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

UNIVERSITE MENTOURI, CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DES MATHEMATIQUES

N° d'ordre :
N° de Série :

THESE

PRESENTEE POUR L'OBTENTION DU DIPLÔME
DE
DOCTORAT EN SCIENCES

SPECIALITE : MATHEMATIQUES
Option : ANALYSE

PAR

BOUDJEDAA BADREDINE

THEME

Fondements mathématiques des intégrales de chemin "Feynman path integrals"

Devant le jury :

Président	**N. Hamri**	**Prof.**	**Centre Universitaire de Mila**
Rapporteur	**L. Chetouani**	**Prof.**	**Université Mentouri, Constantine**
Examinateurs :	**J. Polonyi**	**Prof.**	**Université de Strasbourg, France**
	M.T.Meftah	**Prof.**	**Université Kasdi Merbah, Ouargla**
	M.Denche	**Prof.**	**Université Mentouri, Constantine**
	F.L. Rahmani	**M.C**	**Université Mentouri, Constantine**

Soutenue le 03/02/2010

A la mémoire de mon père

A ma mère

A ma femme et ma sœur

A tous mes frères

A toute la famille et tous mes amis

Remerciements

Ce travail a été réalisé sous la direction du Professeur L. Chetouani du Laboratoire Physique Mathématique et Physique Sub-Atomique de l'Université Mentouri de Constantine.

Toute ma gratitude et ma reconnaissance vont à Mr le Professeur L. Chetouani pour m'avoir proposé ce sujet de thèse et d'avoir dirigé et suivi de plus près ce travail.

Je voudrais remercier Mr le Professeur J.Polonyi et lui témoigner ma profonde reconnaissance, pour avoir accepté de m'accueillir au sein du laboratoire de physique théorique à ULP-Strasbourg, pour une collaboration de thèse, mes vifs remerciements lui vont pour sa gentillesse et sa disponibilité pendant tout mon séjour au laboratoire.

Je remercie, aussi, Mr le Professeur M.T.Meftah, du département de physique de l'université de Kasdi Merbah – Ouargla, pour son aide et les longues discussions que nous avons eu au laboratoire LENREZA, et pour ses encouragements pour finaliser une partie de cette thèse.

Je remercier Mr N.Hamri de m'avoir honoré en acceptant de présider le jury.

Je voudrais, aussi, remercier tous les membres du jury : Pr.Denche, M.C. Rahmani, Pr. J.Polonyi et Pr. M.T.Meftah avec ma plus grande reconnaissance pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail.

Je remercie vivement tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de cette thèse, même par un petit sourire d'encouragement.

Mes remerciements s'adressent à toute la famille et tous mes amis.

Notations

On note :

1) Pour $x = (x_1, x_2, ..., x_n) \in R^n$:

$$|x|^2 = |x_1|^2 + |x_2|^2 + ... + |x_n|^2 \quad ;$$

2) Pour $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ et $y = (y_1, y_2, ..., y_n)$ de R^n :

$$x + y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2 \ , ..., x_n + y_n)$$

et le produit scalaire dans R^n

$$xy = x \cdot y = x_1 y_1 + x_2 y_2 + ... x_n y_n \quad .$$

3) Pour $x = (x_1, x_2, ..., x_n) \in R^n$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \cdot\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2, ..., x_n)\, dx_1 dx_2..dx_n \qquad (\bigstar) \quad .$$

4) Pour $x_1, x_2, ..., x_m \in R^n$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2, ..., x_m)\, dx_1 dx_2..dx_m = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \cdot\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2, ..., x_m)\, dx_1 dx_2...dx_m$$

où chaque intégration sur x_j , $j = 1, 2, ..., m$, est donnée par $(\bigstar)$.

5) Pour $x = (x_1, x_2, ..., x_n) \in R^n$:

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$$

$$\Delta_x = \Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + ... + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$$

qui désignent respectivement le *gradient* et le *Laplacien*.

On désigne par

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad \textit{où} \qquad h \quad \text{désigne la constante de } \textit{Planck}$$

On note, aussi, par :

c la vitesse de la lumière .

Table des matières

0.1 Introduction

De nos jours, la mécanique quantique est l'outil fondamental pour décrire et étudier des phénomènes physiques à une échelle très "petite" (i.e échelle atomique, microscopique) là où les lois de la mécanique classique ($Newtonienne$) cessent d'être valables, par exemple l'existence des atomes et leurs propriétés, les liaisons chimiques, etc...

Historiquement la mécanique quantique prend naissance vers la fin du $19^{ème}$ siècle et le début du $20^{ème}$ siècle et cela grâce aux idées de quantification de l'énergie. En 1900 c'est $Planck$ qui, pour expliquer certaines particularités du rayonnement thermique, a donné l'idée que l'énergie d'un système ne pouvait prendre que certaines valeurs "discrètes" et non pas l'ensemble continu des valeurs prédites par la théorie classique du phénomène. Puis $Einstein$, en 1905, et en s'appuyant sur l'idée de $Planck$, il a pu expliquer quelques phénomènes tels le rayonnement du corps noir, effet photoélectrique, etc... Mais le premier exemple expérimental de quantification de l'énergie remonte à l'observation, en 1885, des raies de $Balmer$ lors de la luminescence d'atomes d'hydrogène. Ainsi de suite, et au fil des ans, les idées commencent à se développer de plus en plus pour donner naissance à des nouvelles théories telles que : la théorie de $Bohr$ de l'atome d'hydrogène "la théorie des quanta", qui est basée sur les règles de $Bohr - Sommerfeld$, elle repose essentiellement sur la formulation $hamiltonienne$ de la mécanique classique ; cette théorie a eu un succès considérable, elle a été considérée par $Bohr - Sommerfeld$ comme " la voie royale vers la quantification" ; mais très vite elle s'est avérée insuffisante du moment où elle reposait sur le fait que l'équation de $Hamilton - Jacobi$ possède une solution complète i.e que le système est "séparable" or l'immense majorité des systèmes mécaniques ne sont pas séparables.

Pour pouvoir surmonter cette difficulté, il fallait donc essayer de modifier les hypothèses de départ et que la quantification des énergies possibles (la théorie des quanta) soit une conséquence directe de la nouvelle théorie. En 1926, $Heisenberg$ a proposé d'abandonner la notion de trajectoire (i.e la formulation $hamiltonienne$ du système) et il a pu démontrer que les régles de quantification pouvaient être obtenues pour un système séparable si les énergies étaient définies comme les valeurs propres de "l'opérateur" $Hamiltonien$. Cette idée d'introduire des opérateurs, pour quantifier le mouvement d'un système, repose aussi sur la formulation *hamiltonienne* du problème de mécanique classique correspondant. Elle est, effectivement, la première théorie de la mécanique quantique, connue sous le nom de "quantification canonique" ou théorie des matrices. Indépendamment de $Heisenberg$ (1927), et en se basant sur les propriétés d'ondes des électrons révélées dans le problème de diffraction, $Schr\ddot{o}dinger$ introduit le concept de fonction d'onde où il stipule que l'état d'un système est donné par une fonction d'onde dont l'évolution en temps est régie par l'équation

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t)$$

(Equation de $Schr\ddot{o}dinger$ pour une particule non relativiste) et que les niveaux d'énergies d'un atome correspondent aux états stationnaires

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t).$$

Le premier grand succès de $Schr\ddot{o}dinger$ a été de démontrer que les solutions stationnaires de l'atome d'hydrogène et de l'oscillateur harmonique n'existaient que pour des valeurs quantifiées de l'énergie, et que ses valeurs correspondaient bien aux résultats trouvés grâce aux règles de $Bohr - Sommerfeld$ pour l'atome d'hydrogène et au résultat de $Heisenberg$ pour l'oscillateur harmonique. Bien que les deux points de vue apparemment très différents, de $Heisenberg$ et de $Schr\ddot{o}dinger$, cependant il est possible de faire le lien entre les deux formulations.

La seule interprétation simple de la fonction d'onde consiste à adopter le point de vue probabiliste : i.e si une particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(x)$, la probabilité de la trouver au point "x" est égale à $|\Psi(x)|^2$. Plus exactement, la probabilité de trouver la particule dans un élément de volume "dx" autour de "x" est $|\Psi(x)|^2 \, dx$. Ce point de vue probabiliste n'a pas été accepté facilement, qui suppose l'abandon d'une certaine forme de déterminisme, même des chercheurs aussi brillants qu' $Einstein$ n'y ont jamais adhéré à ce point de vue. Mais ce point de vue n'a jamais été mis en défaut.

Une autre formulation de la mécanique quantique est donnée par $R.P.Feynman$ $[12-14]$ en 1942, dans sa thèse portant sur la formulation de la mécanique quantique à partir du $Lagrangien$ du système, et c'est là où il fait introduire *des intégrales de chemin* pour la première fois; en voulant quantifier la nouvelle formulation de l'électrodynamique basée sur "l'action à distance", que $Feynman$ et son directeur de thèse $wheeler$ ont essayé de développer , il a essayé de trouver une méthode de quantification basée sur le $Lagrangien$ pour décrire un système qui n'a pas d'$hamiltonien$, et cela en utilisant l'idée de $Dirac$, qui stipule que l'amplitude de transition élémentaire est proportionnelle à $\exp(i\frac{S}{\hbar})$ où S est l'action classique du système.

Depuis que $Feynman$ a introduit *les intégrales de chemin*, "*Feynman Path integrals*", dans sa nouvelle formulation de la mécanique quantique, elles n'ont cessé d'être introduites dans divers domaines de la physique théorique, i.e la mécanique quantique, la physique statistique et la théorie quantique des champs.... $[15, 30-32, 39, 42]$, mais elles ont été utilisées que d'une maniére beaucoup plus intuitive et formelle sans aucune rigueur mathématique.

Sachant que cette nouvelle formulation "*Lagrangienne*" de la mécanique quantique se développe grâce à ces *intégrales de chemin*, donc une définition mathématique et bien claire (pas formelle), de *l'intégrale de chemin*, s'impose de plus en plus pour donner plus de rigueur et plus d'appui pour cette nouvelle formulation.

Mathématiquement parlant, la définition de l'intégrale de $Feynman$ s'est confrontée à beaucoup de difficultés. Déjà en1960, Cameron [8] a démontré que l'intégrale de $Feynman$, telle que $Feynman$ l'a définie, ne peut être associée à une mesure $\sigma-$additive sur l'espace des chemins, ce qui fait défaut à l'utiliser comme une intégrale usuelle au sens connu de la théorie de l'intégration. Une autre chose qui caractérise l'intégrale fonctionnelle au sens de $Feynman$, c'est qu'on a à calculer une limite sur une superposition d'intégrales, mais ceci est bien superflu, car il n'est pas clair que cette limite existe toujours et si elle existe, dans quel sens elle est donnée.

Beaucoup de mathématiciens se sont intéressés à l'intégrale de $Feynman$ [3, 8, 17, 38, 43], et ils ont essayé de lui donner des définitions mathématiques, mais malheureusement, la plupart d'entre elles ne sont autres que des justifications des calculs effectués pour des problèmes physiques bien précis. Donc dire qu'on a bien défini ces intégrales c'est une chose qui n'est pas encore faite, une définition bien claire "Globale", qui donne une justification mathématique plus rigoureuse et précise pour tout calcul (formel utilisant les intégrales de $Feynman$) effectué dans n'importe quel domaine de la physique ou autre, est une chose jusqu'à nos jours inachevée et il reste beaucoup à faire, faute de lui associer une mesure et de l'utiliser comme étant une intégrale au sens ordinaire.

Cette thèse est partagée essentiellement en deux chapitres, on commence par une introduction pour donner un historique de la mécanque quantique, où on a essayé d'exposer l'essentiel du cheminement des idées qui ont pu développer plusieurs formalismes au fil des ans, pour la mécanique quantique, l'un de ces formalisme est la formalisme *intégrale de chemin "Feynman Path integral"*. Dans le premier chapitre on donne différentes approches de l'*intégrale de chemin*, par le diagramme de $Feynman$, la formule de $Trotter$ ou la *série de perturbation*, on donne, aussi, quelques propriétés du propagateur, donné par le formalisme de l'*intégrale de chemin.* Le deuxième chapitre est partagé en deux parties, où on donne des application de ce formalisme, dans la première partie on aborde un problème non relativiste, équation de *Schrödinger* pour le potentiel $Morse$ et par utilisation de la *série de perturbation de Feynman*, on arrive à trouver la fonction de *Green* du problème considéré ; dans la deuxième partie on s'intéresse à deux problèmes relativistes, équation de $Feshbach - Villars$ libre et l'équation de *Klein* − *Gordon*, où on donne des représentations via l'*intégrale de chemin* pour les solutions des deux problèmes précédents. A la fin on termine par une conclusion sur tout ce qu'on a abordé dans ce travail.

Chapitre 1

Les Intégrales de Chemin "Feynman Path Integrals"

1.1 Intégrale de chemin " Feynman Path Integral"

Dans la mécanique quantique, avec les notions de propagateur et de chemin d'espace-temps, *Feynman* donne une nouvelle formulation du postulat concernant l'évolution des systèmes physiques dans le temps, et il propose deux postulats [12, p.371] :

Postulat 01 :

Si une mesure idéale est réalisée pour déterminer "la trajectoire" (chemin) d'une particule dans une région de l'espace-temps, alors la probabilité, pour que le résultat soit affirmatif, est le module au carré de la somme des contributions (complexes) de tous les chemins dans cette région.

Postulat 02 :

Les contributions de tous les chemins sont égales en amplitude, mais leurs phases sont les actions classiques (en unités de $\hbar$) i.e l'intégrale en temps du *Lagrangien* le long du chemin.

C'est-à-dire que :

$$K\left(x,t\,;x_0,t_0\right)=\sum_{x(t)}\Phi(x(t))$$

où $K\left(x,t\,;x_0,t_0\right)$ est le propagateur, qui est interprété comme l'amplitude de probabilité pour que la particule, partie de x_0 à l'instant t_0, arrive à x à l'instant t et $\Phi(x(t))$ est l'amplitude de probabilité pour le chemin $x(t)$,tel que $x(t)=x,\ x(t_0)=x_0$.

Pour calculer $\Phi(x(t))$ et en se basant sur les idées de *Dirac* (i.e.que l'amplitude de transition élémentaire est proportionnelle à $\exp(i\frac{S_{cl}}{\hbar})$) :

$$\Phi_{élt}(x(t))=const\ \exp(i\frac{S_{cl}(x(t))}{\hbar})$$

où S_{cl} est l'action classique du système.

Alors

$$\Phi(x(t)) \simeq \prod \Phi_{élt}(x(t)) \ ;$$

ce qui permet à $Feynman$ d'exprimer formellement le propagateur $K\,(x,t\ ;x_0,t_0)$ sous forme d'une intégrale fonctionnelle :

$$K\,(x,t\ ;x_0,t_0) = \int\ \exp(i\frac{S(x(t))}{\hbar})\ \ \mathcal{D}x(t)$$

où $\mathcal{D}x(t)$ est la mesure formelle sur l'espace des chemins, $S(x(t))$ n'est autre que l'action du système

$$S(x(t)) = \int_{t_0}^{t} L\,(\dot{x},x,\tau)\,d\tau$$

et $L\,(\dot{x},x,t)$ est le Lagrangien du système.

Bien avant $Feynman$, on connait déjà, dans l'étude du mouvement $Brownien$, les $intégrales\ fonctionnelles$, les intégrales de $Wiener$, définies par la mesure de $Wiener$ dans l'espace des chemins continus.

$M.Kac$ influencé par le travail de $Feynman$ donne une analogie entre les deux intégrales, $l'intégrale\ de\ Feynman$ et l'integrale de $Wiener$, il démontre que la solution de l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial}{\partial t}U(x,t) = \Delta U(x,t) - V(x)U(x,t)\ ,$$

l'analogue de l'équation de $Schrödinger$ si on remplace t par $-it$, peut être exprimée par une intégrale de $Wiener$, qui est une intégrale bien définie, voir par exemple[42, Ch9 - pp53-64], ce qui permet, dans un certain sens, de donner une justification de $l'intégrale\ de\ Feynman$ pour un temps purement imaginaire $(t \rightarrow -it)$. En utilisant cette analogie entre l'équation de

Schrödinger et l'équation de la chaleur, *Cameron* [8] a pu donner une définition " par prolongement analytique" pour *l'intégrale de Feynman*, où *l'intégrale de Feynman* est comprise comme un prolongement analytique pour un temps purement imaginaire de l'integrale de *Wiener*. On peut trouver une autre analogie, de l'intégrale de *Wiener* et *l'intégrale de Feynman*, dans *Nelson* [38] où par "prolongement analytique" dans l'intégrale de *Wiener*, la solution de l'équation de la chaleur, qui est exprimée en terme d'intégrale de *Wiener*, en remplaçant V par iV, correspond à la solution de l'équation de *Schrödinger* pour une masse purement imaginaire im et par suite il arrive à donner un sens à *l'intégrale de Feynman* pour une certaine classe de potentiels.

Donnons maintenant la définition de *l'intégrale de chemin*, telle que *Feynman* l'a donnée pour une particule non relativiste.

1.1.1 Diagramme des intégrales de Feynman "Feynman Path Integrals Diagram"

D'après l'idée de *Feynman*, le propagateur $K(x, t\ ; x_0, t_0)$, pour une particule non-relativiste, qui contient toute la dynamique du système et qui est interprété comme l'amplitude de probabilité pour que la particule, partie de x_0 à l'instant t_0, arrive à x à l'instant t, est donné par :

$$K(x, t\ ; x_0, t_0) = \sum_{x(t)} \Phi(x(t))$$

où $\Phi(x(t))$ est l'amplitude de probabilité pour le chemin $x(t)$, tel que $x(t) = x,\ x(t_0) = x_0$.

La question principale est : comment peut-on calculer cette somme sur tous les chemins possibles ?

Alors *Feynman* propose de discrétiser chaque chemin, en subdivisant l'intervalle $[t_0, t]$ en une subdivision régulière $[t_j, t_{j+1}]$ pour $j = 0, 1, ..., N-1$, où $t_N = t$ tel que

$\varepsilon = t_{j+1} - t_j$, i.e $N\varepsilon = (t - t_0)$, notons par $x(t_j) = x_j$ pour $j = 0, 1, ..., N$.

En utilisant l'idée de *Dirac*, qui stipule que l'amplitude de *transition élémentaire* est proportionnelle à $\exp(i\frac{S_{cl}}{\hbar})$) et par application du principe de superposition, *Feynman* déduit que, pour un ε assez petit :

$$K_N\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = (A)^N \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp(\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S_\varepsilon(x_j\ ,x_{j-1}\ ))\ dx_1 dx_2.....dx_{N-1}$$

où A est une certaine constante de normalisation et $S_\varepsilon(x_j\ ,x_{j-1}\ )$ est l'action classique sur l'intervalle infinitésimal $[t_j, t_{j+1}]$, $t_j - t_{j-1} = \varepsilon$, i.e

$$K_N\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N} K_\varepsilon\left(x_j,t_j\ ;x_{j-1},t_{j-1}\right)\ dx_1 dx_2.....dx_{N-1}$$

où $K_\varepsilon\left(x_j,t_j\ ;x_{j-1},t_{j-1}\right)$ est l'amplitude de *transition élémentaire* :

$$K_\varepsilon\left(x_j,t_j\ ;x_{j-1},t_{j-1}\right) \simeq A\exp(\frac{i}{\hbar}S_\varepsilon(x_j\ ,x_{j-1}\ ))$$

$K_N\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)$ n'est autre que l'amplitude de probabilité pour que la particule, partie de x_0 à l'instant t_0, arrive à x à l'instant t mais calculée seulement sur les chemins constitués des lignes brisées associées à la discrétisation $\{t_j\}$.

Feynman définit, alors, le propagateur $K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)$ comme limite des $K_N\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)$ pour $N \to \infty$ $(i.e\ \varepsilon \to 0)$:

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \lim_{N\to\infty} K_N\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) \tag{1.1}$$

$$i.e \quad K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \lim_{N\to\infty} (A)^N \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp(\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S_\varepsilon(x_j\ ,x_{j-1}\ ))\, dx_1 dx_2.....dx_{N-1} \tag{1.2}$$

pour plus de détails voir [15] .

Donc, pour le *Lagrangien* d'une particule, de masse m, dans un potentiel $V(x)$, qui est donné par :

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

et sans se restreindre à la généralité, pour donner plus de clarté à l'exposé, on peut supposer que x est une variable unidimensionnelle, alors l'amplitude de *transition élémentaire* est donnée par :

$$K(x_j, t_j\ ; x_{j-1}, t_{j-1}) \simeq \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right]\right)$$

et la relation (1.2) devient

$$K(x, t\ ; x_0, t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right]\right) dx_1 dx_2 ... dx_{N-1} \quad (1.3)$$

Sachant que l'action du système est définie par :

$$S(x(t)) = \int\limits_{t_0}^{t}\left[\frac{m}{2}\,\dot{x}^2(\tau) - V(x(\tau))\right] d\tau = \lim_{\varepsilon\to 0}\sum_{j=1}^{N}\varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2 - V(x_j)\right],$$

alors, *Feynman* réécrit (1.3) formellement comme une *intégrale fonctionnelle* de la forme

$$K(x, t\ ; x_0, t_0) = \int \exp\left(i\frac{S(x(t))}{\hbar}\right)\ \mathcal{D}x(t) \quad (1.4)$$

où $\mathcal{D}x(t)$ est la mesure formelle sur l'espace des chemins.

Pour les arguments et plus de détails concernant ce concept d'*intégrale fonctionnelle*, voir par exemple [15, 42].

Appliquons la relation (1.3) pour la particule libre, i.e :

$$L = \frac{m}{2}\,\dot{x}^2$$

on aura, alors :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\sum_{j=1}^{N}\left(x_j\ -x_{j-1}\right)^2\right)\ dx_1dx_2.....dx_{N-1}\qquad(1.5)$$

ce qui revient à un simple calcul de la limite sur des intégrales $Gaussiennes$ de la forme :

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left(\sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi^2}}\right)\exp\left[-\alpha\left(x_1\ -x_0\right)^2-\beta\left(x_2\ -x_1\right)^2\right]dx_1=\left(\sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi\left(\alpha+\beta\right)}}\right)\exp\left[-\frac{\alpha\beta}{\alpha+\beta}\left(x_2-x_0\right)^2\right]$$

et alors :

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\left(x_1\ -x_0\right)^2+\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\left(x_2\ -x_1\right)^2\right]\ dx_1=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\left(2\varepsilon\right)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\left(2\varepsilon\right)}\left(x_2\ -x_0\right)^2\right]\ ,$$

ainsi de suite, si on continue les intégrations successives dans (1.5), on aura finalement

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t-t_0\right)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\left(t-t_0\right)}\left(x\ -x_0\right)^2\right]$$

qui est bien le propagateur de la particule libre.

Remarque 01 :

On voit, bien, que grâce à la relation (1.3) le propagateur, pour la particule libre (non relativiste), est devenu un simple calcul d'intégrales Gaussiennes successives ; malheureusement ce n'est pas toujours le cas, car pour une particule dans un potentiel $V\left(x\right)$ la relation (1.3) peut générer certaines divergences, mais pour pouvoir faire des intégrations succesives, comme dans le cas de la particule libre, il est parfois un peu délicat et il est souvent recommandé de contourner le problème par d'autres considérations "conceptuelles" de $l'intégrale\ de\ chemin$. Toutefois la relation (1.2) $(i.e\ (1.3))$, qui est utilisée dans la plupart des applications, est l'objet principal pour la définition de $l'intégrale\ de\ Feynman$, qu'on note formellement par la relation (1.4).

1.1.2 Propriétés du propagateur :

Si on suppose que le propagateur donné par (1.2) (i.e (1.3)) est bien défini, i.e la limite existe dans un sens bien précis, alors on a :

Proposition 01

Si le *Lagrangien* ou *l'hamiltonien* sont indépendants du temps alors le propagateur $K(x, t\ ; x_0, t_0)$ vérifie la propriété suivante :

$$K(x, t\ ; x_0, t_0) = K(x, t - t_0\ ;\ x_0, 0) \tag{1.6}$$

Proposition 02 : (propriété du semi-groupe)

Le propagateur $K(x, t\ ; x_0, t_0)$ vérifie la propriété suivante :

$$K(x, t\ ; x_0, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t\ ; x_1, t_1)\, K(x_1, t_1 ; x_0, t_0)\ dx_1 \quad si \quad t > t_1 > t_0 \tag{1.7}$$

Cette propriété découle directement de la définition du propagateur (relation (1.4)) et du principe de superposition, ainsi que du fait que l'action du système est :

$$S_{x_0}^{x}(x(t)) = \int_{t_0}^{t} L(\dot{x}, x, \tau)\, d\tau = \int_{t_0}^{t_1} L(\dot{x}, x, \tau)\, d\tau + \int_{t_1}^{t} L(\dot{x}, x, \tau)\, d\tau = S_{x_0}^{x_1}(x(t)) + S_{x_1}^{x}(x(t))\ .$$

Proposition 03 :

La solution de l'équation de *Schrödinger* (pour une particule non relativiste) :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t)$$

est donnée par

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right)\Psi(x_0,t_0)\,dx_0 \qquad\qquad t > t_0 \tag{1.8}$$

où $K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right)$ est le propagateur donné par (1.3).

Remarque 02 :

Physiquement parlant, la fonction d'onde $\Psi(x,t)$, qui est interprétée comme étant l'amplitude de probabilité pour que la particule soit au point x à l'instant t, la relation (1.8) exprime que $\Psi(x,t)$ est la somme sur toutes les valeurs possibles de x_0 de l'amplitude de probabilité d'être au point x_0 à l'instant t_0 multipliée par l'amplitude de probabilité pour que la particule, partie de x_0 à l'instant t_0, arrive à x à l'instant t.

Proposition 04 :

$K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right)$ vérifie aussi l'équation de *Schrödinger* pour les deux variables (x,t) i.e

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right) + V(x)K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right) \quad \text{pour} \quad t > t_0 \tag{1.9}$$

où Δ_x désigne le Laplacien sur la variable x et en plus :

$$\lim_{t\to t_0} K\left(x,t\ ; x_0,t_0\right) = \delta(x-x_0) \tag{1.10}$$

Pour plus de détails concernant ces propositions, voir par exemple $[12,15,42]$.

Remarque 03 :

Mathématiquement parlant, d'après les deux résultats précédents $[i.e\ Proposition - 3)\ et\ 4)]$ le propagateur $K(x,t\ ;x_0,t_0)$ définit bien la fonction de *Green* pour l'équation de *Schrödinger*, c'est-à-dire que si on note par

$$G(x,t\ ;x_0,t_0) = \Theta(t-t_0)\,K(x,t\ ;x_0,t_0)$$

où $\Theta(t-t_0)$ est la fonction de *Heaviside*.

Alors par un simple calcul on peut vérifier que $G(x,t\ ;x_0,t_0)$ est solution de l'équation

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x - V(x)\right] G(x,t\ ;x_0,t_0) = i\hbar\delta(x-x_0)\delta(t-t_0) \tag{1.11}$$

qui n'est autre que l'équation qui définit la fonction de *Green* pour l'équation de *Schrödinger*.

Remarque 04 :

On voit donc, d'après ce qui précède, la formulation "*Path integrals*" de la mécanique quantique donne plus d'informations sur le système que l'équation de *Schrödinger*, car cette même équation en est une conséquence et encore plus, comme on peut le voir par exemple dans $[15, 42, 30]$, elle présente d'autres aspects positifs pour l'étude des phénomènes quantiques, même que techniquement elle est encore confrontée à des problèmes "conceptuels".

1.1.3 Formule de Trotter et Intégrale de Feynman

Dans cette section on va donner une autre alternative pour déduire *l'intégrale de Feynman*, qui fait appel à la théorie des semi-groupes, plus particulièrement la formule de *Trotter* (voir $[38, 41, 46]$) . D'après la section précédente, dans la proposition 03) on a la relation (1.8) , qui relie deux états du système à l'instant t_0 et à un instant t ultérieur à t_0, qui se traduit en théorie des semi-groupes, que pour tout $t > t_0$ l'état du système (i.e la solution de l'équation de $Schrödinger$) $\Psi(x,t)$ est donné par le semi-groupe $\exp\left[\frac{-i(t-t_0)H}{\hbar}\right]$, comme suit :

$$\Psi(x,t) = \exp\left[\frac{-i\,(t-t_0)\,H}{\hbar}\right]\Psi(x,t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)\Psi(x_0,t_0)\,dx_0 \tag{1.12}$$

où H est $l'Hamiltonien$ du système (indépendant du temps), le semi-groupe $\exp\left[\frac{-i(t-t_0)H}{\hbar}\right]$ est appelé, en physique, l'opérateur d'évolution.

Donc de cette dernière relation (1.12) pour $t > t_1 > t_0$ on aura :

$$\Psi(x,t) = \exp\left[\frac{-i\,(t-t_1)\,H}{\hbar}\right]\Psi(x,t_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} K\left(x,t\ ;x_1,t_1\right)\Psi(x_1,t_1)\ dx_1$$

et

$$\Psi(x_1,t_1) = \exp\left[\frac{-i\,(t_1-t_0)\,H}{\hbar}\right]\Psi(x_1,t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} K\left(x_1,t_1\ ;x_0,t_0\right)\Psi(x_0,t_0)\ dx_0$$

c'est-à-dire que (1.12) devient :

$$\Psi(x,t) = \exp\left[\frac{-i\,(t-t_0)\,H}{\hbar}\right]\Psi(x,t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} K\left(x,t\ ;x_1,t_1\right)K\left(x_1,t_1\ ;x_0,t_0\right)\Psi(x_0,t_0)\,dx_0\,dx_1 \tag{1.13}$$

ainsi de suite pour une subdivision, $t > t_{N-1} > .... > t_1 > t_0$, de l'intervalle $[t_0,t]$, on aura :

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \exp\left[\frac{-i\,(t-t_0)\,H}{\hbar}\right]\Psi(x,t_0)\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{k=1}^{N} K\left(x_k,t_k\ ;x_{k-1},t_{k-1}\right)\Psi(x_0,t_0)\ dx_0\ dx_1dx_2.....dx_{N-1}\end{aligned} \tag{1.14}$$

où $\Psi(x_j,t_j) = \exp\left[\frac{-i\left(t_j - t_{j-1}\right)H}{\hbar}\right]\Psi(x_j,t_{j-1}) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} K\left(x_j,t_j\ ;x_{j-1},t_{j-1}\right)\Psi(x_{j-1},t_{j-1})\,dx_{j-1}$

pour $j = 1,2,...,N\ ,\ x_N = x\ ,\ t_N = t\ .$

Alors en comparant (1.12) et (1.14) on déduit que :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^{N} K\left(x_k,t_k\ ;x_{k-1},t_{k-1}\right)\ dx_1dx_2.....dx_{N-1} \qquad (1.15)\,.$$

Sachant que d'après la formule de $Trotter$, qui nous assure que si deux opérateurs A et B ne commutent pas et qui vérifient certaines conditions, on a :

$$\lim_{N\to\infty}\left(e^{\frac{-it}{\hbar N}A}e^{\frac{-it}{\hbar N}B}\right)^N = e^{\frac{-it}{\hbar}(A+B)} \qquad (1.16)\ ,$$

par exemple si A et B sont deux opérateurs bornés alors (1.16) est toujours vraie, ou encore si A et B sont autoadjoints non bornés et l'opérateur $A+B$ est autoadjoint la relation (1.16) est aussi valable au sens fort. Pour plus de détails concernant la formule de $Trotter$ et dans quels cas elle est valable(voir $[41]$, en particulier $[38,46]$).

Donc pour $l'Hamiltonien$ $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x + V(x) \equiv A+B$, $(x \in R^n)$ i.e $A = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x$ et $B = V(x)$, et si on suppose que la relation (1.16) est valable (voir $[41]$), c'est-à-dire :

$$\exp\left[\frac{-i\left(t-t_0\right)H}{\hbar}\right] = \lim_{N\to\infty}\left(\exp\left(\frac{-i\left(t-t_0\right)}{\hbar N}A\right)\exp\left(\frac{-i\left(t-t_0\right)}{\hbar N}B\right)\right)^N \qquad (1.17)$$

alors de cette dernière relation (1.17) et pour une subdivision régulière telle que $t_j - t_{j-1} = \frac{t-t_0}{N} = \varepsilon$, en appliquant N fois l'opérateur $\exp\left(\frac{-i(t-t_0)}{\hbar N}A\right)\exp\left(\frac{-i(t-t_0)}{\hbar N}B\right)$, comme précédemment dans (1.14), on aura :

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \exp\left[\frac{-i\,(t-t_0)\,H}{\hbar}\right]\Psi(x,t_0) \\ &= \lim_{N\to\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\prod_{j=1}^{N}\tilde{K}\left(x_k,t_k\ ;x_{k-1},t_{k-1}\right)\Psi(x_0,t_0)\ dx_0\ dx_1dx_2.....dx_{N-1} \qquad (1.18)\end{aligned}$$

où $\tilde{K}\left(x_k,t_k\ ;x_{k-1},t_{k-1}\right)$ est le noyau de l'opérateur $\exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}A\right)\exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}B\right)$, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\Psi(x_j,t_j) &= \exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}A\right)\exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}B\right)\Psi(x_j,t_{j-1}) \\ &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\tilde{K}\left(x_j,t_j\ ;x_{j-1},t_{j-1}\right)\Psi(x_{j-1},t_{j-1})\ dx_{j-1}\end{aligned}$$

et la relation (1.15) devient

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \lim_{N\to\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\prod_{j=1}^{N}\tilde{K}\left(x_k,t_k\ ;x_{k-1},t_{k-1}\right)\ dx_1dx_2.....dx_{N-1} \qquad (1.19)$$

De même, sachant que :

$$\exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}B\right)\Psi(x_j,t_{j-1}) = \exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}V\left(x_j\right)\right)\Psi(x_j,t_{j-1})$$

$$\exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}A\right)\Psi(x_j,t_{j-1}) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{n}{2}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar}\frac{\left|x_j\ -x_{j-1}\right|^2}{\varepsilon}\right)\Psi(x_{j-1},t_{j-1})dx_{j-1}$$

c'est-à-dire :

$$\tilde{K}\left(x_k,t_k\ ;x_{k-1},t_{k-1}\right) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{n}{2}}\exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\frac{\left|x_j\ -x_{j-1}\right|^2}{\varepsilon^2} -\ V\left(x_j\right)\right]\right)$$

alors on en dèduit que :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{nN}{2}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{m}{2}\frac{\left|x_j\ -x_{j-1}\right|^2}{\varepsilon^2}-V\left(x_j\right)\right]\right)\ dx_1dx_2..dx_{N-1}\quad(1.20)$$

Mais cette dernière relation n'est autre que la relation (1.3) , qui définit le propagateur comme étant une intégrale fonctionnelle, *l'intégrale de Feynman.*

Beaucoup d'auteurs travaillent dans ce sens, pour ne citer que les traveaux de *T.Ichinose* $[22-29]$ où il traite une multitude de problèmes, qui sont tous développés dans le formalisme "*Path intégral*" mais en utilisant la version semi-groupe, c'est-à-dire "*formule de Trotter*".

Remarque 05 :

Sachant que :

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

ce qui donne une expression du noyau de l'opérateur $\exp\left(\frac{-i\varepsilon}{\hbar}A\right)$ dans l'espace de *Fourier*, et par suite la relation (1.20) peut s'écrire comme suit :

$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=$

$$=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^n}\right)^N\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left(-\varepsilon\left[\frac{p_j^2}{2m}+V\left(x_j\right)\right]+p_j\left(x_j-x_{j-1}\right)\right)\right)\prod_{j=1}^{N-1}dx_j\prod_{j=1}^{N}dp_j\quad(1.21)$$

mais $H\left(p\ ,\ x\right)=\frac{p^2}{2m}+V\left(x\right)$ n'est autre que *l'Hamiltonien* du système ($x\in R^n$ et $p\in R^n$), mais exprimé dans l'espace des phases, donc :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^n}\right)^N\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\sum_{j=1}^{N}-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H\left(p_j\right)+\frac{i}{\hbar}p_j\left(x_j-x_{j-1}\right)\right)\prod_{j=1}^{N-1}dx_j\prod_{j=1}^{N}dp_j\quad(1.22)$$

ce qui permet d'écrire formellement le propagateur de *Feynman* dans l'espace des phases comme suit :

$$K(x,t\ ;x_0,t_0)=\int \mathcal{D}x\mathcal{D}p\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[p\dot{x}-H(p)\right]d\tau\right)$$

Il est à noter, ici, que dans la plupart des applications de "$l'int\acute{e}grale\ de\ Feynman$"c'est la relation (1.3) ($i.e$ (1.2)) ou la relation (1.22) ($i.e$ (1.21)), qui sont le plus souvent utilisées.

1.1.4 Intégrale de Feynman et Série de Perturbation

En utilisant le diagramme de $Feynman$, pour l'intégrale de chemin, on peut écrire le propagateur sous forme d'une série qu'on appelle habituellement $S\acute{e}rie\ de\ Perturbation$ et qui est, aussi, importante pour le formalisme "$int\acute{e}grale\ de\ Feynman$"dans la plupart des applications.

Prenons la relation (1.3), qui définit le propagateur comme étant une intégrale fonctionnelle ($int\acute{e}grale\ de\ Feynman$), qui s'écrit formellement par la relation (1.4) :

$$\begin{aligned}K(x,t\ ;x_0,t_0) &= \int \exp\left(i\frac{S(x(t))}{\hbar}\right)\ \mathcal{D}x(t)\\ &= \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\left(\frac{m}{2}\ \dot{x}^2-V(x)\right)d\tau\right]\ \mathcal{D}x(t)\end{aligned}\tag{1.23}$$

puisque :

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V(x)\,d\tau\right]=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k\left(\int_{t_0}^{t}V(x(\tau))\,d\tau\right)^k$$

la relation (1.23) se réécrit, alors :

$$K(x,t\ ;x_0,t_0)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k\int \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t_0}^{t}\dot{x}^2d\tau\right]\left(\int_{t_0}^{t}V(x(\tau))\,d\tau\right)^k\mathcal{D}x(t)\tag{1.24}$$

écrivons le premier terme de la série$(k=0)$:

$$K_0\left(x,t\;;x_0,t_0\right) = \int \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t_0}^{t} \dot{x}^2 d\tau\right] \mathcal{D}x(t)$$
$$= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\left(t-t_0\right)}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\left(t-t_0\right)}\left|x - x_0\right|^2\right] \tag{1.25}$$

qui n'est autre que le propagateur de la particule libre. Le second terme $(k=1)$ de la série contient un terme de la forme :

$$K_1\left(x,t\;;x_0,t_0\right) = \int \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t_0}^{t} \dot{x}^2 d\tau\right] \left(\int_{t_0}^{t} V\left(x\left(\tau\right)\right) d\tau\right) \mathcal{D}x(t) \tag{1.26}$$

si on utilise la définition de *l'intégrale de Feynman*, comme étant une limite d'une superposition d'intégrales ($i.e$ la relation (1.3)), alors :

$$K_1\left(x,t\;;x_0,t_0\right) = \lim_{N\to\infty}\sum_{l=0}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\triangle t}\right)^{\frac{nN}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\frac{im}{2\hbar\triangle t}\sum_{j=1}^{N}\left|x_j - x_{j-1}\right|^2\right]\left(\triangle t\right)V\left(x_l\right)\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \tag{1.27}$$

et de là on peut, facilement, déduire que :

$$K_1\left(x,t\;;x_0,t_0\right) = \int_{t_0}^{t}\int_{-\infty}^{+\infty} K_0\left(x,t\;;\xi,\tau\right)V\left(\xi\right)K_0\left(\xi,\tau\;;x_0,t_0\right)d\xi d\tau \tag{1.28}$$.

Ainsi de suite, si on définit $K_k\left(x,t\;;x_0,t_0\right)$ par :

$$K_k\left(x,t\;;x_0,t_0\right) \equiv \frac{1}{k!}\int \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t_0}^{t} \dot{x}^2 d\tau\right] \left(\int_{t_0}^{t} V\left(x\left(\tau\right)\right) d\tau\right)^k \mathcal{D}x(t) \tag{1.29}$$

et sachant que :

$$\left(\int_{t_0}^{t} f(\tau)\,d\tau\right)^k = k!\int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 ... \int_{t_0}^{\tau_{k-1}} d\tau_n \ f(\tau_1)\,f(\tau_2)\,....f(\tau_k) \ ,$$

cette relation se démontre facilement par récurrence.

Alors (1.29) devient :

$$K_k(x,t\ ;x_0,t_0) = \int \exp\left[\frac{im}{2\hbar}\int_{t_0}^{t} \dot{x}^2 d\tau\right] \int_{t_0}^{t} d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 .. \int_{t_0}^{\tau_{k-1}} d\tau_n\, V(x(\tau_1))\,V(x(\tau_2))\,..V(x(\tau_k))\,\mathcal{D}x(t)$$

$$i.e \quad K_k(x,t\ ;x_0,t_0) = \int_{t_0}^{t} \int_{-\infty}^{+\infty} K_0(x,t\ ;\xi,\tau)\,V(\xi)\,K_{k-1}(\xi,\tau\ ;x_0,t_0)\,d\xi d\tau \qquad (1.30)$$

et la relation (1.24) sera, donc :

$$K(x,t\ ;x_0,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \ K_k(x,t\ ;x_0,t_0) \qquad (1.31)$$

où les $K_k(x,t\ ;x_0,t_0)$ sont donnés par (1.30) , c'est cette série qui est appelée "*série de perturbation*", qui est toujours utilisée dans la plupart des applications.

Tout ce qu'on a exposé dans cette section, on peut le retrouver, dans les moindres détails, dans *L.S. Schulman* Techniques and Applications of Path Integration [42] .

Chapitre 2

Applications

Première partie

Problème non relativiste

2.0.5 Introduction

En mécanique quantique, il existe des problèmes qui peuvent être facilement résolus, qui sont reliés à des systèmes un peu particuliers et très simples. Mais la plupart des problèmes physiques ne peuvent pas être traités d'une manière exacte ; pratiquement, aucun système physique ne peut être étudié sans les méthodes d'approximation. Il est alors nécessaire de développer différentes méthodes d'approximation permettant d'approcher le résultat exact avec une précision appropriée. La méthode d'approximation la plus populaire et qui est largement utilisée en mécanique quantique est la théorie des perturbations, qui permet de résoudre approximativement des problèmes complexes ou compliqués. Elle nous offre une méthode efficace pour calculer les solutions approchées de nombreux problèmes qui ne peuvent pas être résolus de façon exacte. Comme dans la mécanique quantique standard, la méthode de perturbation peut être développée dans le cadre de l'intégrale $de\ Feynman$ dite version géométrique de mécanique quantique [15].

Dans les dernières décennies, cette technique de perturbation via l'intégrale $de\ Feynman$ a été utilisée pour de nombreux problèmes, par exemple le calcul de la fonction de $Green$ pour les problèmes de potentiel en forme de la distribution delta [18, 21, 34], pour des systèmes de *Coulomb* non-relativistes [4], pour les problème relativistes en additionnant la série de perturbation à des séries en forme de delta [35], et pour le problème relativiste de *Coulomb* [36], et encore plus, l'approche perturbative a été utilisée avec succès pour déduire la fonction de $Green$ dépendant de l'énergie pour le potentiel inverse carré [5] , et récemment pour le potentiel step [2].

Dans cette section on calcule la fonction de $Green$ de l'équation de $Schrödinger$ pour le potentiel de $Morse$ en utilisant la série de perturbation. Par la transformation de $Fourier$ sur le point final de la série de perturbation, on arrive à trouver une formule récurrente sur les termes, qui générent la transformée de $Fourier$ de la séries de perturbation, et de là on arrive à déduire la fonction de $Green$ du problème considéré. Ce qui rajoute, en quelque sorte, une petite contribution à la méthode de perturbation, car personne, à notre connaissance, n'a jamais utilisé la méthode de perturbation pour le calcul de la fonction de Green dépendant de l'énergie d'un système Morse(pour des états liés, pour lesquels l'énergie est négative). Toutefois, nous devons mentionner que la fonction de Green du potentiel de $Morse$ a été calculée par différents auteurs utilisant la méthode standard de la mécanique quantique [33], ou par l'intégrale $de\ Feynman$ $[31, 10, 16, 45]$.

2.1 La fonction de Green pour le potentiel de Morse via la série de perturbation

2.1.1 La série de perturbation pour le potentiel de Morse

Considérons le $Lagrangien$ classique avec une masse unité $(m = 1)$:

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

$$où \qquad V(x) = V_0(\exp(-2x) - 2\exp(-x))$$

et $V_0 > 0$ est l'intensité du potentiel. Le propagateur de $Feynman$ est défini (en prenant $\hbar = 1$) par :

$$K(x, T/x_0, 0) = \int_{x(0)=x_0}^{x(T)=x} D[x(t)] \exp(i \int_0^T L(x, \dot{x}, t) dt) \tag{2.2}$$

où $D[x(t)]$ est la mesure formelle définie sur l'espace des chemins. Si on partage le lagrangien en la partie libre et la partie intéraction, nous pouvons montrer que le propagateur prend la forme :

$$K(x, T/x_0, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} (i)^n K_n(x, T/x_0, 0) \tag{2.3}$$

$$\text{où} \qquad K_n(x,T/x_0,0) = (-1)^n \int_0^T dt_n .... \int_0^{t_2} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} .... \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=0}^{j=n} K_0(x_{j+1}, t_{j+1}/x_j, t_j) \prod_{j=1}^{j=n} V(x_j) dx_j \tag{2.4}$$

qui n'est autre que la formule (1.31) pour définir la série de perturbation.

Prenons, maintenant, la transformation de *Fourier* de $K_n(x, T/x_0, 0)$ sur le temps :

$$G_n(x, x_0 : E) = G_n(x, x_0) = \int_0^\infty K_n(x, T/x_0, 0) \exp(iET) dT \tag{2.5}$$

qu'on peut écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} G_n(x,x_0) &= (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} .... \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=0}^{j=n} G_0(x_{j+1}, x_j) \prod_{j=1}^{j=n} V(x_j) dx_j \\ &= (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n G_0(x, x_n) V(x_n) \prod_{j=0}^{j=n-1} G_0(x_{j+1}, x_j) \prod_{j=1}^{j=n-1} V(x_j) dx_j \\ &= -\int_{-\infty}^{+\infty} dx_n G_0(x, x_n) V(x_n) G_{n-1}(x_n, x_0) \end{aligned} \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned} \text{où} \qquad G_0(x, x_n) &= \int_0^\infty dT . K_0(x, T : x_n, 0) \exp(iET) \\ &= \int_0^\infty \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT . \exp\left(iET + \frac{i}{2T}(x - x_n)^2\right). \end{aligned} \tag{2.7}$$

Alors si on réécrit $V(x)$ sous une forme, encore, plus convenable :

$$V(x) = V_0(\exp(-2x) - 2\exp(-x)) = 4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \exp(-sx) \tag{2.8}$$

et en utilisant (2.7), l'équation (2.6) devient :

$$G_n(x,x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT. \exp{(iET)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n. \exp\left(-sx_n + \frac{i}{2T}(x-x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n,x_0) = \tag{2.9}$$

$$-4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \exp(-sx) \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT. \exp{(iET)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n. \exp\left(s(x-x_n) + \frac{i}{2T}(x-x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n,x_0) \tag{2.10}$$

Prenons maintenant la transformation de $Fourier$ de $G_n(x,x_0)$ sur le point final x,c'est-à-dire :

$$\widetilde{G_n}(\omega,x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i\omega x) G_n(x,x_0)$$

$$= -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT. \exp{(iET)} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp((i\omega - s)x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n. \exp\left(s(x-x_n) + \frac{i}{2T}(x-x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n,x_0) \tag{2.11}$$

Notons ici que les intégrales sur x et x_n ont une forme de convolution et par un calcul simple on aura :

$$\widetilde{G_n}(\omega,x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^{\infty} dT \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} \exp{(iET)} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i\Omega x) \exp(sx + \frac{i}{2T}x^2)\right] \widetilde{G_{n-1}}(\Omega,x_0) \tag{2.12}$$

où $\Omega = \omega + is$.

Sachant que l'intégrale entre crochets est :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i\omega x + \frac{i}{2T}x^2) = \sqrt{2i\pi T}\exp(-\frac{i\omega^2 T}{2}), \tag{2.13}$$

on trouve que :

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^{\infty} dT. \exp iT\left(E - \frac{\omega^2}{2}\right) \widetilde{G_{n-1}}(\Omega, x_0) \tag{2.14}$$

Donc si on calcule, l'intégrale sur T, et parce que nous sommes préoccupés par les états liés, pour lesquels E est négative ($E = -\varepsilon^2$), alors :

$$-2if_0(\omega) \equiv \int_0^{\infty} dT. \exp iT\left(E - \frac{\omega^2}{2}\right) = \int_0^{\infty} dT. \exp\left[-iT\left(\varepsilon^2 + \frac{\omega^2}{2}\right)\right] = \frac{-2i}{2\varepsilon^2 + \omega^2} \tag{2.15}$$

Après avoir inséré la dernière formule(2.15), on trouve, après sommation sur s (*voir* (2.14)), une relation de récurrence pour $n \geq 1$ de la forme :

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = 2iV_0 f_0(\omega)\left[\widetilde{G_{n-1}}(\omega + 2i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-1}}(\omega + i, x_0)\right] \tag{2.16}$$

alors, pour l'ordre inférieur d'un cran, cette dernière équation se traduit par :

$$\widetilde{G_{n-1}}(\omega + i, x_0) = iV_0\left(\frac{2}{2\epsilon^2 + (\omega + i)^2}\right)\left[\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 3i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 2i, x_0)\right] \tag{2.17}$$

$$\widetilde{G_{n-1}}(\omega + 2i, x_0) = iV_0\left(\frac{2}{2\epsilon^2 + (\omega + 2i)^2}\right)\left[\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 4i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 3i, x_0)\right] \tag{2.18}$$

Ainsi de suite et si on continue la récurrence à un ordre, encore, plus inférieur, on trouve qu'à la fin on doit calculer l'expression de $\widetilde{G_0}(\omega+ni,x_0)$, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned}\widetilde{G_0}(\omega+ni,x_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\exp(i(\omega+ni)x)G_0(x,x_0)\\ &= -\left(\frac{2i}{2\varepsilon^2+(\omega+ni)^2}\right)\exp(i\omega-n)x_0\\ &= -2if_n(\boldsymbol{\omega})\exp(i\omega-n)x_0 \qquad (2.19)\end{aligned}$$

où
$$f_n(\omega)=\frac{1}{2\varepsilon^2+(\omega+ni)^2}\ ;\ n=1,2..... \quad . \qquad (2.20)$$

Donc pour $n=1$ dans (2.16) on trouve :

$$\widetilde{G_1}(\omega,x_0)\ = 2^2V_0\ f_0(\omega)\exp(i\omega x_0)\left[f_2(\omega)\exp(-2x_0)\ -\ 2f_1(\omega)\exp(-x_0)\right]$$

et pour $n=2$ on a :

$$\begin{aligned}\widetilde{G_2}(\omega,x_0) &= i2^3V_0^2f_0(\omega)\exp(i\omega x_0)\\ &\quad [f_2(\omega)f_4(\omega)\exp(-4x_0)-2f_2(\omega)f_3(\omega)\exp(-3x_0)\\ &\quad -2f_1(\omega)f_3(\omega)\exp(-3x_0)+4f_1(\omega)f_2(\omega)\exp(-2x_0)]\end{aligned}$$

de la même manière, on obtient les autres termes et ainsi de suite, en utilisant la relation de récurrence (2.16), nous pouvons montrer que chaque terme $\widetilde{G_n}(\omega,x_0)$ s'écrit comme une somme d'exponentielles, $\exp(-kx_0)$, c'est-à-dire :

$$\widetilde{G_n}(\omega,x_0)=\sum_{k=n}^{k=2n}C_k(\omega)\exp(-kx_0) \qquad (2.21)$$

et puisque $\widetilde{G}(\omega,x_0)$ est de la forme :

$$\widetilde{G}(\omega,x_0)=\sum_{n=0}^{\infty}(i)^n\,\widetilde{G_n}(\omega,x_0),$$

Alors de (2.21), si on regroupe tous les termes en puissance de $\exp(-x_0)$, on peut montrer que :

$$\widetilde{G}(\omega, x_0) = 2if_0(\omega)\exp(i\omega x_0)\left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega)\exp(-nx_0)\right], \tag{2.22}$$

où les coefficients $a_n(\omega)$ satisfont à la formule de récurrence suivante :

$$a_n(\omega) = 2V_0 f_n(\omega)\left(2a_{n-1}(\omega) - a_{n-2}(\omega)\right) \tag{2.23}$$

ou bien
$$\left(2\varepsilon^2 + \omega^2 - n^2 + 2ni\omega\right)a_n(\omega) = 2V_0(2a_{n-1}(\omega) - a_{n-2}(\omega)) \tag{2.24}$$

avec $a_{-1} = 0$, $a_0 = -1$; $a_1(\omega) = -4V_0 f_1(\omega)$ etc....

Notons la série entre crochets dans (2.22) par :

$$F(X) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega)X^n \tag{2.25}$$

pour $X = \exp(-x_0)$.

On pourra, alors, facilement vérifier que la série $F(X)$, qui est la fonction génératrice des $a_n(\omega)$, satisfait l'équation différentielle :

$$X^2F''(X) + X(1-2i\omega)F'(X) - \left(2\varepsilon^2 + \omega^2 - 4XV_0 + 2X^2V_0\right)F(X) = 2\varepsilon^2 + \omega^2. \tag{2.26}$$

Alors de (2.25) et (2.26), nous constatons que $\widetilde{G}(\omega, X)$ doit satisfaire à l'équation différentielle :

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dX}\left(X^2\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)\right) + \frac{1}{2}X\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X) + \left[V_0(X^2 - 2X) + \varepsilon^2\right]\widetilde{G}(X) = -iX^{-i\omega} \tag{2.27}$$

Mais cette équation est équivalente à celle qui régit la fonction de *Green*, elle-même, écrite dans une autre forme pour la variable $X = \exp(-x_0)$ et l'introduction de la transformation de *Fourier* sur le point final x, c'est-à-dire :

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx_0^2}+V(x_0)+\varepsilon^2\right]G(x,x_0/E)=-i\delta(x_0-x). \tag{2.28}$$

Revenons à l'équation homogène associée à (2.27), c'est-à-dire :

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dX}\left(X^2\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)\right)+\frac{1}{2}X\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)+\left[V_0(X^2-2X)+\varepsilon^2\right]\widetilde{G}(X)=0 \tag{2.29}$$

qui est une équation *hypergéométrique* avec deux solutions linéairement indépendantes :

$$\breve{G}_1(X)=X^{-\frac{1}{2}}M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}X\right)$$

$$\breve{G}_2(X)=X^{-\frac{1}{2}}W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}X\right)$$

où $M_{\alpha,\beta}$, $W_{\alpha,\beta}$ sont les fonctions de $Whittaker$ [20].

De là on peut, facilement, voir que le changement de variable $X=exp(-x)$ est le changement de variable approprié pour transformer l'équation (2.28) en une équation *hypergéométrique* (ie, équation (2.29)).

Donc, avec la même astuce que ci-dessus $(X=\exp(-x))$, l'équation (2.29) sera équivalente à :

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)+\varepsilon^2\right]\Psi=0 \tag{2.30}$$

Alors des solutions de l'équation (2.29), nous pouvons conclure que :

$$G_1(x)=\exp(\frac{x}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)$$

$$G_2(x)=\exp(\frac{x}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)$$

sont deux solutions linéairement indépendantes de l'équation (2.30) qui satisfont aux conditions :

$$\lim_{x\to+\infty}G_1(x)=0 \quad ; \quad \lim_{x\to-\infty}G_2(x)=0$$

Par ailleurs, selon certains résultats dans [9], on sait que la fonction de $Green$ de l'équation (2.30), qui est notre solution de l'équation (2.28), à savoir notre fonction de $Green$ initiale, est donnée sous la forme suivante :

$$G(x,y) = \begin{cases} \frac{G_2(y)G_1(x)}{W} & si \quad y < x \\ \frac{G_2(x)G_1(y)}{W} & si \quad x < y \end{cases}$$

où W est le $Wronskien$ de $G_1,\ G_2$.

En utilisant quelque propriétés des fonctions de $Whittaker$ [1] on trouve que :

$$W = \frac{2\sqrt{2V_0}\Gamma\left(1+2\sqrt{-2E}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-2E}+\sqrt{2V_0}\right)}.$$

Finalement, la fonction de $Green$ prend la forme :

$$\begin{aligned} G(x,y) &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-2E}+\sqrt{2V_0}\right)}{2\sqrt{2V_0}\Gamma\left(1+2\sqrt{-2E}\right)} \exp\frac{1}{2}(x+y). \\ &\left\{\Theta(x-y)\, W_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-y)\right) M_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) + \right. \\ &\left. \Theta(y-x)\, W_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) M_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-y)\right)\right\} \end{aligned}$$

où $\Theta(x)$ designe la fonction de $Heaviside$. Ce résultat a été trouvé précédemment par différentes méthodes[10, 16, 31, 45].

Cette section a fait l'objet d'une publication dans $Turk.J.Phys$ (31-(2007)-pp 197-203) intitulée "$Green$ Function of the $Morse$ Potential Using $Perturbation\ Series$" (publication ci-jointe).

2.2 La somme exacte de la série de perturbation pour le potentiel de Morse

Cette section développe les mêmes idées que la section précédente, où nous avons calculé la fonction de *Green* du potentiel *Morse*, en utilisant la série de perturbation de *Feynman* sans qu'on fait le calcul exact de la somme de la série de perturbation. Mais ici nous sommes en mesure de calculer la somme exacte de la série de perturbation de *Feynman*, en utilisant la transformation de *Fourier* et la transformation inverse de *Fourier*.

On est, donc, toujours intéressé au calcul du propagateur par la série de perturbation de *Feynman*, c'est à dire la fonction de *Green* du potentiel de *Morse* unidimensionnel :

$$V(x) = V_0(\exp(-2x) - 2\exp(-x)),$$

qu'on écrit comme suit :

$$V(x) = 4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \exp(-sx) \tag{2.31}$$

où $V_0 > 0$ est l'intensité du potentiel. Le propagateur de *Feynman*, qui est défini (en prenant $\hbar = 1$) par :

$$K(x, T/x_0, 0) = \int_{x(0)=x_0}^{x(T)=x} D[x(t)] \exp(i \int_0^T L(x, \dot{x}, t) dt) \tag{2.32}$$

où L est le *Langrangien* du problème et $D[x(t)]$ est la mesure formelle définie sur l'espace des chemins.

On sait, déjà d'après la section précédente, que :

$$K(x, T/x_0, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} (i)^n K_n(x, T/x_0, 0) \tag{2.33}$$

où $$K_n(x, T/x_0, 0) = (-1)^n \int_0^T dt_n .... \int_0^{t_2} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} .... \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=0}^{j=n} K_0(x_{j+1}, t_{j+1}/x_j, t_j) \prod_{j=1}^{j=n} V(x_j) dx_j \tag{2.34}$$

Prenons la transformation de $Fourier$ de $K_n(x, T/x_0, 0)$ sur T comme suit :

$$G_n(x, x_0 : E) = G_n(x, x_0) = \frac{1}{i} \int_0^{\infty} K_n(x, T/x_0, 0) \exp(iET) dT. \tag{2.35}$$

Donc avec les mêmes astuces de calcul et pour les mêmes raisons, que dans la section précédente, pratiquement on peut continuer de la même manière pour déduire la somme exacte de la série de perturbation, mais ici à un moment donné on calcul l'inverse de la transformation de $Fourier$.

En effet, si on écrit cette dernière expression sous la forme :

$$G_n(x, x_0) = i \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n G_0(x, x_n) V(x_n) G_{n-1}(x_n, x_0) \tag{2.36}$$

où $$G_0(x, x_n) = \frac{1}{i} \int_0^{\infty} dT . K_0(x, T : x_n, 0) \exp(iET)$$

$$= \frac{1}{i} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT . \exp\left(iET + \frac{i}{2T}(x - x_n)^2\right) \tag{2.37}$$

en utilisant les équations (2.31), (2.37), alors (2.36) devient :

$$G_n(x, x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT . \exp(iET)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n.\exp\left(-sx_n + \frac{i}{2T}(x-x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n, x_0)$$

$$G_n(x,x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \exp(-sx) \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT.\exp(iET)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n.\exp\left(s(x-x_n) + \frac{i}{2T}(x-x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n, x_0) \qquad (2.38)$$

En introduisant la transformation de $Fourier$ sur le point final x dans cette denière formule et en utilisant le théorème de convolution de la transformation de $Fourier$, on obtient alors :

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = -4V_0.\sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^{\infty} dT.\exp iT\left(E - \frac{\omega^2}{2}\right) \widetilde{G_{n-1}}(\omega + is, x_0) \qquad (2.39)$$

$$i.e \qquad \widetilde{G_n}(\omega, x_0) = 2iV_0 f_0(\omega)\left[\widetilde{G_{n-1}}(\omega + 2i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-1}}(\omega + i, x_0)\right] \quad n \geq 1 \ ; \qquad (2.40)$$

$$où \qquad \widetilde{G_n}(\omega, x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega x) G_n(x, x_0) dx \qquad (2.41)$$

$$f_0(\omega) = i\int_0^{\infty} dT.\exp iT(E - \frac{\omega^2}{2}) \ = \frac{2}{2\varepsilon^2 + \omega^2} \quad où \quad E = -\varepsilon^2 \qquad (2.42)$$

De (2.40), on constate que tous les termes $\widetilde{G_n}(\omega, x_0)$ sont connus et dépendent de l'expression de $\widetilde{G_0}(\omega + ki, x_0)$, qui est :

$$\begin{aligned}
\widetilde{G_0}(\omega + ni, x_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i(\omega + ni)x) G_0(x, x_0) \\
&= -\left(\frac{2}{2\varepsilon^2 + (\omega + ni)^2}\right) \exp(i\omega - n)x_0 \\
&= -2f_n(\boldsymbol{\omega}) \exp(i\omega - n)x_0 \qquad (2.43)
\end{aligned}$$

où l'on note $f_n(\boldsymbol{\omega})$ par :

$$f_n(\omega) = \frac{1}{2\varepsilon^2 + (\omega + ni)^2} \;\; ; n = 1, 2..... \quad . \qquad (2.44)$$

De la même manière, que dans la section précédente, on peut facilement voir que tous les termes $\widetilde{G_n}(\omega, x_0)$ sont déterminés par une combinaison linéaire des $f_k(\omega)$ et les puissances de $\exp(-x_0)$, alors par un regroupement des termes en puissance de $\exp(-x_0)$, on aura :

$$\widetilde{G}(\omega, x_0) = f_0(\omega) \exp(i\omega x_0) \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega) \exp(-nx_0)\right], \qquad (2.45)$$

où les coefficients $a_n(\omega)$ satisfont la formule de récurrence :

$$a_n(\omega) = 2V_0 f_n(\omega) \left[2a_{n-1}(\omega) - a_{n-2}(\omega)\right] \qquad (2.46)$$

ou bien $$\left[2\varepsilon^2 + \omega^2 - n^2 + 2ni\omega\right] a_n(\omega) = 2V_0 \left[2a_{n-1}(\omega) - a_{n-2}(\omega)\right] \qquad (2.47)$$

avec $a_{-1} = 0$, $a_0 = -1$; $a_1(\omega) = -4V_0 f_1(\omega)$ etc....

Si on note la série dans (2.45) par :

$$F(X) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega) X^n \qquad (2.48)$$

et de même comme dans la section précédente, on sait que $F(X)$, qui est la fonction génératrice des $a_n(\omega)$, satisfait l'équation différentielle suivante :

$$X^2 F"(X) + X(1 - 2i\omega)F'(X) - \left(2\varepsilon^2 + \omega^2 - 4XV_0 + 2X^2V_0\right) F(X) = 2\varepsilon^2 + \omega^2. \quad (2.49)$$

et que cette équation est équivalente à celle qui régit la fonction de *Green* elle-même mais écrite dans une autre forme où $X = \exp(-x_0)$ et on a pris la transformation de *Fourier* sur le point final x, i.e :

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx_0^2} + V(x_0) + \varepsilon^2\right] G(x, x_0/E) = -\delta(x_0 - x). \quad (2.50)$$

Revenons maintenant à (2.45) et si on prend la transformation de *Fourier* inverse sur $\widetilde{G}(\omega, x_0)$, on obtient :

$$G(x, x_0) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(-i\omega(x - x_0)) f_0(\omega) a_n(\omega) \exp(-nx_0) \ . \quad (2.51)$$

notons par : $A_n(x - x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(-i\omega(x - x_0)) f_0(\omega) a_n(\omega)$

(2.52)

on aura alors :

$$G(x, x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(x - x_0) \exp(-nx_0) \quad (2.53)$$

D'après les propriétés de la transformée de Fourier, on sait que :

$$\omega^2 f_0(\omega) a_n(\omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(i\omega x) \frac{d^2}{dx^2} A_n(x) \quad (2.54)$$

$$i\omega f_0(\omega) a_n(\omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(i\omega x) \frac{d}{dx} A_n(x) \quad (2.55)$$

Par conséquent, de ces denières formules et de la formule de récurrence sur les $a_n(\omega)$ (2.47) on conclut que $A_n(x)$ satisfait :

$$-\frac{d^2}{dx^2}A_n(x) - 2n\frac{d}{dx}A_n(x) + (2\varepsilon^2 - n^2)A_n(x) = 4V_0A_{n-1}(x) - 2V_0A_{n-2}(x) \qquad (2.56)$$

avec $A_{-1}(x) = 0$ and $A_0(x) = -\exp(-\varepsilon\sqrt{2}\,|x|)/\varepsilon\sqrt{2}$, qui est une équation différentielle linéaire du second ordre avec des coefficients constants (réels). Alors $A_n(x)$ est exprimé comme somme de la solution homogène et d'une solution particulière. En effet, la solution homogène $A_n^c(x)$ est :

$$A_n^c(x) = C_n^1 \exp(-(n+\varepsilon\sqrt{2})x) + C_n^2 \exp(-(n-\varepsilon\sqrt{2})x) \qquad (2.57)$$

où les coefficients C_n^1 et C_n^2 sont des constantes indépendantes de x. En utilisant la méthode de la variation des constantes, nous trouvons que la solution particulière a la forme suivante :

$$A_n^p(x) = C_n^1(x) \exp(-(n+\varepsilon\sqrt{2})x) + C_n^2(x) \exp(-(n-\varepsilon\sqrt{2})x) \qquad (2.58)$$

où $C_n^1(x),\ C_n^2(x)$ sont déterminés par :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}C_n^1(x) &= \frac{V_0}{\varepsilon\sqrt{2}} \exp\left(\varepsilon\sqrt{2}x\right)\left[2\exp(x)\,B_{n-1}(x) - \exp(2x)\,B_{n-2}(x)\right] && (2.59)\\
\frac{d}{dx}C_n^2(x) &= \frac{-V_0}{\varepsilon\sqrt{2}} \exp\left(-\varepsilon\sqrt{2}x\right)\left[2\exp(x)\,B_{n-1}(x) - \exp(2x)\,B_{n-2}(x)\right] && (2.60)
\end{aligned}$$

où $B_n = A_n(x)\exp(nx)$, $B_{-1}(x) = 0$ et $B_0(x) = -\exp(-\varepsilon\sqrt{2}\,|x|)/\varepsilon\sqrt{2}$.

Finalement, par récurrence on peut montrer que :

$$A_n^p(x) = \begin{cases} \frac{(-1)^{n+1}V_0^n}{\varepsilon\sqrt{2}} b_n(\varepsilon)\exp(-\varepsilon\sqrt{2})x) & x > 0 \\ \frac{(-1)^{n+1}V_0^n}{\varepsilon\sqrt{2}} b_n(-\varepsilon)\exp(\varepsilon\sqrt{2})x) & x < 0 \end{cases} \qquad (2.61)$$

où les coefficients $b_n(\varepsilon)$ sont déterminés par la relation de récurrence suivante :

$$\left[n^2 \pm 2n\varepsilon\sqrt{2}\right] b_n(\mp\varepsilon) = 4b_{n-1}(\mp\varepsilon) + \frac{2}{V_0} b_{n-2}(\mp\varepsilon) \tag{2.62}$$

avec $b_{-1}(\mp\varepsilon) = 0$, $b_0(\mp\varepsilon) = 1$.

Donc, de (2.57) et (2.61) nous avons :

$$\begin{aligned} A_n(x) &= A_n^p(x) + A_n^c(x) \\ &= C_n^1 \exp(-(n+\varepsilon\sqrt{2})x) + C_n^2 \exp(-(n-\varepsilon\sqrt{2})x) \\ &\quad + \begin{cases} \frac{(-1)^{n+1}V_0^n}{\varepsilon\sqrt{2}} b_n(\varepsilon)\exp(-\varepsilon\sqrt{2}x) & x>0 \\ \frac{(-1)^{n+1}V_0^n}{\varepsilon\sqrt{2}} b_n(-\varepsilon)\exp(\varepsilon\sqrt{2}x) & x<0 \end{cases} \quad \forall n \geq 0 \end{aligned} \tag{2.63}$$

à noter que $C_0^1 = 0$, $C_0^2 = 0$.

Sachant que si les limites suivantes existent :

$$\lim_{x\longrightarrow-\infty} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^1 \exp(-nx) \neq 0 \quad \text{and} \quad \lim_{x\longrightarrow+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 \exp(-nx) \neq 0$$

alors

$$\begin{aligned} \lim_{x\longrightarrow+\infty} \left[\exp(\varepsilon\sqrt{2}x) \left| \sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 \exp(-nx) \right| \right] &= +\infty \\ \lim_{x\longrightarrow-\infty} \left[\exp(-\varepsilon\sqrt{2}x) \left| \sum_{n=0}^{\infty} C_n^1 \exp(-nx) \right| \right] &= +\infty\ . \end{aligned}$$

Alors de là et des formules (2.63), (2.53), on est en mesure d'écrire la fonction de Green $G(x,x_0)$ comme suit :

$$G(x,x_0) = \begin{cases} \exp(-\varepsilon\sqrt{2}(x-x_0)) \left(\sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}V_0^n}{\varepsilon\sqrt{2}} b_n(\varepsilon) \exp(-nx_0) + \sum\limits_{n=0}^{\infty} C_n^1(x_0)\exp(-nx) \right) & x > x_0 \\ \exp(\varepsilon\sqrt{2}(x-x_0)) \left(\sum\limits_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}V_0^n}{\varepsilon\sqrt{2}} b_n(-\varepsilon) \exp(-nx_0) + \sum\limits_{n=0}^{\infty} C_n^2(x_0)\exp(-nx) \right) & x_0 > x \end{cases} \tag{2.64}$$

Sachant, aussi, que les fonctions génératrices de $b_n(\varepsilon)$ et $b_n(-\varepsilon)$ sont respectivement :

$$F_1(X) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n(\varepsilon)(-X)^n \quad , \qquad F_2(X) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n(-\varepsilon)(-X)^n \tag{2.65}$$

puis, si on utilise la formule de récurrence (2.62) il est facile de déduire que ces fonctions génératrices sont données par :

$$F_1(X) = X^{\varepsilon\sqrt{2}-1/2} G(2\sqrt{\frac{2}{V_0}}X) \quad , \qquad F_2(X) = X^{-\varepsilon\sqrt{2}-1/2} G(2\sqrt{\frac{2}{V_0}}X) \tag{2.66}$$

où $G(y)$ est la solution de l'équation de $Whittaker$:

$$G''(y) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{2V_0}}{y} + \frac{1/4 - 2\varepsilon^2}{y^2}\right] G(y) = 0 \tag{2.67}$$

et qu'elles satisfont, respectivement, les équations différentielles suivantes :

$$X^2 F_1^{''}(X) + X(1 - 2\epsilon\sqrt{2})F_1'(X) + 2X\left(2 - \frac{X}{V_0}\right) F_1(X) = 0 \tag{2.68}$$

$$X^2 F_2^{''}(X) + X(1 + 2\epsilon\sqrt{2})F_2'(X) + 2X\left(2 - \frac{X}{V_0}\right) F_2(X) = 0 \tag{2.69}$$

on peut donc conclure que la fonction de $Green$ $G(x, x_0)$ prend la forme :

$G(x, x_0) =$

$$= \begin{cases} C_1(x)\exp(\frac{x_0}{2}) W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right) + \exp(-\varepsilon\sqrt{2}(x-x_0)) \sum\limits_{n=0}^{\infty} C_n^1(x_0)\exp(-nx) & x > x_0 \\ C_2(x)\exp(\frac{x_0}{2}) M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right) + \exp(\varepsilon\sqrt{2}(x-x_0)) \sum\limits_{n=0}^{\infty} C_n^2(x_0)\exp(-nx) & x_0 > x \end{cases} \tag{2.70}$$

où $W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}$, $M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}$ sont les fonctions de $Whittaker$. Nous attirons l'attention ici que, dans cette dernière formule, nous avons pris la fonction de $Whittaker$ $W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}$ dans le cas $x > x_0$ car elle n'est pas singulière à $+\infty$ $(i.e\ x_0 \longrightarrow -\infty)$, et quand $x_0 > x$ nous avons pris $M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}$, qui n'est pas singulière à 0 $(i.e\ x_0 \longrightarrow +\infty)$.

Donc si on revient à (2.36) i.e :

$$G_n(x,x_0)=i\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dx_nG_0(x,x_n)V(x_n)G_{n-1}(x_n,x_0)$$

$$ou \qquad G_n(x,x_0)=i\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dx_1G_{n-1}(x,x_1)V(x_1)G_0(x_1,x_0) \tag{2.71}$$

A partir de cette formule, et de la même manière que ci-dessus, si on prend la transformation de $Fourier$ sur le point initial x_0, nous pouvons voir que $G(x,x_0)$ aura la forme suivante :

$$G(x,x_0)=$$

$$=\begin{cases} C_1\left(x_0\right)\exp(\frac{x}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)+\exp(-\varepsilon\sqrt{2}(x_0-x))\sum\limits_{n=0}^{\infty}C_n^1(x)\exp(-nx_0) & x_0>x \\ C_2\left(x_0\right)\exp(\frac{x}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)+\exp(\varepsilon\sqrt{2}(x_0-x))\sum\limits_{n=0}^{\infty}C_n^2(x)\exp(-nx_0) & x>x_0 \end{cases} \tag{2.72}$$

donc de (2.70) et cette dernière formule (2.72) , on aura pour $x>x_0$:

$$C_1\left(x\right)\exp(\frac{x_0}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right)=\exp(\varepsilon\sqrt{2}(x_0-x))\sum_{n=0}^{\infty}C_n^2(x)\exp(-nx_0) \tag{2.73}$$

$$C_2\left(x_0\right)\exp(\frac{x}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)=\exp(-\varepsilon\sqrt{2}(x-x_0))\sum_{n=0}^{\infty}C_n^1(x_0)\exp(-nx) \tag{2.74}$$

pour lesquelles (2.72) i.e $G(x,x_0)$ devient :

$$G(x;x_0)=$$

$$=\begin{cases} C_1\left(x\right)\exp(\frac{x_0}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right)+C_2\left(x_0\right)\exp(\frac{x}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) & x>x_0 \\ C_1\left(x_0\right)\exp(\frac{x}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)+C_2\left(x\right)\exp(\frac{x_0}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right) & x_0>x \end{cases} \tag{2.75}$$

Sachant que $F_1(X)$ est une solution de l'équation différentielle (2.68), alors il est facile de vérifier que $X^{\varepsilon\sqrt{2}}F_1(X)$ est solution de l'équation différentielle suivante :

$$X^2\frac{d^2}{dX^2}H\left(X\right)+X\frac{d}{dX}H\left(X\right)-\left(2\varepsilon^2-2X\left(2-\frac{X}{V_0}\right)\right)H\left(X\right)=0 \tag{2.76}$$

qui est la même que l'équation différentielle suivante :

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+V\left(x\right)+\varepsilon^2\right]H\left(x\right)=0 \tag{2.77}$$

pour $X=V_0\exp\left(-x\right)$. Alors, on conclut que :

$$H_1\left(x\right)=\exp(\frac{x}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)\quad \text{et}\quad H_2\left(x\right)=\exp(\frac{x}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)$$

qui sont deux solutions linéairement indépendantes de(2.77), et puisque $G(x;x_0)$ est également solution de l'équation différentielle (2.77) pour $x>x_0$, de (2.75) , on en déduit que :

$$C_1\left(x\right)=\lambda_1\exp(\frac{x}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) \tag{2.78}$$

$$C_2\left(x\right)=\lambda_2\exp(\frac{x}{2})W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) \tag{2.79}$$

Enfin on peut voir que la fonction de $Green$ pour le potentiel de $Morse$ prend la forme :

$$G(x;x_0)=\begin{cases}(\lambda_1+\lambda_2)\exp(\frac{x+x_0}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}2\sqrt{2V_0}\exp(-x)W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right) & x>x_0\\ (\lambda_1+\lambda_2)\exp(\frac{x+x_0}{2})M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right)W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) & x_0>x\end{cases} \tag{2.80}$$

Puisque $G(x;x_0)$ est, aussi, une solution de l'équation différentielle (2.77) pour $x>x_0$ ou $x_0>x$, alors la fonction de $Green$ $G(x;x_0)$ prend la forme :

$$
\begin{aligned}
G\left(x,x_0\right) &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-2E}+\sqrt{2V_0}\right)}{2\sqrt{2V_0}\Gamma\left(1+2\sqrt{-2E}\right)}\exp\frac{1}{2}\left(x+x_0\right). \\
&\Big\{\Theta\left(x-x_0\right)W_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right)M_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)+ \\
&\Theta\left(x_0-x\right)W_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)M_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x_0)\right)\Big\}
\end{aligned}
$$

où Θ désigne la fonction de *Heaviside*. Ce résultat a été trouvé précédemment par différentes méthodes [10, 16, 31]

Cette section est rédigée et préparée sous forme d'un article intitulé "Exact *Perturbation series* for the *Morse* Potential" à soumettre pour une éventuelle publication.

Deuxième partie

Problème relativiste

2.3 Introduction

Comme nous l'avons constaté précédemment le formalisme "$Path\ integral$ ", pour les problèmes non relativistes (i.e : pour l'équation de $Schrödinger$), est un outil très essentiel pour la représentation du propagateur, et c'est à partir de cette représentation "$Path\ integral$ " qu'on arrive à comprendre mieux le propagateur, puisqu'il contient tous les informations du système. Malheureusement il est assez délicat d'étendre le même formalisme ($Path\ integral$) pour des problèmes relativistes ; car déjà physiquement, il y a un problème pour définir l'action d'un système relativiste (au niveau de la formulation "$Path\ integral$ ") et encore plus, il est assez défficile de trouver une trajectoire classique qui tient compte des effets relativistes du système.

Peu de résultats ont été réalisés en utilisant le formalisme "$Feynman\ Path\ integral$" pour des problèmes relativistes, on peut citer les traveaux de $J.Polonyi$ $[19-40]$ où il donne des représentations "$Path\ integral$ " pour les solution des équations de $Klein-Gordon$ et de $Dirac$, et aussi les traveaux de $T.Boudjedaa\ et\ all$ $[6,7]$,et $M.Merad\ et\ all$ $[37]$ où les auteurs donnent des représentations "$Path\ integral$" pour deux problèmes relativistes dans le formalisme "$Feshbach-Villars$", et aussi pour la solution du problème de $Coulomb$ pour le même formalisme.

Dans cette partie on donne des représentations par le formalisme "$Path\ integral$ " pour deux problèmes relativistes, le premier est le problème relatif à l'équation $Feshbach-Villars$ pour la particule libre, le deuxième est celui relatif à l'équation de $Klein-Gordon.$

2.4 Une représentation "Path integral" du propagateur de l'équation Feshbach-Villars libre

En mécanique quantique relativiste on sait que l'équation de $Klein - Gordon$:

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + ie\ A_0\right)^2 - \left(\nabla + ie\ \vec{A}\right)^2 + m^2\right]\Psi = 0 \quad , \quad (c = 1\ et\ \ \hbar = 1) \tag{2.81}$$

décrit une particule relativiste, de masse m, dans un potentiel électromagnétique $\left(A_0, \vec{A}\right)$.

Remarquons d'abord que l'équation (2.81) est une équation du second ordre en temps et qui présente quelques difficultés d'interprétation physique, comme par exemple l'existence des états à énergie négative, et même que sa solution ne pourra pas définir une densité de probabilité, ce qui fait défaut pour la définir comme étant une fonction d'onde.

Dans le but de réduire l'ordre de l'équation de $Klein - Gordon$ et de garder les mêmes propriétés de sa solution , $H.Feshbach\ et\ F.Villars$ ont publié un article [11] , en 1958, où ils exposent clairement comment changer cette équation en une autre équation de type $Schrödinger$:

$$i\frac{\partial \Phi}{\partial t} = H\Phi \tag{2.82}$$

avec $$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \Psi + \frac{i}{m}\left(\frac{\partial}{\partial t} + ie\ A_0\right)\Psi \\ \Psi - \frac{i}{m}\left(\frac{\partial}{\partial t} + ie\ A_0\right)\Psi \end{pmatrix}$$

où Ψ est la solution de l'équation de $Klein{-}Gordon$, $H\ \ sera\ l'Hamiltonnien$ du système donné par :

$$H = -\frac{1}{2m}\left(\nabla - ie\ \vec{A}\right)^2(\tau_3 + i\tau_2) + m\tau_3 + eA_0 \tag{2.83}$$

(τ_1, τ_2, τ_3) sont les matrices de $Pauli$:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\ ,\ \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\ ,\ \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.84}$$

2.4.1 le propagateur de l'équation de Feshbach-Villars pour la particule libre

Prenons l'équation de $Feshbach - Villars$ pour la particule libre, i.e :

$$i\frac{\partial \Phi}{\partial t} = H\Phi \tag{2.85}$$

$$où \qquad H = -\frac{1}{2m}\Delta\left(\tau_3 + i\tau_2\right) + m\tau_3 \tag{2.86}$$

$$i.e \qquad H = -\frac{1}{2m}\Delta\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} + m\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.87}$$

donc si on utilise la relation (1.22), qui définit le propagateur dans l'espace des phases, c'est-à-dire :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{(2\pi)^n}\right)^N \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\sum_{j=1}^{N} -i\varepsilon H\left(p_j\right) + ip_j\left(x_j - x_{j-1}\right)\right) \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=1}^{N} dp_j \tag{2.88}$$

$$où \quad H\left(p\right) = \frac{p^2}{2m}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} + m\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

alors de (2.88) on déduit qu'on aura à calculer $N-1$ termes de la forme :

$$K_k\left(x_k, x_0\ ;\ p_k\right) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-i\varepsilon H\left(p_{k-1}\right) + ip_k\left(x_k - x_{k-1}\right)\right]\ K_{k-1}\left(x_{k-1}, x_0\ ;\ p_{k-1}\right) dx_{k-1} dp_{k-1}$$

pour $k = 2, 3, ...N$ et on prend $K_1\left(x_1, x_0\ ;\ p_1\right) = \exp\left(ip_1\left(x_1 - x_0\right)\right)$. ce qui permet d'écrire (2.88) sous la forme :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right) = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-i\varepsilon H\left(p\right)\right] K_N\left(x, x_0\ ;\ p\right)\ dp\ . \tag{2.89}$$

Calculons (2.88) pour $k = 2$:

$$K_2(x_2, x_0 \ ; \ p_2) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-i\varepsilon H(p_1) + ip_2(x_2 - x_1)\right] \ K_1(x_1, x_0 \ ; \ p_1)\, dx_1 dp_1$$

ou $$K_2(x_2, x_0 \ ; \ p_2) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \exp(ip_2 x_2) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[ix_1(p_1 - p_2) - ip_1 x_0 - i\varepsilon H(p_1)\right] \ dx_1 dp_1$$

i.e $K_2(x_2, x_0 \ ; \ p_2) = \langle \delta(p_1 - p_2) \ ; \ \exp(ip_2 x_2) \ \exp\left[-ip_1 x_0 - i\varepsilon H(p_1)\right] \rangle$

où $\delta(p)$ est la fonction de *Dirac*, et alors :

$$K_2(x_2, x_0 \ ; \ p_2) = \exp\left[ip_2(x_2 - x_0) - i\varepsilon H(p_2)\right] \tag{2.90}$$

donc pour $k = 3$, on aura :

$$K_3(x_3, x_0 \ ; \ p_3) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-i\varepsilon H(p_2) + ip_3(x_3 - x_2)\right] \ K_2(x_2, x_0 \ ; \ p_2)\, dx_2 dp_2$$

i.e $$K_3(x_3, x_0 \ ; \ p_3) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \exp(ip_3 x_3) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[ix_2(p_2 - p_3) - ip_2 x_0 - i2\varepsilon H(p_2)\right] \ dx_2 dp_2$$

et de la même manière, on peut déduire que :

$$K_3(x_3, x_0 \ ; \ p_3) = \delta(p_2 - p_3) \ ; \ \exp(ip_3 x_3) \ \exp\left[-ip_2 x_0 - i2\varepsilon H(p_2)\right]$$

i.e $$K_3(x_3, x_0 \ ; \ p_3) = \exp\left[ip_3(x_3 - x_0) - i2\varepsilon H(p_2)\right] \tag{2.91}$$

et ainsi de suite on peut continuer jusqu'à $k = N$, et déduire que :

$$K_N(x, x_0 \ ; \ p) = \exp\left[ip(x - x_0) - i(N-1)\varepsilon H(p)\right] \tag{2.92}$$

et finalement de (2.89) on aura :

$$K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^n\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[ip\left(x-x_0\right)-i\left(N\right)\varepsilon H\left(p\right)\right]\ dp$$

$$i.e\qquad K\left(x,t\ ;x_0,t_0\right)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^n\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[ip\left(x-x_0\right)-i\left(t-t_0\right)H\left(p\right)\right]\ dp \tag{2.93}$$

il reste, donc, à écrire $\exp\left[-i\left(t-t_0\right)H\left(p\right)\right]$ sous une forme plus explicite, et (2.93) donnera une certaine représentation intégrale du propagateur pour l'équation de $Feshbach-Villars$ pour la particule libre.

Sachant que :

$$H\left(p\right)=\frac{p^2}{2m}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -1 & -1\end{pmatrix}+m\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{2.94}$$

donc écrivons $H\left(p\right)$ sous la forme suivante :

$$H\left(p\right)=A+B$$

$$où\qquad A=\frac{p^2}{2m}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -1 & -1\end{pmatrix}\quad et\ \ B=m\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{2.95}$$

remarquons d'abord que :

$$A^2=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\quad,\quad B^2=m^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\quad,\ AB+BA=p^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

ce qui donne :

$$\left(A+B\right)^2=A^2+AB+BA+B^2=\left(p^2+m^2\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \tag{2.96}$$

d'où $\quad (A+B)^{2k} = \left(p^2+m^2\right)^k \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ et $\quad (A+B)^{2k+1} = \left(p^2+m^2\right)^k \ H(p) \quad .$

Donc, on aura pour :

$$\exp\left[-i\left(t-t_0\right)H\left(p\right)\right] = \sum_{k=0}^{+\infty} (-i)^k \frac{\left(t-t_0\right)^k}{k!} \left(A+B\right)$$

$$= \sum_{k=0}^{+\infty} (-i)^{2k} \frac{\left(t-t_0\right)^{2k}}{2k!} \left(A+B\right)^{2k} + \sum_{k=0}^{+\infty} (-i)^{2k+1} \frac{\left(t-t_0\right)^{2k+1}}{(2k+1)!} \left(A+B\right)^{2k+1} \tag{2.97}$$

c'est-à-dire que :

$$\exp\left[-i\left(t-t_0\right)H\left(p\right)\right] =$$

$$= \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{\left(t-t_0\right)^{2k}}{2k!} \left(\sqrt{p^2+m^2}\right)^{2k} - \frac{iH\left(p\right)}{\sqrt{p^2+m^2}} \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{\left(t-t_0\right)^{2k+1}}{(2k+1)!} \left(\sqrt{p^2+m^2}\right)^{2k+1} \tag{2.98}$$

et donc :

$$\exp\left[-i\left(t-t_0\right)H\left(p\right)\right] = \cos\left[\left(t-t_0\right)\left(\sqrt{p^2+m^2}\right)\right] - \frac{iH\left(p\right)}{\sqrt{p^2+m^2}} \sin\left[\left(t-t_0\right)\left(\sqrt{p^2+m^2}\right)\right]$$

Ce qui donnera, finalement, la représentation intégrale du propagateur, donné par (2.93) sous une forme plus explicite :

$$K\left(x,t\,;x_0,t_0\right) =$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \exp ip\left(x-x_0\right) \left[\cos\left[\left(t-t_0\right)\left(\sqrt{p^2+m^2}\right)\right] - \frac{iH\left(p\right)}{\sqrt{p^2+m^2}} \sin\left[\left(t-t_0\right)\left(\sqrt{p^2+m^2}\right)\right]\right] dp \tag{2.99}$$

et qui est en parfait accord avec le résultat donné, pour l'équation de $Klein - Gordon$ pour la particule libre, dans [41] Volume II $(CHX, ThX.77, p309)$, mais d'une manière beaucoup plus différente.

2.5 Path integral représentation pour l'équation de Klein-Godon

Prenons l'équation de $Klein - Gordon$:

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + ie\ A_0\right)^2 - \left(\nabla + ie\ \vec{A}\right)^2 + m^2\right]\Phi = 0 \quad , \quad (c = 1\ et\ \ \hbar = 1) \tag{2.100}$$

où m est la masse de la particule et $\left(A_0, \vec{A}\right)$ le potentiel électromagnétique.

On sait que par une certaine transformation, qu'on appelle transformation de jauge, l'équation (2.100) sera équivalente à :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\nabla + ie\ \vec{A}\right)^2 + m^2\right]\tilde{\Phi} = 0 \tag{2.101}$$

où $\quad \tilde{\Phi} = \exp\left(ie\int\limits_0^t A_0(\tau, x)d\tau\right)\Phi \quad$ et $\ \Phi\ $ solution de l'équation (2.100) .

Réduisons l'ordre de l'équation (2.101) par la transfomation suivante :

$$\Psi = \begin{pmatrix} T_D \exp\left(-i\int\limits_0^t \left(\nabla + ie\ \vec{A}\right)^2 d\tau\right) \tilde{\Phi} \\ iT_D \exp\left(-i\int\limits_0^t \left(\nabla + ie\ \vec{A}\right)^2 d\tau\right) \dfrac{\partial\ \tilde{\Phi}}{\partial t} \end{pmatrix}$$

où T_D désigne l'ordre chronologique.

Alors (2.101) sera équivalente à une équation de type *Schrödinger* :

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{2.102}$$

$$où \quad H = -\left(\nabla + ie\,\vec{A}\right)^2 \alpha + \beta \quad , \; \alpha = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ m^2 & 0 \end{pmatrix}$$

Remarque 01 :

Remarquons d'abord que α vérifie les propriété suivantes :

$$1) \quad \alpha^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.103}$$

$$2) \quad \alpha^{-n} = (-1)^n \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ n & -1 \end{pmatrix} \tag{2.104}$$

$$3) \quad \exp\left(ia\alpha^{-1}\right) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(ia)^k}{k!}\alpha^{-n} = \exp\left(-ia\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -ia & 1 \end{pmatrix} \tag{2.105}$$

2.5.1 Le propagateur pour la particle libre

Donc si on prend $\vec{A} = \vec{0}$, i.e la particule libre, l'équation (2.102) devient :

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\Delta\alpha + \beta\right]\Psi$$

$$\psi(\mathbf{x}, t + \Delta t) \approx \left[1 - i\Delta t\left[-\Delta\alpha + \beta\right]\right]\psi(\mathbf{x}, t)$$

c'est-à-dire que Ψ est solution de l'équation (2.102) pour la particule libre, i.e :

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\Delta\alpha + \beta\right]\Psi \tag{2.106}$$

Ecrivons l'évolution infinitésimale de Ψ comme suit :

$$\psi(\mathbf{x},t+\Delta t)=\begin{pmatrix}N_1 & N_2\\ N_3 & N_4\end{pmatrix}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{4\Delta t}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ -i\frac{(\check{x}-\check{y})^2}{4\Delta t} & 1\end{pmatrix}e^{-i\Delta t\beta}\psi(\mathbf{y},t)\ dy \qquad (2.107)$$

où $\begin{pmatrix}N_1 & N_2\\ N_3 & N_4\end{pmatrix}$ est une certaine matrice de normalisation.

Donc si on pose $\xi=y-x$ (ici les variables $x,\ y\ \in R^3$), et en développant ψ au point $\xi=0$ on aura :

$$\psi(\mathbf{y},t)=\left[1+\xi\nabla+\frac{1}{2}\xi_j\xi_k\nabla_j\nabla_k+...\right]\psi(\mathbf{x},t)$$

où on a évité, pour ne pas alourdir l'écriture, de mettre dans la formule précédente la sommation de 1 à 3 sur les indices répétés.

Alors l'équation (2.107) se réécrit :

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x},t+\Delta t) &= \begin{pmatrix}N_1 & N_2\\ N_3 & N_4\end{pmatrix}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\frac{\xi^2}{4\Delta t}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ -i\frac{(\check{x}-\check{y})^2}{4\Delta t} & 1\end{pmatrix}e^{-i\Delta t\beta}\\ &\quad\times\left[1+\xi\nabla+\frac{1}{2}\xi_j\xi_k\nabla_j\nabla_k+...\right]\psi(\mathbf{x},t)\ d\xi \qquad (2.108)\end{aligned}$$

sachant que dans l'équation (2.108) tous les termes, pour ξ d'ordre supérieur à 2, ont des contributions dans l'intégrale d'ordre supérieur à 1 en Δt, ce qui permet d'avoir un développement de $\psi(\mathbf{x},t+\Delta t)$ à l'ordre Δt, comme suit :

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x},t+\Delta t) &\approx \begin{pmatrix}N_1 & N_2\\ N_3 & N_4\end{pmatrix}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\frac{\xi^2}{4\Delta t}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ -i\frac{\xi^2}{4\Delta t} & 1\end{pmatrix}\\ &\quad\times e^{-i\Delta t\beta}\left[1+\xi_p\nabla_p+\frac{1}{2}\xi_p\xi_q\nabla_p\nabla_p\right]\psi(\mathbf{x},t)\ d\xi \qquad (2.109)\end{aligned}$$

et si on développe $e^{-i\Delta t\beta}$ jusqu'à l'ordre 1 en Δt, alors (2.109) devient :

$$\psi(\mathbf{x}, t+\Delta t) \approx \begin{pmatrix} N_1 & N_2 \\ N_3 & N_4 \end{pmatrix} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{\xi^2}{4\Delta t}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i\frac{\xi^2}{4\Delta t} & 1 \end{pmatrix}$$
$$\times (1 - -i\Delta t\beta) \left[1 + \xi_p \nabla_p + \frac{1}{2}\xi_p \xi_q \nabla_p \nabla_p\right] \psi(\mathbf{x}, t)\, d\xi \quad (2.110)$$

et par suite

$$\psi(\mathbf{x}, t+\Delta t) \approx [1 - i\Delta t\,[-\Delta\alpha + \beta]]\,\psi(\mathbf{x}, t) \quad (2.111)$$

pour $\quad N_0 = (-4\pi i\Delta t)^{3/2}, \quad N_1 = \dfrac{1}{N_0}, \quad N_2 = 0, \quad N_3 = \dfrac{3}{2N_0}, \quad N_4 = \dfrac{1}{N_0}.$

l'équation (2.111) se déduit de (2.110) par simple intégration sur ξ, en utilisant le fait que :

pour $\quad J_n = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \zeta^n \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda.\zeta^2\right)\, d\zeta$

on a $\quad J_n = \begin{cases} (n-1)!!\sqrt{2\pi}\lambda^{-\frac{n+1}{2}} & \text{si } n \text{ est pair} \\ 0 & \text{si } n \text{ est impair} \end{cases}$

où $\quad n!! = 1\times 3\times 5 ... n \quad$ pour n impair

Donc de l'équation (2.111) on déduit que Ψ est solution de l'équation (2.106) , i.e :

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = [-\Delta\alpha + \beta]\,\Psi$$

Ce qui permet, en quelque sorte, de définir un propagateur infinitésimal, par

$$K\left(x,t+\Delta t\ \ ;\ y,t\right)=\frac{1}{N_0}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \frac{3}{2} & 1\end{pmatrix}e^{-i\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2}{4\Delta t}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ -i\frac{(\check{x}-\check{y})^2}{4\Delta t} & 1\end{pmatrix}e^{-i\Delta t\beta} \tag{2.112}$$

où $\qquad N_0=(-4\pi i\Delta t)^{\frac{3}{2}}$

d'où, si on utilise la relation $(1-2)$ du premier chapitre, on peut dire que le propagateur est donné par :

$$\begin{aligned}K\left(x,t\ \ ;\ x_{.},t_0\right) &= \lim_{l\to+\infty}\frac{1}{N_0^l}\begin{pmatrix}1 & 0\\ \frac{3l}{2} & 1\end{pmatrix}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-i\sum_{j=1}^{l}\frac{(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1})^2}{4\Delta t}\right)\\ &\quad\times\prod_{j=1}^{l}\begin{pmatrix}1 & 0\\ -i\frac{(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1})^2}{4\Delta t} & 1\end{pmatrix}e^{-i\Delta t\beta}dx_1dx_2..dx_{l-1}\end{aligned} \tag{2.113}$$

où $\quad \Delta t=\dfrac{t-t_0}{l}\quad$ et $\quad t_j=t_0+j\dfrac{t-t_0}{l}\ ,\ \ x_j=x\left(t_j\right)\ \ ,$ pour $\quad j=0.1.2.....l.$

Sachant que :

pour $\qquad \tilde{\alpha}_1=\begin{pmatrix}1 & 0\\ \alpha_1 & 1\end{pmatrix}\qquad$ on a $\qquad \tilde{\alpha}_1\times\beta=\beta\times\tilde{\alpha}_1-\alpha_1\tau_3$

où $\ \tau_3$ est la matrice de pauli $\qquad \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

et de là on peut déduire que :

$$\exp\left(-i\Delta t\beta\right)\times\ \tilde{\alpha}_1=\ \tilde{\alpha}_1\times\exp\left(-i\Delta t\beta\right)-\frac{i\alpha_1\ \sin\left(m\Delta t\right)}{m}\tau_3$$

ce qui permet d'avoir :

$$\tilde{\alpha}_2 \times \exp\left(-i\Delta t\beta\right) \times \tilde{\alpha}_1 \times \exp\left(-i\Delta t\beta\right) = \tilde{\alpha}_2 \times \tilde{\alpha}_1 \times \exp\left(-i2\Delta t\beta\right) - \frac{i\alpha_1 \; \sin\left(m\Delta t\right)}{m} \tilde{\alpha}_2 \times \tau_3 \times \exp\left(-i\Delta t\beta\right) \tag{2.114}$$

donc pour :

$$\tilde{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i\frac{(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_0)^2}{4\Delta t} & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \tilde{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i\frac{(\mathbf{x}_2-\mathbf{x}_1)^2}{4\Delta t} & 1 \end{pmatrix}$$

on aura :

$$\tilde{\alpha}_2 \exp\left(-i\Delta t\beta\right) \; \tilde{\alpha}_1 \exp\left(-i\Delta t\beta\right) = \tilde{\alpha}_2 \; \tilde{\alpha}_1 \exp\left(-i2\Delta t\beta\right) - \frac{(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_0)^2 \sin\left(m\Delta t\right)}{4\Delta t m} \tilde{\alpha}_2 \tau_3 \exp\left(-i\Delta t\beta\right) \tag{2.115}$$

donc pour :

$$\tilde{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i\frac{(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_0)^2}{4\Delta t} & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \tilde{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i\frac{(\mathbf{x}_2-\mathbf{x}_1)^2}{4\Delta t} & 1 \end{pmatrix}$$

on aura :

$$\tilde{\alpha}_2 \exp\left(-i\Delta t\beta\right) \; \tilde{\alpha}_1 \exp\left(-i\Delta t\beta\right) = \tilde{\alpha}_2 \; \tilde{\alpha}_1 \exp\left(-i2\Delta t\beta\right) - \frac{(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_0)^2 \sin\left(m\Delta t\right)}{4\Delta t m} \tilde{\alpha}_2 \tau_3 \exp\left(-i\Delta t\beta\right) \tag{2.116}$$

et par conséquent on voit bien que le propagateur, donné par (2.113), contient un terme de la forme :

$$\begin{aligned} \tilde{K}\left(x,t \; ; \; x_{.},t_0\right) &= \lim_{l\to+\infty} \frac{1}{N_0^l} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{3l}{2} & 1 \end{pmatrix} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-i\sum_{j=1}^{l} \frac{(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1})^2}{4\Delta t} \right) \\ &\quad \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i\sum\limits_{j=1}^{l} \frac{(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_{j-1})^2}{4\Delta t} & 1 \end{pmatrix} e^{-i(t-t_0)\beta} dx_1 dx_2..dx_{l-1} \end{aligned} \tag{2.117}$$

qu'on peut écrire formellement, comme une $l'intégrale\ de\ Feynman$,par :

$$\tilde{K}\left(x,t\ \ ;\ x_{.},t_{0}\right)=\int\exp\left(-i\int_{t_{0}}^{t}\left(\frac{\dot{x}\left(\tau\right)}{2}\right)^{2}d\tau\right)\times\begin{pmatrix}1 & 0\\ -i\int_{t_{0}}^{t}\left(\frac{\dot{x}(\tau)}{2}\right)^{2}d\tau & 1\end{pmatrix}e^{-i(t-t_{0})\beta}\,Dx\left(t\right) \tag{2.118}$$

Il faut, bien, noter ici que (2.118) ne définit le propagateur exact du problème (2.106) que si la limite du terme restant tend vers zéro quand $l\rightarrow+\infty$.

Chapitre 3

Conclusion

Comme nous l'avons déjà exposé, on voit bien que le formalisme de $l'intégrale\ de\ chemin$ est un outil efficace pour trouver le propagateur pour beaucoup de problèmes de la physique quantique, en particulier les problèmes non relativistes, comme nous l'avons vu dans la première partie du premier chapitre, on a calculé la fonction de $Green$ pour un problème aussi délicat que l'équation de $Schrodinger$ avec le potentiel de $Morse$, même que le résultat est bien connu par d'autres méthodes standards, par l'artifice de la $serie\ de\ perturbation\ deFeynman$ on a pu trouver le même résultat. Par contre pour des problèmes relativistes le problème réside du fait qu'il est difficile d'avoir une action d'un système relativiste (au niveau de la formulation "$Path\ integral$ "). Comme nous l'avons constaté dans la deuxième partie, on voudrait bien avoir une représentation par $l\prime intégrale\ de\ chemin$ pour l'équation de $Klein - Gordon$ pour un potentiel électromagnétique quelconque.

Par ce travail on espère bien continuer à développer ce formalisme pas seulement pour les équations de la physique mathématique mais pour d'autres types des équations aux dérivées partielles et dans d'autres domaines que la physique.

Chapitre 4

Bibliographie

Bibliographie

[1] Abramowitz M and Stegun I A (ed) 1964 Handbook of Mathematical Functions (Washington, DC : US Govt Printing Office)

[2] M. Acila, B. Benali and M.T. Meftah ; J.Phys.A Math.Gen., 39, 1357-1366, (2006).

[3] S.A. Albeverio - R.J. HØegh-Krohn, Mathematical Theory of Feynman Path Integrals, Lecture Notes in Math ; 523, Springer-verlag Berlin (1976).

[4] K.V. Bhagwat and S.V. Lawande, Phys.Lett. A135, 417, (1989).

[5] K.V. Bhagwat and S.V. Lawande, Phys.Lett. A141, 321, (1989).

[6] T.Boudjedaa, L.Chetouani and M.Merad, Exact Path integral treatment for Step Potential in relativistic two component theory, Il Nuovo Cimento, Vol.114 B, N°11, 1261-1280 (1999).

[7] T.Boudjedaa, L.Chetouani and M.Merad, Path integral for Coulomb Problem in the Feshbach-Villars Formalism, Chinese .J. Ph, Vol.38, N° 6, 1019-1039 (2000).

[8] R.H. Cameron, A Family of Integrals Serving to Connect The Weiner and Feynman Intgrals, J.Math.Phys, Vol 39, 126-140 (1960).

[9] Earl. A. Coddington, Norman Levinson ; Theo of Ord Diff Equ Ch 09 Mcgraw-Hill (1955), p222.

[10] I. H. Duru ; Phys. Rev. D 28, 2689-2692 (1983).

[11] H.Feshbach and F.Villars, Elementary Relativistic Wave Mechanics of Spin 0 and Spin 1/2 particles, Rev.Mod.Ph, Vol 30, N° 1, 24-45 (1958).

[12] R.P.Feynman, Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics - Rev. Mod.Phy, Vol. 20, 367 (1948).

[13] R.P.Feynman, Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics - Phy. Rev, Vol. 76, p.769 (1949).

[14] R.P.Feynman, Mathematical Formulation of the Quantum Theory of Electromagnetic Interaction - Phy. Rev, Vol. 80, 440 (1950).

[15] R.P.Feynman - A.R. Hibbs, Quantum Mechanics and path integral, Mc Graw Hill (1965).

[16] W Fischer, H Leschke and P Muller ; J. Phys. A : Math. Gen., 25, No 13, 3835-3853,(7 July 1992).

[17] J. Glimm-A.Jaff, Quantum Physics (A Functional Integral point of View), Springer-Verlag New York (1987).

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

[19] P.Gosselin, J.Polonyi, Path Integral for Relativistic Equations of Motion, Annals.Ph, 268, 207-224 (1998).

[20] Gradshteyn I S and Ryzhik I M 1994 Table of Integrals, Series, and Products 5th edn ed A Jeffrey (Boston Academic) 1059.

[21] C. Grosche, J. Phys. A : Math.Gen., 23, 5205-5234, (1990).

[22] T.Ichinose, Path integral for the Dirac Equation in two Space-Time Dimensions, Proc. Japon. Acad, Vol 58. Ser.A, 290-293 (1982).

[23] T.Ichinose, H.Tamura, Path integral Approch to Relativistic Quantum Mechanics, Prog. Th. Phys. Supp, N° 92, 144-175 (1987).

[24] T.Ichinose, The Nonrelativistic Limit Problem for a Relativistic Spinless Particle in an Electromagnetic Field, J. Fun. Anal, Vol 73. 233-257 (1987).

[25] T.Ichinose, Path integral for the Dirac Equation, Sugaku Expo, Vol 6. N° 1, 15-31 (1993).

[26] T.Ichinose, Some Results on the Relativistic Hamiltonian : Selfadjointness and Imaginary-Time Path Integral, Diff. Equa. Math. Phys (Proc.Int.Conf. Univ. Alabama at Birmingham-1994), 102-116 (1995).

[27] T.Ichinose- H.Tamura, The Norm Convergence of The Trotter-Kato Product Formula with Erro Bound, Com. Math. Phys, Vol 217, 489-502 (2001).

[28] T.Ichinose- H.Tamura-H.Tamura-V.A.Zagrebnov, Note on paper "The Norm Convergence of The Trotter-Kato Product Formula with Erro Bound" by Ichinose and Tamura, Com. Math. Phys, Vol 221, 499-510 (2001).

[29] T.Ichinose, Path integral for the radial Dirac Equation, J. Math. Phys, Vol 46. 022103 (2005).

[30] D.C. Khandekar - S.V.Lawande - K.V Bhagwat, Path Integral Mathods and their Applications, World Scientific (1998).

[31] D.C. Khandekar - S.V.Lawande, Feynman Path Integrals : Some Exact Results and Applications, Phy.Reports 137 Nos 2 & 3, 115-229 (1986).

[32] H.Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics, World Scientific, Singapore (1981).

[33] Landau L. Lifchitz E., Quantum Mechanics Vol. III, Edition Mir (1974).

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

[35] D.H. Lin, J.Phys.A Math. Gen. 30, 4365 (1996).

[36] D.H. Lin, J.Phys. A Math. Gen.31, 7577 (1998).

[37] M.Merad, T.Boudjedaa and L.Chetouani, Path integral treatment for Spinless Relativistic Equation in the two component theory, Turk.J.Ph, 25, 159-173 (2001).

[38] E.Nelson, Feynman Integrals and the Schrödinger Equation, J.Math.Phys, Vol 5, 332-343 (1964).

[39] Philippe A. Martin, Une Initiation à L'intégrale Fonctionnelle en Physique Quantique et Statistique, Les Presses Polytechniques et Universitaires Romandes (1996).

[40] J.Polonyi, Path integral for Dirac equation, Ph.Let.B, 453, 40-45 (1999).

[41] M. Reed - B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics, Vol I - Vol II, Academic Press, Inc. (1980).

[42] L.S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integration, John Wiley (1981).

[43] B. Simon, Functional Integration and Quantum Physics, Academic Press (1979).

[44] M. S. Swanson, Path Integrals and Quantum Processes, Academic Press (1992).

[45] Tobias Kuna, Ludwig Streit, Werner Westerkamp ; J.Math.Phys 39 issue 9 , 4476, (Sept1998).

[46] H.F.Trotter, On the product of semi-groups of operators, Proc. Am. Math. Soc 10, 345 (1959).

Turk J Phys
31 (2007) , 197 – 203.

Green Function of the Morse Potential Using Perturbation Series

B. BOUDJEDAA[1], M. T. MEFTAH[2] and L. CHETOUANI[3]
[1]*Département de Mathématiques,*
[2]*Département de Physique*
Faculté des Sciences et Sciences de l'Ingénieur et Laboratoire LENREZA
Université de Ouargla 30000 ALGÉRIE
e-mail: motay@hotmail.com
[3]*Département de Physique Faculté des Sciences, Université Mentouri de Constantine*
25000 ALGÉRIE

Received 31.05.2007

Abstract

We find the Green function of the Schrodinger equation for the Morse potential using perturbation series. By Fourier transformation on the end point of the perturbation series, and with some formulas for terms generating the perturbation series, we are able to derive the Green function of the problem.

Key Words: Morse potential, Green function, Propagator, Path integral, Perturbation series, Fourier transform.

1. Introduction

Most physical problems cannot be treated exactly. It then becomes then necessary to develop different methods of approximation allowing one to approach the exact result with an appropriate accuracy. The most important and popular approximation method for solving problems in quantum mechanics, is the perturbation theory in the Schroëdinger formalism. It provides us with an effective method to compute the approximate solutions of many problems which can not be solved exactly. As in standard quantum mechanics, the perturbation method can be developed in the path integral framework of quantum mechanics [1].

In the last few decades, perturbation expansion of the path integral has been used to give the exact Green's functions for delta-function potential problems [2–4], for non-relativistic Coulomb systems [5], for the relativistic problem by summing the delta-function perturbation series [6], and for the relativistic Coulomb problem [7]. In addition, the perturbative approach was successfully used for deriving the energy Green function for the inverse square potential [8], and recently for the step potential [9].

In this paper, we would like to add a further contribution to the perturbation method. This contribution, which has not been treated to our knowledge and in this context, concerns the energy Green function of a Morse system, for bound states (for which the energy is negative), via summing over the perturbation series. However, we must mention that the Green function of the Morse potential was calculated by different authors using the standard method in quantum mechanics [10], or a path integral framework [11–14].

2. Perturbation Series of the Morse Potential

Consider the classical Lagrangian with a unit mass ($m = 1$):

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

where

$$V(x) = V_0(\exp(-2x) - 2\exp(-x)),$$

and $V_0 > 0$ is the strength of the potential. The Feynman propagator is defined, taking $\hbar = 1$, by

$$K(x, T/x_0, 0) = \int\limits_{x(0)=x_0}^{x(T)=x} D[x(t)] \exp(i \int\limits_0^T L(x, \dot{x}, t)dt) \tag{2}$$

where $D[x(t)]$ is the formal measure on the path space. If we split the Lagrangian into the free part and the interaction part, we can show that the propagator takes the form

$$K(x, T/x_0, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} (i)^n K_n(x, T/x_0, 0), \tag{3}$$

where

$$K_n(x, T/x_0, 0) = (-1)^n \int\limits_0^T dt_n \cdots \int\limits_0^{t_2} dt_1 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=0}^{j=n} K_0(x_{j+1}, t_{j+1}/x_j, t_j) \prod_{j=1}^{j=n} V(x_j)dx_j \tag{4}$$

and $K_0(x_{j+1}, t_{j+1}/x_j, t_j)$ is the free particle propagator given by

$$K_0(x_{j+1}, t_{j+1}/x_j, t_j) = \left(\frac{1}{2i\pi(t_{j+1} - t_j)}\right)^{1/2} \exp(i(x_{j+1} - x_j)^2/2(t_{j+1} - t_j)). \tag{5}$$

Now we take the Fourier transform of $K_n(x, T/x_0, 0)$ on T as

$$G_n(x, x_0 : E) = G_n(x, x_0) = \int\limits_0^{\infty} K_n(x, T/x_0, 0) \exp(iET)dT, \tag{6}$$

which can be rewritten as

$$\begin{aligned} G_n(x, x_0) &= (-1)^n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=0}^{j=n} G_0(x_{j+1}, x_j) \prod_{j=1}^{j=n} V(x_j)dx_j \\ &= (-1)^n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_n G_0(x, x_n) V(x_n) \prod_{j=0}^{j=n-1} G_0(x_{j+1}, x_j) \prod_{j=1}^{j=n-1} V(x_j)dx_j \\ &= -\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_n G_0(x, x_n) V(x_n) G_{n-1}(x_n, x_0), \end{aligned} \tag{7}$$

where

$$\begin{aligned} G_0(x, x_n) &= \int\limits_0^{\infty} dT \cdot K_0(x, T : x_n, 0) \exp(iET) \\ &= \int\limits_0^{\infty} \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT \cdot \exp\left(iET + \frac{i}{2T}(x - x_n)^2\right), \end{aligned} \tag{8}$$

If we put $V(x)$ in the suitable form

$$V(x) = V_0(\exp(-2x) - 2\exp(-x)) = 4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \exp(-sx), \tag{9}$$

equation (7), using (8), becomes

$$G_n(x, x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^\infty \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT \cdot \exp(iET)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \cdot \exp\left(-sx_n + \frac{i}{2T}(x - x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n, x_0) = \tag{10}$$

$$-4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \exp(-sx) \int_0^\infty \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT \cdot \exp(iET)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \cdot \exp\left(s(x - x_n) + \frac{i}{2T}(x - x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n, x_0). \tag{11}$$

We now take the Fourier transform of $G_n(x, x_0)$ on the end point x:

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i\omega x) G_n(x, x_0) =$$

$$-4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^\infty \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT \cdot \exp(iET) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp((i\omega - s)x)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \cdot \exp\left(s(x - x_n) + \frac{i}{2T}(x - x_n)^2\right) G_{n-1}(x_n, x_0). \tag{12}$$

We note here that the integrals over x and x_n have a convolution form whose calculation is easily performed:

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^\infty \sqrt{\frac{1}{2i\pi T}} dT \cdot \exp(iET)$$

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i\Omega x) \exp(sx + \frac{i}{2T}x^2)\right] \widetilde{G_{n-1}}(\Omega, x_0), \tag{13}$$

where $\Omega = \omega + is$. Knowing that the integral in the square brackets is equal to

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i\omega x + \frac{i}{2T}x^2) = \sqrt{2i\pi T} \exp(-\frac{i\omega^2 T}{2}), \tag{14}$$

we find that

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = -4V_0 \sum_{s=1}^{s=2} (-1/2)^s \int_0^\infty dT \cdot \exp iT \left(E - \frac{\omega^2}{2} \right) \widetilde{G_{n-1}}(\Omega, x_0). \tag{15}$$

We are interested in the bound states for which E is negative ($E = -\varepsilon^2$); thus we now we perform the integral over T:

$$-2if_0(\omega) \equiv \int_0^\infty dT \cdot \exp iT \left(E - \frac{\omega^2}{2} \right) = \int_0^\infty dT \cdot \exp \left[-iT \left(\varepsilon^2 + \frac{\omega^2}{2} \right) \right] = \frac{-2i}{2\varepsilon^2 + \omega^2}. \tag{16}$$

After inserting the last formula in (15) we find, after summing over s in (15), a recurrence relation for $n \geq 1$:

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = -\, V_0 f_0(\omega) \left[\widetilde{G_{n-1}}(\omega + 2i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-1}}(\omega + i, x_0) \right], \tag{17}$$

and for the lower order this last equation translates into

$$\widetilde{G_{n-1}}(\omega + i, x_0) = iV_0 \left(\frac{2}{2\epsilon^2 + (\omega + i)^2} \right) \left[\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 3i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 2i, x_0) \right] \tag{18}$$

and

$$\widetilde{G_{n-1}}(\omega + 2i, x_0) = iV_0 \left(\frac{2}{2\epsilon^2 + (\omega + 2i)^2} \right) \left[\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 4i, x_0) - 2\widetilde{G_{n-2}}(\omega + 3i, x_0) \right], \tag{19}$$

and so on. If we continue the recurrence to the lower orders, we find the expression of $\widetilde{G_0}(\omega + ni, x_0)$

$$\begin{aligned} \widetilde{G_0}(\omega + ni, x_0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(i(\omega + ni)x) G_0(x, x_0) \\ &= -\left(\frac{2i}{2\varepsilon^2 + (\omega + ni)^2} \right) \exp(i\omega - n)x_0 \\ &= -2if_n(\omega) \exp(i\omega - n)x_0, \end{aligned} \tag{20}$$

where

$$f_n(\omega) = \frac{1}{2\varepsilon^2 + (\omega + ni)^2} \quad ; n = 1, 2 \ldots. \tag{21}$$

Then for $n = 1$ in (17), we find:

$$\widetilde{G_1}(\omega, x_0) = 2^2 V_0 \; f_0(\omega) \exp(i\omega x_0) \left[f_2(\omega) \exp(-2x_0) \; - \; 2f_1(\omega) \exp(-x_0) \right]$$

and

$$\begin{aligned} \widetilde{G_2}(\omega, x_0) \;\; = \;\; & i 2^3 V_0^2 f_0(\omega) \exp(i\omega x_0) \\ & [f_2(\omega) f_4(\omega) \exp(-4x_0) - 2f_2(\omega) f_3(\omega) \exp(-3x_0) \\ & -2f_1(\omega) f_3(\omega) \exp(-3x_0) + 4f_1(\omega) f_2(\omega) \exp(-2x_0)]\,; \end{aligned}$$

and in a similar way we obtain the other terms.

Hence, using the recurrence relation (17), we can show that each term $\widetilde{G_n}(\omega, x_0)$ is written as a sum of exponentials, $\exp(-kx_0)$, i.e.,

$$\widetilde{G_n}(\omega, x_0) = \sum_{k=n}^{k=2n} C_k(\omega) \exp(-kx_0), \tag{22}$$

since $\widetilde{G}(\omega, x_0)$ is of the form

$$\widetilde{G}(\omega, x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} (i)^n \, \widetilde{G_n}(\omega, x_0).$$

We note [14] that the perturbation series of the propagator is not analytic but is uniformly absolutely convergent in the coupling constant for every compact set in the variables $x, t, x_0, t_0 = 0$. Then from (22), if we bring together all terms in power of $\exp(-x_0)$, we find

$$\widetilde{G}(\omega, x_0) = 2if_0(\omega) \exp(i\omega x_0) \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega) \exp(-nx_0) \right], \tag{23}$$

where the coefficients $a_n(\omega)$ satisfy a recurrence formula

$$a_n(\omega) = 2V_0 f_n(\omega) \left(2a_{n-1}(\omega) - a_{n-2}(\omega)\right), \tag{24}$$

or

$$\left(2\varepsilon^2 + \omega^2 - n^2 + 2ni\omega\right) a_n(\omega) = 2V_0(2a_{n-1}(\omega) - a_{n-2}(\omega)), \tag{25}$$

with $a_{-1} = 0$, $a_0 = -1$; $a_1(\omega) = -4V_0 f_1(\omega)$ etc. Noting the series in brackets in (23) by:

$$2if_0(\omega)F(X) = 2if_0(\omega) \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega) X^n \equiv \widetilde{G}(\omega, x_0) \exp(-i\omega x_0), \tag{26}$$

we can check then that the series $F(X)$, the generating function of $a_n(\omega)$, satisfies the differential equation

$$X^2 F"(X) + X(1 - 2i\omega)F'(X) - \left(2\varepsilon^2 + \omega^2 - 4XV_0 + 2X^2 V_0\right) F(X) = 2\varepsilon^2 + \omega^2. \tag{27}$$

Then with (26) and (27), we find that $\widetilde{G}(\omega, X)$ must satisfy the differential equation

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dX}\left(X^2 \frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)\right) + \left[V_0(X^2 - 2X) + \varepsilon^2\right] \widetilde{G}(X) = -iX^{-i\omega}. \tag{28}$$

We note that this equation is equivalent to those governing Green's function itself but written in a form where we have put $X = \exp(-x_0)$ and done the Fourier transform on the end point x, i.e.

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx_0^2} + V(x_0) + \varepsilon^2\right] G(x, x_0/E) = -i\delta(x_0 - x). \tag{29}$$

We will return to the homogeneous equation associate to (28), i.e.

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dX}\left(X^2 \frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)\right) + \left[V_0(X^2 - 2X) + \varepsilon^2\right] \widetilde{G}(X) = 0, \tag{30}$$

which is an equation of the hypergeometric class with two linearly independent solutions

$$\breve{G}_1(X) = X^{-\frac{1}{2}} M_{\sqrt{2V_0}, \varepsilon\sqrt{2}} \left(2\sqrt{2V_0} X\right)$$

$$\breve{G}_2(X) = X^{-\frac{1}{2}} W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}} \left(2\sqrt{2V_0}X\right),$$

where $M_{\alpha,\beta}$, $W_{\alpha,\beta}$ denote Whittaker's functions [15].

Here we can see clearly that the change of variable $X = \exp(-x)$ is the appropriate change of variable to transform equation (29) to a Hypergeometric class equation (i.e. relation (30)).

Then with the same trick as above ($X = \exp(-x)$), equation (30) is converted to the relation

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) + \varepsilon^2\right]\Psi = 0. \tag{31}$$

Then from the solutions of the equation (30) we can conclude that

$$G_1(x) = \exp(-\frac{x}{2}) M_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}} \left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)$$

$$G_2(x) = \exp(-\frac{x}{2}) W_{\sqrt{2V_0},\varepsilon\sqrt{2}} \left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right)$$

are two linearly independent solutions of the equation (31) which satisfy the conditions:

$$\lim_{x\to+\infty} G_1(x) = 0 \quad ; \quad \lim_{x\to-\infty} G_2(x) = 0$$

Then according to some results in [16] we know that the Green function of the equation (31), which is our solution of the equation (29), i.e. our initial Green function, is given in the following form:

$$G(x,y) = \begin{cases} \frac{G_2(y)G_1(x)}{W} & si \;\; y < x \\ \frac{G_2(x)G_1(y)}{W} & si \;\; x < y \end{cases}$$

where for equation (31) W is the Wronskian of $G_1,\ G_2$.

With some properties of the Whittaker functions [17], we find that

$$W = \frac{2\sqrt{2V_0}\Gamma\left(1+2\sqrt{-2E}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-2E}+\sqrt{2V_0}\right)}.$$

Finally the Green function takes the form

$$\begin{aligned} G(x,y) \;\; = \;\; & \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\sqrt{-2E}+\sqrt{2V_0}\right)}{2\sqrt{2V_0}\Gamma\left(1+2\sqrt{-2E}\right)} \exp\frac{1}{2}(x+y). \\ & \left\{\Theta(x-y)\, W_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-y)\right) M_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) + \right. \\ & \left. \Theta(y-x)\, W_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-x)\right) M_{\sqrt{2V_0},\sqrt{-2E}}\left(2\sqrt{2V_0}\exp(-y)\right)\right\} \end{aligned}$$

where Θ denotes Heaviside's unit step function. A result was found earlier by different methods [11–14].

3. Discussion

In this work, we have added a further application, contributing to the perturbation method. This contribution concerns for first time the calculation of the energy Green's function of the Morse system by the perturbation series. This approach and the used method will, without any doubt, serve to bring another contribution to the non explored problems and we hope to stimulate further examples of applications in important problems of physics.

Acknowledgement

The authors thank Professor W. Koepf (Kassel University, Germany) for fruitful discussions, and their colleagues T. Boudjedaa and M. Benbitour for helpful comments.

References

[1] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path-Integral" (McGraw-Hill, New York, 1965)

[2] M. J. Goovaerts and J. T. Devreese, *J. Math. Phys.*, **13**, (1972), 1070.

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

[4] C. Grosche, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **23**, (1990), 5205.

[5] K. V. Bhagwat and S. V. Lawande, *Phys. Lett.,* **A135,** (1989), 417.

[6] D. H. Lin, *J. Phys. A Math. Gen.,* **30**, (1996), 4365.

[7] D. H. Lin, *J. Phys. A Math. Gen.*, **31**, (1998), 7577.

[8] K. V. Bhagwat and S. V. Lawande, *Phys. Lett.,* **A141**, (1989), 321

[9] M. Acila, B. Benali and M. T. Meftah, *J. Phys. A Math. Gen.,* **39**, (2006), 1357.

[10] Landau L. Lifchitz E., Quantum Mechanics Vol. III, Edition Mir (1974).

[11] D. C. Khandekar and S. V. Lawande, Physics Report (Review Section of Physics Letters) 137, Nos. 2 & 3 (1986), 115.

[12] I. H. Duru, *Phys. Rev. D,* **28**, (1983), 2689.

[13] W. Fischer, H. Leschke and P. Muller, *J. Phys. A: Math. Gen.,* **25**, (1992), 3835.

[14] Tobias Kuna, Ludwig Streit, Werner Westerkamp, *J. Math. Phys.*, **39**, (1998), 4476.

[15] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik 1994 Table of Integrals, Series, and Products 5th edn ed A Jeffrey (Boston Academic) 1059.

[16] Earl A. Coddington, Norman Levinson, Theo of Ord Diff Equ Ch 09 Mcgraw-Hill (1955), 222.

[17] M. Abramowitz and I. A. Stegun (ed) 1964 Handbook of Mathematical Functions (Washington, DC, US Government Printing Office).

Errata

Dans les équations (28) et (30) il fallait lire respectivement

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dX}\left(X^2\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)\right)+\frac{1}{2}X\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)+\left[V_0(X^2-2X)+\varepsilon^2\right]\widetilde{G}(X)=-iX^{-i\omega} \tag{28}$$

et

$$-\frac{1}{2}\frac{d}{dX}\left(X^2\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)\right)+\frac{1}{2}X\frac{d}{dX}\widetilde{G}(X)+\left[V_0(X^2-2X)+\varepsilon^2\right]\widetilde{G}(X)=0 \tag{30}$$

Abstract :

In this thesis we are interest in the formalism of the Feynman path integral and we present it in its theoretical aspect. We have introduced it in three approaches, which are essential in the most applications, Feynman path integral diagram, Trotter formula and Perturbation series. We have tried to avoid its initial aspect, the physics, and to use it with the mathematical arguments.
We applied this formalism for a non relativistic problem, Schrodinger equation for the Morse potential, as well as relativistic problems, free Feschbach-Villars equation and Klein-Gordon equation.

Key words:

Feynman Path Integral, perturbation series, Trotter formula, Schrodinger , equation, potential Morse potential, Feschbach –Villars equation, Klein-Gordon equation

ملخص:

في هذه الأطروحة ندرس مفهوما " للتكامل الدالي" في إطاره النظري. حيث تطرقنا إليه بثلاثة طرق, مخطط Feynman, علاقة Trotter و سلسلة الاضطرابات. لتجنب إطاره الأولي, الفيزيائي, نحاول استعمل هذا التكامل بطريقة على الأقل رياضية.
تطبيقا لهذا المفهوم للتكامل الدالي ندرس مسألة غير نسبية, معادلة "Schrodinger " لكمون "Morse ", وكذلك مسائل نسبية, معادلة "Feshbach-Villars" الحرة من دون كمون و معادلة "Klein-Gordon ".

الكلمات المفتاحية

التكامل الدالي, مخطط Feynman, علاقة Trotte, سلسلة الاضطرابات, معادلة "Schrodinger ", كمون "Morse ", معادلة "Feschbach-Villars", معادلة "Klein-Gordon ".

Résumé :

Dans cette thèse, nous présentons le formalisme de intégrale de chemin « Feynman Path Integral » dans tout son aspect théorique, nous l'avons abordé selon trois approches, que nous avons jugé essentiels dans la plupart des applications physique, diagramme de Feynman, formule de Trotter et série de perturbation. Nous avons essayé de le sortir de son cadre primaire, qui est la physique, et à l'utiliser d'une manière plus ou moins mathématique. Nous avons appliqué ce formalisme pour un problème non relativiste, équation de Schrodinger pour le potentiel de Morse, ainsi que pour des problèmes relativistes, équation Feschbach-Villars libre et l'équation de Klein-Gordon.

Mots clés :

Intégrale de chemin, « Feynman Path Integral », série de perturbation, formule de Trotter, équation de Schrodinger, potentiel de Morse, équation Feschbach-Villars, équation de Klein-Gordon.