0 est la fonction de Green pour la particule libre, il vérifie l'équation différentielle suivante :

$$\left[\nabla_q^2 + k^2\right] G_0(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) = \frac{2im}{\hbar} \delta\left(\vec{q}_b - \vec{q}_a\right) \tag{5.1}$$

On considére l'opérateur $\hat{B}$ défini par comme :

$$\hat{B}\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) = \frac{-i}{\hbar}\left[V(\vec{q}_b)V(\vec{q}_a)\right]^{\frac{1}{2}} G_0(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) \tag{5.2}$$

Supposons sans nuire à la génaralité que $V(\vec{q}) > 0$ pour tout $\vec{q}$. Avec cette notation, la série de Feynman-Dyson en (4.19) est réécrit comme

$$\begin{aligned}
G_n\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E\right) &= \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 ... d\vec{q}_{n-1} d\vec{q}_n G_0\left(\vec{q}_b, \vec{q}_1; E\right) V\left(\vec{q}_1\right) G_0\left(\vec{q}_1, \vec{q}_2; E\right) V\left(\vec{q}_2\right) \\
&\quad \times ... G_0\left(\vec{q}_{n-1}, \vec{q}_n; E\right) V\left(\vec{q}_n\right) G_0\left(\vec{q}_n, \vec{q}_a; E\right) \\
&= (i\hbar)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{V\left(x_b\right) V\left(x_a\right)}} \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 ... d\vec{q}_{n-1} d\vec{q}_n \frac{-i}{\hbar} \sqrt{V\left(\vec{q}_b\right) V\left(\vec{q}_1\right)} G_0\left(\vec{q}_b, \vec{q}_1; E\right) \\
&\quad \times \frac{-i}{\hbar} \sqrt{V\left(\vec{q}_1\right) V\left(\vec{q}_2\right)} G_0\left(\vec{q}_1, \vec{q}_2; E\right) ... \frac{-i}{\hbar} \sqrt{V\left(\vec{q}_{n-1}\right) V\left(\vec{q}_n\right)} G_0\left(\vec{q}_{n-1}, \vec{q}_n; E\right) \\
&\quad \times \frac{-i}{\hbar} \sqrt{V\left(\vec{q}_n\right) V\left(\vec{q}_a\right)} G_0\left(\vec{q}_n, \vec{q}_a; E\right) \qquad (5.3)
\end{aligned}$$

ou bien

$$G_n\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E\right) = (i\hbar)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{V\left(\vec{q}_b\right) V\left(\vec{q}_a\right)}} \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 ... d\vec{q}_{n-1} d\vec{q}_n \hat{B}\left(\vec{q}_b, \vec{q}_1\right) \hat{B}\left(\vec{q}_1, \vec{q}_2\right) ... \hat{B}\left(\vec{q}_n, \vec{q}_a\right) \qquad (5.4)$$

où on a utilisé la notation du produit des $\hat{B}$ suivante :

$$\hat{B}^n\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) = \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 ... d\vec{q}_{n-1} d\vec{q}_n \hat{B}\left(\vec{q}_b, \vec{q}_1\right) \hat{B}\left(\vec{q}_1, \vec{q}_2\right) ... \hat{B}\left(\vec{q}_n, \vec{q}_a\right) \qquad (5.5)$$

Donc on pourra écrire :

$$G(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) = \frac{i\hbar}{\alpha} \frac{1}{\sqrt{V\left(\vec{q}_b\right) V\left(\vec{q}_a\right)}} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \hat{B}^n\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) \qquad (5.6)$$

ou bien formellement

$$G(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) = i\hbar \left[V\left(\vec{q}_b\right) V\left(\vec{q}_a\right)\right]^{\frac{-1}{2}} \left[\frac{\hat{B}}{\left(I - \alpha\hat{B}\right)}\right] \left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) \qquad (5.7)$$

avec l'opérateur formelle $\dfrac{\alpha\hat{B}}{\left(I - \alpha\hat{B}\right)}$ donné par

$$\left[\frac{\alpha\hat{B}}{\left(I - \alpha\hat{B}\right)}\right] \left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \hat{B}^n\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) \qquad (5.8)$$

Soit le développement spectral suivant pour l'opérateur $\hat{B}$

$$\hat{B}\left(\vec{q}_b, \vec{q}_a\right) = \sum_{\{\mu\}} \mu \varphi_\mu\left(\vec{q}_b\right) \varphi_\mu^*\left(\vec{q}_a\right) \qquad (5.9)$$

où $\varphi_\mu(x)$ sont les fonctions propre normalisées du noyau $\hat{B}$ correspondant à la valeur propre μ (avec μ pouvant être continu)

$$\begin{aligned} G(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) &= i\hbar \left[V(\vec{q}_b)V(\vec{q}_a)\right]^{\frac{-1}{2}} \frac{\hat{B}}{I - \alpha\hat{B}} \\ &= \frac{i\hbar}{\alpha} \left[V(\vec{q}_b)V(\vec{q}_a)\right]^{\frac{-1}{2}} \sum_{\{\mu\}} \left(\frac{\alpha\mu}{I - \alpha\mu}\right) \varphi_\mu(\vec{q}_b)\, \varphi_\mu^*(\vec{q}_a) \end{aligned} \tag{5.10}$$

L'équation de la valeur propre du noyau $\hat{B}$ écrit comme :

$$\int \hat{B}(\vec{q}_b, \vec{q}_a)\, \varphi_\mu(\vec{q}_a)\, dq_a = \mu\varphi_\mu(\vec{q}_b) \tag{5.11}$$

Puisque φ_μ sont orthonormés donc :

$$\int \varphi_\mu^*(\vec{q})\, \varphi_{\mu'}(\vec{q})\, dq = \delta_{\mu\mu'} \tag{5.12}$$

on définit

$$\Psi(\vec{q}) = \frac{\varphi(\vec{q})}{\sqrt{V(\vec{q})}} \tag{5.13}$$

et on utilise la forme (5.2), l'equation (5.11) prend alors la forme :

$$\frac{-i}{\hbar} \int \left[V(\vec{q}_b)V(\vec{q}_a)\right]^{\frac{1}{2}} G_0(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) \Psi_\mu(\vec{q}_a) \sqrt{V(\vec{q}_a)} dq_a = \mu\Psi_\mu(\vec{q}_b) \sqrt{V(\vec{q}_b)} \tag{5.14}$$

ou bien

$$\frac{-i}{\hbar} \int G_0(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E) V(\vec{q}_a)\, \Psi_\mu(\vec{q}_a)\, dq_a = \mu\Psi_\mu(\vec{q}_b) \tag{5.15}$$

L'expression de la fonction de Green se modifie comme suite :

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{i\hbar}{\alpha} \sum_\mu \left(\frac{\alpha\mu}{1 - \alpha\mu}\right) \Psi_\mu(\vec{q}_b)\, \Psi_\mu^*(\vec{q}_a) \tag{5.16}$$

Puisque $G_0(x_b, x_a; E)$ est la fonction de Green de l'équation de Schrodinger satisfait (5.1). alors l'équation (5.15) est tronsformée en une équation différentielle :

$$\frac{-i}{\hbar} \left[\nabla_q^2 + k^2\right] \int d\vec{q}_a G_0(\vec{q}_b, \vec{q}_a; E)\, V(\vec{q}_a)\, \Psi_\mu(\vec{q}_a) = \mu \left[\nabla_q^2 + k^2\right] \Psi_\mu(\vec{q}_b) \tag{5.17}$$

on utilise la relation (5.1), on obtient

$$\frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{q}_a \delta(\vec{q}_b - \vec{q}_a)\, V(\vec{q}_a)_\mu(\vec{q}_a) = \mu \left[\nabla_q^2 + k^2\right] \Psi_\mu(\vec{q}_b) \tag{5.18}$$

ou bien

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{q}_b)\, \Psi_\mu(\vec{q}_b) = \mu \left[\nabla_q^2 + k^2\right] \Psi_\mu(\vec{q}_b) \tag{5.19}$$

Enfin on obtient :

$$\left[\nabla_q^2 + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2\mu} V(\vec{q}_b)\right] \Psi_\mu(\vec{q}_b) = 0 \tag{5.20}$$

Il faut noter que la dernière équation (5.20)est très similaire à l'équation de Schrodinger.

5.1 Application

5.1.1 Potentiel delta $V(x) = \delta(x)$

Concernant les potentiels il n'est pas possible d'extraire le noyau défini par la relation (5.7) du fait que la condition $V(\times) > 0$ qui a été clairement transgressée.

d'où le noyau donné par la relation (5.2) est mal définie , cette difficulté il peut être contournée par une redéfinition d'un zéro sur l'échelle énergétique.

Donc $\hat{B}_1(x, y)$ écrit comme :

$$\hat{B}_1(x, y) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right) G_0(x, y; E)\, \delta(y) \tag{5.21}$$

la fonction de Green écrit comme suit :

$$\begin{aligned} G_n(x_b, x_a; E) &= \int \prod_{j=0}^{n} G_0(x_{j+1}, x_j; E) \prod_{j=1}^{n} V(x_j)\, dx_j \\ &= (i\hbar)^n \int \left(\frac{-i}{\hbar}\right) G_0(x_b, x_1; E)\, \delta(x_1)\, dx_1 \left(\frac{-i}{\hbar}\right) G_0(x_1, x_2; E)\, V(x_2)\, dx_2 \\ &\quad \times ... \left(\frac{-i}{\hbar}\right) G_0(x_{n-1}, x_n; E)\, V(x_{n-1})\, dx_{n-1} G_0(x_n, x_a; E)\, dx_n \\ &= (i\hbar)^n \int \hat{B}_1(x_b, x_1)\, \hat{B}_1(x_1, x_2)\, dx_1 \\ &\quad \times ... \hat{B}_1(x_{n-1}, x_n)\, dx_{n-1} G_0(x_n, x_a; E)\, dx_n \end{aligned} \tag{5.22}$$

où on a utilisé la notation (5.5)

Donc

$$G_n(x_b, x_a; E) = (i\hbar)^n \int B_1^n(x_b, x_n)\, G_0(x_n, x_a; E)\, dx_n \tag{5.23}$$

en remlace la relation(5.23) dans (4.19) devient

$$\begin{aligned} G(x_b, x_a; E) &= G_0(x_b, x_a; E) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)^n (i\hbar)^n \int \hat{B}_1^n(x_b, x_n)\, G_0(x_n, x_a; E)\, dx_n \\ &= G_0(x_b, x_a; E) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{B}_1^n(x_b, x_n)\, G_0(x_n, x_a; E)\, dx_n \end{aligned} \tag{5.24}$$

où bien

$$G(x_b, x_a; E) = G_0(x_b, x_a; E) + \int_{-\infty}^{+\infty} A_1(x_b, y)\, G_0(y, x_a; E)\, dy \tag{5.25}$$

Avec (voir APP4)

$$
\begin{aligned}
A_1(x,y) &= \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \hat{B}_1^n(x,y) = \left\{\alpha \hat{B}_1 \left[I - \alpha \hat{B}_1\right]^{-1}\right\}(x,y) \\
&= \left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right) \frac{G_0(x,0;E)\,\delta(y)}{1 + \frac{\alpha i}{\hbar} G_0(0,0;E)}
\end{aligned} \tag{5.26}
$$

5.1.2 Potentiel quadratique inverse

Nous dérivons l'expression pour la fonction de Green pour le potentiel $V(x) = \frac{1}{x^2}$. L'équation (5.20)écrit comme :

$$
\left[\nabla_x^2 + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2 \mu} \frac{1}{x^2}\right] \Psi_\mu(x) = 0 \tag{5.27}
$$

La solution de l'équation (5.27) est exprimée en termes de la fonction de Hankel $H_{iv}^{(1)}$ comme suite :

$$
\Psi\mu(y) = A_\upsilon \sqrt{y} H_{iv}^{(1)}(y) \tag{5.28}
$$

où A_υ est la constante de normalisation et $y = kx$

Les solutions acceptables correspondent aux valeurs réelles de ν.

La relation d'orthogonalité (5.12) implique :

$$
\int \Psi_\mu^*(y) \sqrt{V(y)} \Psi_{\mu'}^*(y) \sqrt{V(y)} dy = \delta(\mu - \mu') \tag{5.29}
$$

$$
A_\upsilon^* A_{\upsilon'} \int \frac{dy}{y} H_{iv}^{*(1)}(y)\, H_{iv'}^{(1)}(y) = \delta(\upsilon - \upsilon') \tag{5.30}
$$

En remplaçant la valeur de Ψ_μ par l'équation (5.28) dans l'équation (5.16) on aura :

$$
\begin{aligned}
G(x_b, x_a; E) &= i\hbar \sum_\upsilon \frac{\mu}{1 - \alpha\mu} A_\upsilon \sqrt{x_b} H_{iv}^{(1)}(x_b)\, A_\upsilon \sqrt{x_a} H_{iv}^{*(1)}(x_a) \\
&= i\hbar \sqrt{x_b x_a} \sum_\upsilon \left(\frac{\mu}{1 - \alpha\mu}\right) A_\upsilon^2 H_{iv}^{(1)}(x_b)\, H_{iv}^{*(1)}(x_a)
\end{aligned} \tag{5.31}
$$

où $A_\upsilon^2 = \frac{\upsilon}{2} \sinh \upsilon\pi$ et $-\upsilon^2 = \frac{2m}{\hbar^2 \mu} + \frac{1}{4}$

pour évaluer cet calcul de l'expression (5.31), on remplace par

$$
\frac{\mu}{1 - \alpha\mu} = \frac{-2m}{\upsilon^2 + \frac{1}{4} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}} \tag{5.32}
$$

la fonction de Green (5.31) devient

$$G(x_b, x_a; E) = \frac{m}{i\hbar}\sqrt{x_b x_a}\int_0^\infty d\upsilon \frac{\upsilon \sinh \upsilon\pi}{\upsilon^2 + \frac{1}{4} + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}} H_{i\upsilon}^{(1)}(kx_b) H_{i\upsilon}^{(1)*}(kx_a) \tag{5.33}$$

5.1.3 Potentiel Coulombien

Nous allons maintenant considérer un cas à trois dimensions pour le potentiel coulombienne $V(\vec{q}) = \frac{1}{r}$

Puisque le potentiel est de symétrie sphérique , la solution $\Psi_\mu(\vec{q})$ de l'équation (5.20) est séparée en partie radiale et angulaire, comme suit :

$$\Psi_\mu(\vec{q}) = \Re_\mu(r)\, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \tag{5.34}$$

donc l'équation différentiel écrit comme :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2 \mu}\frac{1}{r}\right][r\Re_\mu(r)] = 0 \tag{5.35}$$

avec

$$\mu_n = \frac{-m}{\hbar^2 K}\frac{1}{(n+\ell+1)} \quad , \quad n = 0, 1, ..., \tag{5.36}$$

et le termes de polynômes de Laguerre écrit comme suit :

$$\Re_n(r) = A_n r^\ell \exp(-Kr)\, L_n^{2\ell+1}(2Kr) \tag{5.37}$$

on utilise la relation (5.12) , on obtient

$$\int \Re_n^*(r)\sqrt{V(r)}\Re_{n'}(r)\sqrt{V(r)}dr = \delta_{nn'} \tag{5.38}$$

ou bien

$$\int dr A_n r^\ell \exp(-Kr)\, L_n^{2\ell+1}(2Kr)\sqrt{\frac{1}{r}} A_{n'} r^\ell \exp(-Kr)\, L_{n'}^{2\ell+1}(2Kr)\sqrt{\frac{1}{r}} = \delta_{nn'} \tag{5.39}$$

et nous pouvons écrire aussi

$$A_n A_{n'}\int_0^\infty dr r^{2\ell-1}\exp(-2Kr)\, L_n^{2\ell+1}(2Kr)\, L_{n'}^{2\ell+1}(2Kr) = \delta_{nn'} \tag{5.40}$$

la constante de normalisation écrit comme :

$$A_n = \left[\frac{(2K)^{2\ell+2}\, n!}{(n+2\ell+1)!}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.41}$$

En remplaçant la valeur de $\Re_n(r)$ par l'équation (5.37) dans l'équation (5.34), donc la fonction de Green (5.16) aura l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
G(\vec{q}_b,\vec{q}_a;E) &= i\hbar\sum\frac{\mu}{1-\alpha\mu}\Re_n(r)\,Y^*_{\ell m}(\theta_a,\phi_a)\,\Re_{n'}(r)\,Y_{\ell m}(\theta_b,\phi_b)\\
&= i\hbar\sum\frac{\mu}{1-\alpha\mu}A_n r_a^{\ell}\exp(-Kr_a)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_a)\,A_{n'}r_b^{\ell}\exp(-Kr_b)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_b)\\
&\quad\times Y_{\ell m}(\theta_b,\phi_b)\,Y^*_{\ell m}(\theta_a,\phi_a)\\
&= i\hbar\sum\frac{\mu}{1-\alpha\mu}\left[\frac{(2K)^{2\ell+2}\,n!}{(n+2\ell+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}r_a^{\ell}\exp(-Kr_a)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_a)\\
&\quad\times\left[\frac{(2K)^{2\ell+2}\,n!}{(n+2\ell+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}r_b^{\ell}\exp(-Kr_b)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_b)\,Y_{\ell m}(\theta_b,\phi_b)\,Y^*_{\ell m}(\theta_a,\phi_a)
\end{aligned}\tag{5.42}$$

et nous avons

$$\frac{\mu}{1-\alpha\mu}=\frac{\frac{-m}{\hbar^2K}}{n+\ell+1+\frac{\alpha m}{\hbar^2K}}\tag{5.43}$$

on remplace (5.43) dans (5.42) obtient :

$$\begin{aligned}
G(\vec{q}_b,\vec{q}_a;E) &= i\hbar\sum\frac{\frac{-m}{\hbar^2K}}{n+\ell+1+\frac{\alpha m}{\hbar^2K}}\left[\frac{(2K)^{2\ell+2}\,n!}{(n+2\ell+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}r_a^{\ell}\exp(-Kr_a)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_a)\\
&\quad\times\left[\frac{(2K)^{2\ell+2}\,n!}{(n+2\ell+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}r_b^{\ell}\exp(-Kr_b)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_b)\,Y_{\ell m}(\theta_b,\phi_b)\,Y^*_{\ell m}(\theta_a,\phi_a)\\
&= \frac{m}{i\hbar Kr_br_a}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2K)^{2\ell+2}\,n!}{(n+2\ell+1)!}(r_br_a)^{\ell+1}\exp[-K(r_b+r_a)]\\
&\quad\times\frac{L_n^{2\ell+1}(2Kr_a)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_b)}{\left(n+\ell+1+\frac{\alpha m}{\hbar^2K}\right)}Y_{\ell m}(\theta_b,\phi_b)\,Y^*_{\ell m}(\theta_a,\phi_a)
\end{aligned}\tag{5.44}$$

Donc nous arrivons à l'expression de la fonction de Green

$$G(\vec{q}_b,\vec{q}_a;E)=\sum_{\ell m}G_\ell(r_b,r_a;E)\,Y_{\ell m}(\theta_b,\phi_b)\,Y^*_{\ell m}(\theta_a,\phi_a)\tag{5.45}$$

où la fonction radiale de Green $G_\ell(r_b,r_a;E)$ est représentée par :

$$G_\ell(r_b,r_a;E)=\frac{m}{i\hbar Kr_br_a}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2K)^{2\ell+2}\,n!}{(n+2\ell+1)!}(r_br_a)^{\ell+1}\exp[-K(r_b+r_a)]\,\frac{L_n^{2\ell+1}(2Kr_a)\,L_n^{2\ell+1}(2Kr_b)}{\left(n+\ell+1+\frac{\alpha m}{\hbar^2K}\right)}\tag{5.46}$$

à l'aide du représentation standard de $\left(\frac{1}{\beta}\right)$ sous la forme d'une intégrale d'un fonction exponentielle

$$\frac{1}{\beta} = i\int_0^\infty \exp\left(-i\beta\omega\right) d\omega \tag{5.47}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{\left(n+\ell+1+\frac{\alpha m}{\hbar^2 K}\right)} &= i\int_0^\infty \exp\left[-i\left(n+\ell+1+\frac{\alpha m}{\hbar^2 K}\right)\omega\right] d\omega \\ &= i\int_0^\infty z^n \exp\left[-i\left(\ell+1\right)\omega\right]\exp\left[-i\frac{\alpha m}{\hbar^2 K}\omega\right] d\omega\end{aligned} \tag{5.48}$$

Avec

$$z = \exp\left(-i\omega\right)$$

$$\alpha = 2\ell+1$$

$$x = 2kr_b$$

$$y = 2kr_a$$

$$(n+2\ell+1)! = \Gamma\left(n+2\ell+2\right) = \Gamma\left(n+\alpha+1\right)$$

Alors l'expression (5.46) s'écrit :

$$\begin{aligned}G_\ell\left(r_b,r_a;E\right) &= \frac{m}{i\hbar K r_b r_a}\int \sum_{n=0}^\infty \frac{z^n n! L_n^{2\ell+1}\left(2Kr_a\right)L_n^{2\ell+1}\left(2Kr_b\right)}{\Gamma\left(n+\alpha+1\right)}\left(2K\right)^{2\ell+2}\left(r_b r_a\right)^{\ell+1} \\ &\exp\left[-K\left(r_b+r_a\right)\right]\exp\left[-i\left(\ell+1\right)\omega\right]\exp\left[-i\frac{\alpha m}{\hbar^2 K}\omega\right] d\omega\end{aligned} \tag{5.49}$$

on utilise l'identité suivante pour le produit des polynomes de Laguerre (la formule (1) section 8.976, p.992) ([2])

$$\sum_{n=0}^\infty \frac{z^n n! L_n^\alpha\left(x\right)L_n^\alpha\left(y\right)}{\Gamma\left(n+\alpha+1\right)} = \frac{\left(xyz\right)^{\frac{-\alpha}{2}}}{\left(1-z\right)}\exp\left[\frac{\left(x+y\right)z}{z-1}\right] I_\alpha\left(\frac{2\sqrt{xyz}}{1-z}\right) \tag{5.50}$$

par simplification on trouve

$$\frac{\left(xyz\right)^{\frac{-\alpha}{2}}}{\left(1-z\right)} = \left(4k^2 r_b r_a\right)^{-l-\frac{1}{2}}\frac{\exp\left(i\omega\right)\exp\left(i\omega l\right)}{2\sinh\left(\frac{\omega}{2}\right)}$$

$$\frac{\left(x+y\right)z}{z-1} = 2k\left(r_b+r_a\right)\coth\left(\frac{\omega}{2}\right)$$

$$\frac{2\sqrt{xyz}}{1-z} = \frac{2k\sqrt{r_b r_a}}{\sinh\left(\frac{\omega}{2}\right)}$$

on remplace dans (5.49)

$$\begin{aligned} G_\ell\left(r_b, r_a; E\right) &= \frac{2m}{i\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}}\int_0^\infty \exp\left[-i\frac{2\alpha m}{\hbar^2 K}\omega\right]\frac{\exp\left(k\left(r_b+r_a\right)\coth\left(\omega\right)\right)}{\sinh\left(\omega\right)} \\ &\quad\times I_{2\ell+1}\left(\frac{2k\sqrt{r_b r_a}}{\sinh\left(\omega\right)}\right)d\omega \end{aligned} \tag{5.51}$$

Alors

$$G_\ell\left(r_b, r_a; E\right) = \frac{2m}{i\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}}\int_0^\infty \exp\left[\frac{2\alpha m}{i\hbar^2 K}\omega\right] g_l\left(r_b, r_a; \omega\right)d\omega \tag{5.52}$$

où

$$g_l\left(r_b, r_a; \omega\right) = \frac{\exp\left(k\left(r_b+r_a\right)\coth\left(\omega\right)\right)}{\sinh\left(\omega\right)} I_{2\ell+1}\left(\frac{2k\sqrt{r_b r_a}}{\sinh\left(\omega\right)}\right) \tag{5.53}$$

Ce dernier résultat ([**?**]) est le même qu'on a trouvé dans le chapitre 4 avec la méthode des pertubations.

Chapitre 6

Conclusion générale

Dans ce mémoire nous avons exposé la méthode des perturbations dans le formalisme de l'intégrale de chemin, en présentant son développement à partir du propagateur de Feynman et en donnant ces propriétés générales. Pour montrer sa maniabilité et sa flexibilité ainsi que sa puissance de calcul, nous avons choisi quelques exemples de potentiels pour lesquels la série de perturbation est sommable. Bien sûr, pour arriver au résultat analytique, beaucoup de techniques sont introduites et parmi figurent les propriétés des distributions, des fonctions spéciales et d'autres éléments d'analyse et la tâche n'est pas aussi simple qu'on le pense.

Dans le premier chapitre, nous avons donné des géneralités de construction sur l'intégrale de chemin et nous avons présenté l'expérience de Feynman des fentes de Young qui illustre naturellement cette construction et nous nous sommes limités à quelques propriétés de base de la mécanique quantique pour étudier les propriétés du propagateur et sa construction.

Ensuite dans le chapitre deux, nous avons étudié le formalisme des intégrales de chemins en coordonnées polaires qui nous a naccesité un changement de coordonnées pas aussi évident dans ce formalisme et qui nous a amenés au calcul des corrections quantiques dues à l'ordre des opérateurs en mécanique quantique. Bien sûr, nous nous sommes limités à ses coordonnées vue leur utilité dans les applications visées dans ce mémoire, en particulier la partie radiale des systèmes à symétrie sphérique.

Dans le chapitre trois, nous avons exposé cette méthode de perturbation et choisi pour illustration de résoudre des problèmes à potentiel soluble par cette méthode. Parmi eux, le potentiel en delta de Dirac et l'inverse quadratique en dimension un, puis celui du potentiel de coulomb en trois dimensions. Enfin une méthode spectrale qui utilise cette série de perturbation est exposée et les mêmes exemples sont repris.

Nous pouvons dire que cette technique de perturbation est flexible et puissante par son calcul et peut aussi être étendue aux systèmes relativistes. Sa puissance formelle est l'outil par excellence de la théorie quantique des champs.

Chapitre 7

Appendices

7.1 APP1 : Fonction de Green Libre

$$G_0(x_b, x_a; E) = \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(ik\left|x_b - x_a\right|\right) \text{ avec; } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{7.1}$$

En effet, on a :

$$\left(H - E\right) G = 1 \tag{7.2}$$

sa solution formelle est

$$G = \frac{1}{H - E} \tag{7.3}$$

En la projetant sur la base des x on a

$$< x_b|G|x_a >=< x_b|\frac{1}{H - E}|x_a >$$

et on utilise la relation de fermeture :

$$\int dp|p >< p| = 1$$

$$\begin{aligned}
< \quad x_b|G|x_a >= & \int < x_b|p >< p|\frac{1}{\frac{\hat{p}^2}{2m}-E}|x_a > dp \\
= & \int < x_b|p > \frac{1}{\frac{\hat{p}^2}{2m}-E} < p|x_a > dp \\
= & \frac{1}{2\pi}\int \exp\left(\frac{ip}{\hbar}(x_b-x_a)\right)\frac{1}{\frac{\hat{p}^2}{2m}-E}
\end{aligned}$$

avec

$$< x_b|p >< p|x_a >= \frac{1}{2\pi}\exp\left(\frac{ip}{\hbar}(x_b-x_a)\right)$$

A ce stade, intégrons en utilisant le théoréme des résidus ; où les pôles sont :

$$p^2 - 2mE = 0$$

ou bien

$$p = \pm\sqrt{2mE}$$

avec un choix adéquat du contour d'intégration, il vient donc suivant que $x_b - x_a \gtreqless 0$ le résultat suivant

$$G_0(x_b, x_a; E) = \left(\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(ik\left|x_b - x_a\right|\right) \tag{7.4}$$

7.2 APP2 : Fonction de Green Libre

L'expression de la fonction de Green libre $G_0(x_b, x_a; E)$ en coordonnées polaires et en fonction des harmoniques sphériques

$$G_0(x_b, x_a; E) = \frac{4\alpha}{i}\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}}\sum_{l,m} Y_{lm}^*(x_a)Y_{lm}(x_b)A_l(r_b, r_a; E) \tag{7.5}$$

avec, $\alpha = \frac{m}{2\hbar}$

$A_l(r_b, r_a; E)$ est défini par :

$$A_l(r_b, r_a; E) = \frac{1}{2}\int_0^\infty \exp\left(i\alpha\frac{(r_b^2 + r_a^2)}{T} + \frac{iET}{\hbar}\right) I_{2l+1}\left(\frac{-2i\alpha r_b r_a}{T}\right)\frac{dT}{T}$$

L'intégration sur les coordonnées angulaires intermédiaires s'effectue facilement pour arriver au résultat final suivant :

$$G(x_b, x_a; E) = \sum_{l,m} Y^*_{lm}(x_a) Y_{lm}(x_b) G_l(x_b, x_a; E) \tag{7.6}$$

La fonction de Green radiale $G_l(r_b, r_a; E)$ exprimée sous la forme suivante :

$$G_l(r_b, r_a; E) = \frac{4\alpha}{i} \frac{1}{\sqrt{r_b r_a}} \sum_{n=0}^{\infty} (\frac{4\alpha i Z e^2}{\hbar})^n f_l^{(n)}(r_b r_a E)$$

avec la fonction $f_l^{(n)}(r_b r_a E)$ est définies par :

$$f_l^{(0)}(r_b r_a E) = A_l(r_b, r_a; E)$$

$$\begin{aligned} f_l^{(1)}(r_b r_a E) &= \int_0^{\infty} A_l(r_1, r_a; E) A_l(r_2, r_b; E) dr_1 \\ &\;. \\ &\;. \\ &\;. \\ f_l^{(n)}(r_b r_a E) &= \int_0^{\infty} ... \int_0^{\infty} \prod_{j=0}^{n} A_l(r_{j+1}, r_j; E) \prod_{j=1}^{n} dr_j \end{aligned}$$

on pose $U = \frac{2iET}{\hbar}$, $dU = \frac{2iEdT}{\hbar}$

$$\begin{aligned} A_l &= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \exp\left(i\alpha \frac{(r_b^2 + r_a^2) 2iE}{\hbar U} + \frac{U}{2} \right) I_{l+\frac{1}{2}}(\frac{-2i\alpha r_b r_a 2iE}{\hbar U}) \frac{dU}{U} \\ &= \frac{1}{2} \int \exp\left(-2\alpha\varepsilon \frac{(r_b^2 + r_a^2)}{U} + \frac{U}{2} \right) I_{l+\frac{1}{2}}(\frac{4\alpha\varepsilon r_b r_a}{U}) \frac{dU}{U} \end{aligned}$$

avec $\varepsilon = \frac{E}{\hbar}$

on utilise(la formule (1) dans la section 8.424,p916) ([2])

$$A_l = \frac{i\pi}{2} H^{(1)}_{l+\frac{1}{2}}(2(\varepsilon\alpha)^{\frac{1}{2}} r_<) J_{l+\frac{1}{2}}(2((\varepsilon\alpha)^{\frac{1}{2}} r_>)$$

$$G_{0l} = \frac{4\alpha}{i} (\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}}) A_l$$

qui s'écrira ainsi

$$\begin{aligned} G_{0l} &= \frac{4\alpha}{i}(\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}})\frac{i\pi}{2}H^{(1)}_{l+\frac{1}{2}}(2(\varepsilon\alpha)^{\frac{1}{2}}r_<)J_{l+\frac{1}{2}}(2((\varepsilon\alpha)^{\frac{1}{2}}r_>) \\ &= (\frac{1}{\sqrt{r_b r_a}})\frac{m\pi}{\hbar}H^{(1)}_{l+\frac{1}{2}}(2(\frac{Em}{2\hbar^2})^{\frac{1}{2}}r_<)J_{l+\frac{1}{2}}(2(\frac{Em}{2\hbar^2})^{\frac{1}{2}}r_>) \end{aligned}$$

$$G(x_b, x_a; E) = \sum_{l,m} Y^*_{lm}(x_a)Y_{lm}(x_b)G_l(r_b, r_a; E) \tag{7.7}$$

7.3 APP3 : La Fonction de Green de Coulombien

le premier ordre :

$$\begin{aligned} G_{1l}(r_b, r_a; E) &= \int_0^\infty rdrG_{0l}(r_b, r; E)G_{0l}(r, r_a; E) \\ &= \int_0^\infty rdr\int_0^\infty d\omega_1\int_0^\infty d\omega_2\left[\frac{2m}{i\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_b r}}g_l(r_b, r, \omega_1)\right]\left[\frac{2m}{i\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_a r}}g_l(r, r_a, \omega_2)\right] \\ &= \left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{r_a r_b}}\int_0^\infty d\omega_1\int_0^\infty d\omega_2\frac{\exp\left[ik\left(r_b\coth\omega_1 + r_a\coth\omega_2\right)\right]}{\sinh\omega_1\sinh\omega_2} \\ &\times\int_0^\infty dr\exp\left[ikr\left(\coth\omega_1+\coth\omega_2\right)\right]I_{2l+1}\left(\frac{2k\sqrt{r_b}}{i\sinh\omega_1}\sqrt{r}\right)I_{2l+1}\left(\frac{2k\sqrt{r_a}}{i\sinh\omega_2}\sqrt{r}\right) \end{aligned} \tag{7.8}$$

Où

$$G_{0l}(r_b, r_a; E) = \frac{2m}{i\hbar}\frac{1}{\sqrt{r_a r_b}}\int_0^\infty g_l(r_b, r_a, \omega)d\omega \tag{7.9}$$

Avec

$$g_l(r_b, r_a, \omega) = \frac{\exp\left[ik\left(r_b + r_a\right)\coth\omega\right]}{\sinh\omega}I_{2l+1}\left(\frac{2k\sqrt{r_a r_b}}{i\sinh\omega}\right) \tag{7.10}$$

Nous introduisons la formule suivante des fonctions de Bessel (la formule (2) section 6.633, p.699) ([2]) :

$$\int_0^\infty \exp(i\alpha x^2)I_v(-ibx)I_v(-icx)xdx = \frac{i}{2\alpha}\exp\left[-i\frac{(b^2+c^2)}{4\alpha}\right]I_v\left(\frac{-ibc}{2\alpha}\right) \tag{7.11}$$

et on pose $\sqrt{r} = x \rightarrow r = x^2 \rightarrow dr = 2xdx$

avec

$$\begin{cases} a = \frac{k\sinh(\omega_1+\omega_2)}{\sinh\omega_1\sinh\omega_2} \\ b = \frac{2k\sqrt{r_b}}{\sinh\omega_1} \\ c = \frac{2k\sqrt{r_a}}{\sinh\omega_2} \end{cases} \quad \text{et,} \quad \begin{cases} \frac{b^2+c^2}{4a} = \frac{k(r_b+r_a)}{\sinh(\omega_1+\omega_2)} \\ \frac{bc}{2a} = \frac{2k\sqrt{r_br_a}}{\sinh(\omega_1+\omega_2)} \end{cases}$$

Donc,(7.8) écrit comme suit :

$$\begin{aligned} G_{1l}(r_b,r_a;E) &= \frac{i}{k}\left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}\int_0^\infty d\omega_1\int_0^\infty d\omega_2\frac{\exp\left[ik\left(r_b\coth\omega_1+r_a\coth\omega_2\right)\right]}{\sinh\omega_1\sinh\omega_2} \\ &\quad\times\frac{1}{\sinh\left(\omega_1+\omega_2\right)}\exp(-i\frac{b^2+c^2}{4a})I_{2l+1}\left(\frac{-2ik\sqrt{r_br_a}}{\sinh(\omega_1+\omega_2)}\right) \end{aligned} \tag{7.12}$$

on pose

$$\begin{cases} \Omega = \omega_1+\omega_2 \\ \omega = \omega_1 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} G_{1l}(r_b,r_a;E) &= \frac{i}{k}\left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}\int_0^\infty g_l(r_b,r_a;\Omega)d\Omega \\ &\quad\times\int_0^\Omega d\omega\exp\left[ik\left(r_b\coth\omega+r_a\coth\left(\Omega-\omega\right)\right)\right] \\ &\quad\times\exp(-i\frac{b^2+c^2}{4a})\exp\left[-ik\left(r_b+r_a\right)\coth\Omega\right] \end{aligned} \tag{7.13}$$

Avec

$$a = \frac{k\sinh\Omega}{\sinh\omega\sinh\left(\Omega-\omega\right)} \tag{7.14}$$

$$-i\frac{b^2+c^2}{4a} = \frac{-ik}{\sinh\Omega}\left(r_b\frac{\sinh\left(\Omega-\omega\right)}{\sinh\omega}+r_a\frac{\sinh\omega}{\sinh\left(\Omega-\omega\right)}\right) \tag{7.15}$$

donc la forme finale écrit comme :

$$\begin{aligned} G_{1l}(r_b,r_a;E) &= \frac{i}{k}\left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}\int_0^\infty g_l(r_b,r_a;\Omega)d\Omega \\ &\quad\times\int_0^\Omega d\omega\exp\left\{ik\left[\begin{array}{c} r_b\left(\coth\omega-\frac{\sinh(\Omega-\omega)}{\sinh\omega}-\coth\Omega\right) \\ +r_a\left(\coth\left(\Omega-\omega\right)-\frac{\sinh\omega}{\sinh(\Omega-\omega)}-\coth\Omega\right) \end{array}\right]\right\} \\ &= \frac{i}{k}\left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}\int_0^\infty g_l(r_b,r_a;\Omega)d\Omega\int_0^\Omega d\omega \\ &= \frac{i}{k}\left(\frac{2m}{i\hbar}\right)^2\frac{1}{\sqrt{r_ar_b}}\int_0^\infty \Omega g_l(r_b,r_a;\Omega)d\Omega \end{aligned} \tag{7.16}$$

7.4 APP4 :L'opérateur $\mathbf{A}_1$

on pose

$$[I-\alpha B_1]^{-1}(x,y)=K(x,y)$$

où

$$I(x,y)=\delta(x-y)$$

$$\int [I-\alpha B_1](x,z)\,K(z,y)\,dz=I(x,y)$$

$$\int [I(x,z)-\alpha B_1(x,z)]\,K(z,y)\,dz=\delta(x-y)$$

on remplace par l'expression de $B_1(x,z)$

$$\int \left[\delta(x-z)+\frac{\alpha i}{\hbar}G_0(x,z;E)\,\delta(z)\right]K(z,y)\,dz=\delta(x-y)$$

$$K(x,y)=\delta(x-y)-\frac{\alpha i}{\hbar}G_0(x,0;E)\,K(0,y)$$

où l'on a utilisé la formule

$$f(x)\delta(x)=f(0)\,\delta(x)$$

Donc

$$K(0,y)+\frac{\alpha i}{\hbar}G_0(0,0;E)\,K(0,y)=\delta(y)$$

Alors l'opérateur écrit :

$$K(0,y)=\frac{\delta(y)}{1+\frac{\alpha i}{\hbar}G_0(0,0;E)} \tag{7.17}$$

et nous avons

$$A_1(x,y)=\{\alpha B_1K\}(x,y) \tag{7.18}$$

on remplace (7.17) dans (7.18) :

Donc ;

$$A_1(x,y)=\left(\frac{-i\alpha}{\hbar}\right)\frac{G_0(x,0;E)\,\delta(y)}{1+\frac{\alpha i}{\hbar}G_0(0,0;E)} \tag{7.19}$$

Bibliographie

[1] D.C.Khandkar,S.V.Lawande,K.V.Bhagwat,Path-Integral Methods and their Applications (world scientific)

[2] I.S.Gradshtein et I.M.Ryzhik,Tables of integrals,series and products (Academic press,New York,1995)

[3] R.P.Feynman,Rev.Mod.phys.20(1948)367,R.P.Feynman et A.Hibbs,Quantum mechanics and path integrals (Mc Graw Hill,New York,1965)

[4] L.S.Schulman,Techniques and application of path integration(Wiley,New York,1981)

[5] Jean.Zinn-Justin,Intégrale de chemins en mécanique quantique :introduction (édition Paris (2003))

[6] D.W.Mc Laughlin et L.S.Schulman,J.Math.Phys.12(1971)2520.

[7] M. J. Goovaerts and J. T. Devreese, J. Maths. Phys. 13, 1070 (1972).

[8] M. J. Goovaerts, A. Baceno and J. T. Devreese, J. Maths. Phys. 14, 554 (1973)

[9] S. V. Lawande and K. V. Bhagwat, Phys. Lett. A131, 8 (1988)

[10] K. V. Bhagwat and S. V. Lawande, Phys. Lett. A135, 417 (1988)

[11] M.F. Manning, N. Rosen, Phys. Rev. 44 (1933) 953