

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MENTOURI- CONSTANTINE  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

Série :

MEMOIRE  
PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE  
MAGISTER  
EN PHYSIQUE  
SPECIALITE : PHYSIQUE QUANTIQUE  
THEME

Etude de l'atome hydrogène dans un espace courbe par  
l'intégrale de chemin

Par

Nabila BOUNOUIOUA

Soutenu le     /     / 2013

**devant le Jury :**

|              |              |         |                     |
|--------------|--------------|---------|---------------------|
| Président :  | F. Benamira  | Prof.   | Univ. Constantine 1 |
| Rapporteur : | L. Guechi    | Prof.   | Univ. Constantine 1 |
| Examineurs : | S. R. Zouzou | Prof.   | Univ. Constantine 1 |
|              | K. Boudjema  | M. C. A | Univ. Khenchela     |

# Table des matières

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Introduction</b>  | <b>3</b>  |
| <b>1 Intégrale de chemin sur un espace courbe à D dimensions</b>                     | <b>5</b>  |
| 1.1 Introduction . . . . .   | 5         |
| 1.2 Formulation de l'intégrale de chemin . . . . .                                   | 6         |
| 1.3 Intégrale de chemin dans un espace à 3 dimensions en coordonnées sphériques      | 12        |
| <b>2 L'atome d'hydrogène dans un espace courbe de constante de courbure positive</b> | <b>18</b> |
| 2.1 Introduction . . . . .   | 18        |
| 2.2 Fonction de Green . . . . .  | 19        |
| 2.3 Spectre et fonctions d'onde des états liés . . . . .                             | 26        |
| 2.4 Atome d'hydrogène dans un espace plat . . . . .                                  | 28        |
| 2.4.1 Etats liés . . . . .   | 31        |
| 2.4.2 Etats de diffusion . . . . .   | 32        |
| <b>3 L'atome d'hydrogène dans un espace hyperbolique</b>                             | <b>34</b> |
| 3.1 Introduction . . . . .   | 34        |
| 3.2 Fonction de Green . . . . .  | 35        |
| 3.3 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés . . . . .                   | 39        |
| 3.4 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états de diffusion . . . . .           | 41        |
| 3.5 Atome d'hydrogène dans l'espace plat . . . . .                                   | 45        |

|                      |           |
|----------------------|-----------|
| <b>Conclusion</b>    | <b>47</b> |
| <b>Bibliographie</b> | <b>49</b> |

# Introduction

Depuis la formulation de l'intégrale de chemin [1] par Feynman en 1948, comme une approche alternative aux méthodes d'Heisenberg [2] et Schrödinger [3], pour décrire le mouvement d'un système quantique régi par un Lagrangien classique exprimé en coordonnées cartésiennes dans un espace plat, plusieurs variantes de cette approche avaient vu le jour. Parmi ces variantes, nous pouvons mentionner celle introduite par DeWitt [4] pour construire le propagateur associé à une particule en mouvement dans un espace courbe. Cette variante avait fait ensuite l'objet de légères modifications dans deux formulations Hamiltoniennes de l'intégrale de chemin. La première formulation est basée sur l'ordre de Weyl d'écriture des opérateurs et la seconde repose sur la définition de la forme produit.

L'approche de l'intégrale de chemin que nous allons suivre ici est celle qui s'appuie sur le produit ordonné. Cette approche comparée aux autres méthodes présente l'avantage qui réside dans le fait que le calcul de la fonction de Green est direct.

Récemment, des traitements d'un atome hydrogénoïde dans un espace courbe sphérique [5] puis dans un espace hyperbolique [6] ont été discutés dans le cadre de la technique de l'intégrale de chemin développée sur la variété du groupe non compact  $SU(1, 1)$ . L'application de cette technique conduit toujours à un développement spectral du propagateur ou de la fonction de Green. La contribution de la partie continue au propagateur, lorsqu'elle existe, est obtenue de la partie discrète en employant la transformation de Sommerfeld-Watson [7, 8] basée sur la substitution  $\sum_J (2J+1) \rightarrow \int_0^\infty dk 2k \tanh[\pi(k+i\sigma)]$ , qui est valable uniquement lorsque les indices  $M_1$  et  $M_2$  des fonctions de Bargmann sont

entiers ( $\sigma = 0$ ) ou demi entiers ( $\sigma = \frac{1}{2}$ ). Par conséquent, si nous nous intéressons au spectre continu en plus de celui des états liés, l'intégrale de chemin sur la variété du groupe  $SU(1, 1)$  n'est plus appropriée pour traiter le problème de Kepler dans un espace courbe. Pour retrouver le facteur manquant dans l'expression des fonctions d'onde des états de diffusion d'un atome hydrogénoïde dans un espace plat signalé par Barut et ses collaborateurs [5], nous adoptons une approche qui consiste à construire la fonction de Green sous forme compacte.

Ce mémoire comporte trois chapitres. Dans le chapitre 1, nous présentons un rappel succinct sur la formulation de l'intégrale de chemin dans un espace courbe en insistant particulièrement sur les différents modes de développement de l'action et de la mesure. Le chapitre 2 est consacré à l'analyse du problème de Kepler dans un espace courbe sphérique. L'intégrale de chemin radiale est convertie en une intégrale de chemin associée au potentiel de Pöschl-Teller modifié par la technique de reparamétrisation des chemins. De l'expression compacte de la fonction de Green, nous tirons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées des états liés. Le chapitre 3 concerne l'étude du même système physique dans un espace hyperbolique. L'intégrale de chemin radiale se ramène directement par une simple transformation spatiale à celle relative au potentiel de Manning-Rosen. La fonction de Green est construite sous forme compacte. Les spectres d'énergie ainsi que les fonctions d'onde normalisées des états liés et des états de diffusion sont déterminés. Le problème de Kepler dans un espace plat est considéré comme un cas particulier pour tester la méthode employée dans cette étude. Nous terminons ce mémoire par une conclusion.

# Chapitre 1

## Intégrale de chemin sur un espace courbe à $D$ dimensions

### 1.1 Introduction

La formulation des intégrales de chemin dans un espace courbe pourvu d'une métrique arbitraire remonte, à la fin des années cinquante, au travail de DeWitt [4] dans lequel le propagateur est exprimé sous la forme d'une intégrale de chemin dans l'espace de configuration qui présente une différence de taille comparativement à la définition de l'intégrale de chemin donnée par Feynman [1, 9]. Dans le propagateur défini par DeWitt, le Lagrangien effectif du système contenu dans l'expression de l'action se compose du Lagrangien classique moins une correction quantique notée  $\Delta V_{DeW}$  :  $\mathcal{L}_{eff} = \mathcal{L}_{cl} - \Delta V_{DeW}$ . Cette correction est interprétée comme étant nécessaire pour retrouver l'équation de Schrödinger à partir de l'équation d'évolution dans le temps.

Deux autres formulations de l'intégrale de chemin dans un espace courbe ayant vu le jour plus tard se présentent de façon tout à fait différente. La première s'appuie sur l'évaluation de la métrique au point moyen et l'écriture de l'Hamiltonien en utilisant l'ordre de Weyl [10, 11, 12]. Cette procédure laisse apparaître une correction quantique qui présente une différence par rapport à celle obtenue par DeWitt. La seconde formulation

appelée définition de la forme produit est basée sur l'écriture du tenseur métrique sous la forme d'un produit de deux matrices et l'Hamiltonien avec l'apparence d'un produit ordonné du terme cinétique en disposant une matrice à gauche et l'autre à droite du produit des impulsions. L'Hamiltonien dans ce cas comprend également une correction quantique différente de celle de Weyl [13].

Le plan de ce chapitre est le suivant : le premier paragraphe est consacré à la présentation des différentes formulations de l'intégrale de chemin dans un espace courbe de dimension arbitraire dans un système de coordonnées généralisées. Dans le deuxième paragraphe, nous appliquons la formulation du produit ordonné au problème d'une particule en mouvement dans un espace muni d'une métrique très générale. L'exemple du mouvement d'une particule plongée dans un potentiel central quelconque est considéré. Nous montrons que le propagateur se décompose en un produit de noyaux radial et angulaire, en exprimant ce dernier en termes des fonctions harmoniques sphériques. La partie radiale sera traitée une fois le tenseur métrique spécifié.

## 1.2 Formulation de l'intégrale de chemin

Dans un espace courbe à  $D$  dimensions, ayant pour coordonnées curvilignes générales  $(q^1, q^2, \dots, q^D)$ , l'élément linéaire  $ds$  est défini par la forme quadratique appelée forme métrique donnée par :

$$ds^2 = \sum_{a=1}^D \sum_{b=1}^D g_{ab} dq^a dq^b, \quad (1.1)$$

où, d'après la convention d'Einstein, elle se note

$$ds^2 = g_{ab} dq^a dq^b. \quad (1.2)$$

Les quantités  $g_{ab}$  sont les composantes d'un tenseur d'ordre 2 appelé tenseur métrique. Dans cet espace, le mouvement du système classique est décrit par le Lagrangien classique

et l'Hamiltonien classique donnés respectivement par :

$$L_{cl} = \frac{M}{2} g_{ab} \dot{q}^a \dot{q}^b - V(q), \quad (1.3)$$

$$H_{cl} = \frac{1}{2M} g^{ab} p_a p_b + V(q), \quad (1.4)$$

où  $g^{ab}$  est un tenseur symétrique contravariant d'ordre 2, appelé tenseur réciproque du tenseur  $g_{ab}$ . Il est défini par :

$$g^{ab} = \frac{\text{cofacteur de } g_{ab}}{g}. \quad (1.5)$$

où

$$g = |g_{ab}| \quad (1.6)$$

est le déterminant des éléments  $g_{ab}$ .

L'équation de Schrödinger pour une particule en présence d'un potentiel  $V(q)$  dans un espace courbe avec une métrique  $g_{ab}$  et l'élément linéaire (1.2) est donnée par :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{LB} + V(q) \right] \Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t), \quad (1.7)$$

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

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^a} g^{ab} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial q^b}. \quad (1.8)$$

La fonction d'onde  $\Psi(q_f, t_f)$  solution de l'équation de Schrödinger (1.7) peut être définie par la formule intégrale :

$$\Psi(q_f, t_f) = \int \sqrt{g(q_i)} K(q_f, q_i; T) \Psi(q_i, t_i) dq_i; \quad T = t_f - t_i, \quad (1.9)$$

où  $K(q_f, q_i; T)$  est le propagateur de l'équation de Schrödinger. La première formulation de ce propagateur dans le cadre de l'intégrale de chemin de Feynman dans un espace

courbe est l'oeuvre de DeWitt [4]. Ce propagateur est explicitement donné dans la représentation Lagrangienne par :

$$\begin{aligned}
K(q_f, q_i; T) &= \int_{DeW} \sqrt{g} Dq(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{t_i}^{t_f} \frac{M}{2} g_{ab} \dot{q}^a \dot{q}^b - V(q) - \Delta V_{DeW}(q) \right] dt \right\} \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{ND}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left[ \int \sqrt{g(q^{(j)})} dq^{(j)} \right] \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2} g_{ab}(q^{(j-1)}) \Delta q^{a,(j)} \Delta q^{b,(j)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \varepsilon V(q^{(j-1)}) + \varepsilon \frac{\hbar^2}{6M} R(q^{(j-1)}) \right] \right\}, \tag{1.10}
\end{aligned}$$

où

$$R = g^{ab} \left( \Gamma_{ab,e}^c - \Gamma_{eb,a}^e + \Gamma_{ab}^f \Gamma_{ef}^e - \Gamma_{eb}^f \Gamma_{af}^e \right), \tag{1.11}$$

est la courbure scalaire exprimée en fonction des symboles de Christoffel

$$\Gamma_{be}^a = g^{af} (g_{bf,e} + g_{fe,b} - g_{be,f}); \quad g_{bf,e} = \frac{\partial g_{bf}}{\partial q^e}. \tag{1.12}$$

Notons que la correction quantique  $\Delta V_{DeW} = -\frac{\hbar^2 R}{6M}$  est indispensable pour déduire l'équation de Schrödinger (1.7) de l'équation d'évolution (1.9). D'autre part, nous pouvons remarquer que les termes de la métrique, le potentiel et la courbure scalaire contenus dans l'expression de l'action sont évalués au prépoint  $q^{(j-1)}$ . L'intégrale de chemin (1.10) peut être décrite en adoptant d'autres points tels que le point moyen  $\tilde{q}^{(j)} = \frac{1}{2} (q^{(j)} + q^{(j-1)})$  ou le postpoint  $q^{(j)}$ . Ceci se traduit par une modification de la variété de facteurs de correction dans le développement de Taylor des expressions de la mesure et de l'action dans lequel nous avons pris le soin de retenir uniquement les termes d'ordre  $\varepsilon$  qui ont effectivement une contribution significative dans l'intégrale de chemin. Cette contribution est une correction quantique qui peut être attribuée à un potentiel effectif dont la valeur est la même quelque soit le point autour duquel le développement limité de Taylor est

effectué.

La définition de l'intégrale de chemin par rapport au point moyen est une autre formulation très convenable qui est reliée à l'ordre de Weyl [10] d'écriture des opérateurs qui composent l'Hamiltonien  $H$  du système quantique. Pour exprimer  $H$  à l'aide des opérateurs associés à la position et à la quantité de mouvement du système en question, on construit les opérateurs associés aux impulsions conjuguées,

$$P_a = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial q^a} + \frac{\Gamma_a}{2} \right), \quad (1.13)$$

où les symboles de Christoffel  $\Gamma_a$  sont définis par :

$$\Gamma_a = \frac{\partial}{\partial q^a} \ln \sqrt{g}. \quad (1.14)$$

Les opérateurs  $P_a$  sont hermitiques par rapport au produit scalaire

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \int \Psi_1^* \Psi_2 \sqrt{g} dq. \quad (1.15)$$

En fonction des opérateurs (1.13), l'Hamiltonien

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^a} g^{ab} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial q^b} + V(q) \quad (1.16)$$

s'écrit en utilisant l'ordre de Weyl [10] de la façon suivante :

$$H = \frac{1}{8M} [g^{ab} P_a P_b + 2P_a g^{ab} P_b + P_a P_b g^{ab}] + V(q) + \Delta V_W, \quad (1.17)$$

expression dans laquelle apparaît une correction quantique donnée par :

$$\Delta V_W = \frac{\hbar^2}{8M} [g^{ab} \Gamma_a \Gamma_b + 2(g^{ab} \Gamma_b)_{,a} + g^{ab}_{,ab}], \quad (1.18)$$

où

$$(g^{ab} \Gamma_b)_{,a} = \frac{\partial}{\partial q^a} (g^{ab} \Gamma_b), \quad (1.19)$$

et

$$g_{,ab} = \frac{\partial^2}{\partial q^a \partial q^b} g^{ab}. \quad (1.20)$$

En utilisant la formule de Trotter  $e^{-iT(A+B)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( e^{-\frac{TA}{N}} e^{-\frac{TB}{N}} \right)^N$  (voir Ref. [14] ) et l'approximation du temps infinitésimal  $\varepsilon = \frac{T}{N}$  pour l'élément de matrice  $\langle q^{(j)} | \exp \left( -\frac{i\varepsilon}{\hbar} H \right) | q^{(j-1)} \rangle$ , nous obtenons la forme Hamiltonienne suivante de l'intégrale de chemin :

$$\begin{aligned} K(q_f, q_i; T) &= [g(q_f)g(q_i)]^{-\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left[ \int dq^{(j)} \right] \prod_{j=1}^N \left[ \int \frac{dP^{(j)}}{(2\pi\hbar)^D} \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N [P^{(j)} \Delta q^{(j)} - \varepsilon H(P^{(j)}, \tilde{q}^{(j)})] \right\}, \end{aligned} \quad (1.21)$$

où

$$H(P^{(j)}, \tilde{q}^{(j)}) = \frac{1}{2M} g^{ab} (\tilde{q}^{(j)}) P_a^{(j)} P_b^{(j)} + V (\tilde{q}^{(j)}) + \Delta V_W (\tilde{q}^{(j)}) \quad (1.22)$$

est l'Hamiltonien effectif défini par rapport au point moyen comme une conséquence de la formulation de l'ordre de Weyl. Le coefficient  $C = [g(q_f)g(q_i)]^{-\frac{1}{4}}$  est introduit pour assurer la forme de la normalisation [12]. En intégrant sur les variables  $P^{(j)}$ , nous obtenons l'expression de l'intégrale de chemin dans l'espace de configuration par rapport au point moyen :

$$\begin{aligned} K(q_f, q_i; T) &= [g(q_f)g(q_i)]^{-\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{ND}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left[ \int dq^{(j)} \right] \prod_{j=1}^N \sqrt{g(\tilde{q}^{(j)})} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2} g_{ab} (\tilde{q}^{(j)}) \Delta q^{a,(j)} \Delta q^{b,(j)} - \varepsilon (V (\tilde{q}^{(j)}) + \Delta V_w (\tilde{q}^{(j)})) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Notons que l'équation (1.23) est équivalente à (1.10).

L'intégrale de chemin peut être aussi définie dans une troisième formulation appelée "forme produit" [13]. En admettant que le tenseur métrique  $g_{ab}$  de rang  $D$  est réel et

symétrique, nous pouvons toujours le représenter sous la forme :

$$g_{ab}(q) = h_{ac}(q)h_{bc}(q), \quad (1.24)$$

où  $h_{ac}(q)$  et  $h_{bc}(q)$  sont des matrices réelles symétriques de dimensions  $D \times D$ . Elles satisfont la relation d'orthogonalité

$$h_{ac}(q)h^{bc}(q) = \delta_a^c, \quad (1.25)$$

où  $\delta_a^c$  est le symbole de Kronecker.

La racine carré du déterminant de  $g_{ab}(q)$  et les symboles de Christoffel  $\Gamma_a$  sont définis par :

$$\sqrt{g} = \det(h_{ac}(q)), \quad (1.26)$$

$$\Gamma_a = \frac{h_{,a}}{h} \quad (1.27)$$

avec

$$h_{,a} = \frac{\partial h}{\partial q^a}. \quad (1.28)$$

À l'aide des opérateurs  $P_a = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial q^a} + \frac{h_{,a}}{2h} \right)$ , l'Hamiltonien (1.16) exprimé en termes de  $h^{ab}(q)$  dans la forme ordonnée s'écrit

$$H = \frac{1}{2M} h^{ac}(q) P_a P_b h^{bc}(q) + V(q) + \Delta V_{FP}(q), \quad (1.29)$$

où  $\Delta V_{FP}(q)$  est la correction quantique résultant de la "forme produit" donnée par :

$$\begin{aligned} \Delta V_{FP} = & \frac{\hbar^2}{8M} \left[ 4h^{ac} h_{,ab}^{bc} + 2h^{ac} h^{bc} \frac{h_{,ab}}{h} + 2h^{ac} h^{bc} \frac{h_{,ab}}{h} \right. \\ & \left. + 2h^{ac} \left( h_{,b}^{bc} \frac{h_{,a}}{h} + h_{,a}^{bc} \frac{h_{,b}}{h} - h^{ac} h^{bc} \frac{h_{,a} h_{,b}}{h^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Suivant une démarche similaire à celle qui a permis de construire le propagateur ( 1.23)

dans la représentation de l'ordre de Weyl, on formule l'intégrale de chemin Hamiltonienne dans la définition de la "forme produit" ainsi :

$$\begin{aligned}
K(q_f, q_i; T) &= [g(q_f)g(q_i)]^{-\frac{1}{4}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int dq^{(j)} \right) \prod_{j=1}^N \left( \int \frac{dP^{(j)}}{(2\pi\hbar)^D} \right) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ P^{(j)} \Delta q^{(j)} - \frac{\varepsilon}{2M} h^{ac,(j)} h^{bc,(j-1)} P_a^{(j)} P_b^{(j)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \varepsilon (V(q^{(j)}) + \Delta V_{FP}(q^{(j)})) \right] \right\}. \tag{1.31}
\end{aligned}$$

En intégrant sur les variables  $P^{(j)}$ , nous obtenons l'intégrale de chemin dans l'espace de configuration et dans la définition de la "forme produit" :

$$\begin{aligned}
K(q_f, q_i; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{ND}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int \sqrt{g(q^{(j)})} dq^{(j)} \right) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2\varepsilon} h_{ac}^j h_{bc}^{j-1} \Delta q^{a,(j)} \Delta q^{b,(j)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \varepsilon (V(q^{(j)}) + \Delta V_{FP}(q^{(j)})) \right] \right\}. \tag{1.32}
\end{aligned}$$

### 1.3 Intégrale de chemin dans un espace à 3 dimensions en coordonnées sphériques

Considérons une particule soumise à un potentiel à symétrie sphérique dans un espace à trois dimensions muni d'un tenseur métrique donné en coordonnées polaires par :

$$g_{ab} = \begin{pmatrix} f(r) & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}. \tag{1.33}$$

Il a un déterminant

$$g = r^4 f(r) \sin^2 \theta, \quad (1.34)$$

et un inverse

$$g^{ab} = (g_{ab})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{f(r)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \end{pmatrix}. \quad (1.35)$$

L'opérateur Hamiltonien est donné par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{LB} + V(r), \quad (1.36)$$

où l'opérateur de Laplace-Beltami  $\Delta_{LB}$  est défini par :

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{r^2 \sqrt{f(r)}} \frac{\partial}{\partial r} \frac{r^2}{\sqrt{f(r)}} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (1.37)$$

Les composantes de l'opérateur associé à la quantité de mouvement sont :

$$\begin{cases} P_r = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Gamma_r}{2} \right); & \Gamma_r = \frac{2}{r} + h'(r), \\ P_\theta = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\Gamma_\theta}{2} \right); & \Gamma_\theta = \cot \theta, \\ P_\varphi = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\Gamma_\varphi}{2} \right); & \Gamma_\varphi = 0, \end{cases} \quad (1.38)$$

avec  $h(r) = f^{-\frac{1}{2}}(r)$  et  $h'(r) = \frac{dh(r)}{dr}$ .

Dans le but d'exprimer l'Hamiltonien ( 1.36) à l'aide des opérateurs associés à la position et à la quantité de mouvement, nous pouvons choisir la formulation de l'ordre de Weyl [10, 11, 15] où celle du produit ordonné [13]. À cause de la nature particulière de  $g_{ab}$  et  $g^{ab}$  respectivement, la correction quantique  $\Delta V$  est la même dans les deux formulations. Par conséquent, nous obtenons pour l'Hamiltonien l'expression suivante :

$$H = \frac{1}{2M} \left[ h(r) P_r^2 h(r) + \frac{1}{r^2} P_\theta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} P_\varphi^2 \right] + V + \Delta V, \quad (1.39)$$

avec le potentiel quantique  $\Delta V$  donné par :

$$\Delta V = \frac{1}{2M} \left( 2hh'' + \frac{h'h''}{r} - h'^2 - \frac{1}{r^2} - \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \right). \quad (1.40)$$

Dans ce cas, l'intégrale de chemin Lagrangienne suivant la définition du produit ordonné s'écrit

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_f, \vec{r}_i; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{3N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int \sqrt{f(r_j)} r_j^2 \sin \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right\}, \end{aligned} \quad (1.41)$$

avec l'action élémentaire

$$\begin{aligned} S(j, j-1) &= \frac{M}{2\varepsilon h_j h_{j-1}} (\Delta r_j)^2 + \frac{M r_j r_{j-1}}{2\varepsilon} (\Delta \theta_j)^2 \\ &+ \frac{M r_j r_{j-1} \sin \theta_j \sin \theta_{j-1}}{2\varepsilon} (\Delta \varphi_j)^2 - \varepsilon (V(r_j) + \Delta V(r_j, \theta_j)). \end{aligned} \quad (1.42)$$

À ce stade, nous observons que la variable radiale  $r_j$  et les variables angulaires  $(\theta_j, \varphi_j)$  ne sont pas séparées. Pour la partie angulaire du propagateur, notons que

$$\cos(\Delta \theta_j) \approx 1 - \frac{(\Delta \theta_j)^2}{2!} + \frac{(\Delta \theta_j)^4}{4!}, \quad (1.43)$$

et à l'aide de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [16], nous pouvons effectuer les substitutions suivantes :

$$(\Delta \theta_j)^4 \rightarrow \frac{3}{(r_j r_{j-1})^2} \left( \frac{i\hbar\varepsilon}{M} \right)^2, \quad (1.44)$$

$$(\Delta \varphi_j)^4 \rightarrow \frac{3}{(r_j r_{j-1} \sin \theta_j \sin \theta_{j-1})^2} \left( \frac{i\hbar\varepsilon}{M} \right)^2. \quad (1.45)$$

Il s'ensuit que

$$\frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} \frac{(\Delta\theta_j)^2}{2} \simeq \frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} [1 - \cos(\Delta\theta_j)] - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8Mr_j r_{j-1}}, \quad (1.46)$$

et

$$\frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} \sin\theta_j \sin\theta_{j-1} \frac{(\Delta\varphi_j)^2}{2} \simeq \frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} \sin\theta_j \sin\theta_{j-1} [1 - \cos(\Delta\varphi_j)] - \varepsilon \frac{\hbar^2}{8Mr_j r_{j-1} \sin\theta_j \sin\theta_{j-1}}. \quad (1.47)$$

En regroupant les expressions (1.46) et (1.47), nous aurons

$$\frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} \left[ \frac{(\Delta\theta_j)^2}{2} + \sin\theta_j \sin\theta_{j-1} \frac{(\Delta\varphi_j)^2}{2} \right] \simeq \frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} [1 - \cos\Theta_j] - \frac{\varepsilon\hbar^2}{8Mr_j r_{j-1}} \left( 1 + \frac{1}{\sin\theta_j \sin\theta_{j-1}} \right), \quad (1.48)$$

avec

$$\cos\Theta_j = \cos\theta_j \cos\theta_{j-1} + \sin\theta_j \sin\theta_{j-1} \cos(\Delta\varphi_j). \quad (1.49)$$

Compte tenu de (1.40) et (1.48), l'action élémentaire (1.42) se réécrit sous la forme :

$$S(j, j-1) = \frac{M}{2\varepsilon h_j h_{j-1}} (\Delta r_j)^2 + \frac{Mr_j r_{j-1}}{\varepsilon} [1 - \cos\Theta_j] - \varepsilon (V(r_j) + \Delta V(r_j)). \quad (1.50)$$

où

$$\Delta V(r_j) = \frac{\hbar^2}{8M} \left( 2h(r_j)h''(r_j) + \frac{h'(r_j)h''(r_j)}{r_j} - h'^2(r_j) \right). \quad (1.51)$$

Afin de séparer les variables  $r_j, \theta_j$  et  $\varphi_j$ , nous combinons le développement en série de Fourier et le comportement asymptotique des fonctions de Bessel modifiées pour  $|z|$

grand [17], pour avoir

$$\begin{aligned} \exp [iz(1 - \cos \Theta_j)] &= \frac{i}{2z} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (2l+1) \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \exp(im\Delta\varphi_j) P_l^m(\cos \theta_j) \\ &\quad \times P_l^m(\cos \theta_{j-1}) \exp \left[ -i \frac{l(l+1)}{2z} \right], \end{aligned} \quad (1.52)$$

et compte tenu du lien entre les harmoniques sphériques et les polynômes de Legendre [18],

$$Y_{l_j}^m(\theta_j, \varphi_j) = \begin{cases} (-1)^m \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}; & m \geq 0, \\ \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^{-m}(\cos \theta) e^{-im\varphi}; & m < 0, \end{cases} \quad (1.53)$$

il est plus pratique d'utiliser la formule

$$\exp [iz(1 - \cos \Theta_j)] = \frac{2i\pi}{z} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \exp \left[ -i \frac{l(l+1)}{2z} \right] Y_{l_j}^{m*}(\theta_j, \varphi_j) Y_{l_{j-1}}^m(\theta_{j-1}, \varphi_{j-1}). \quad (1.54)$$

En insérant cette formule dans l'expression (1.41), nous obtenons

$$\begin{aligned} K(\vec{r}_f, \vec{r}_i; T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\epsilon\hbar} \right)^{\frac{3N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int \sqrt{f(r_j)} r_j^2 \sin^2 \theta_j dr_j d\theta_j d\varphi_j \right) \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2\epsilon h(r_j)h(r_{j-1})} (\Delta r_j)^2 - \epsilon (V(r_j) + \Delta V(r_j)) \right] \right\} \\ &\quad \prod_{j=1}^N \left( \frac{2i\pi\epsilon\hbar}{Mr_j r_{j-1}} \right) \sum_{l_j=0}^{\infty} \sum_{m_j=-l_j}^{l_j} \exp \left[ -\frac{i\epsilon\hbar l_j(l_j+1)}{2Mr_j r_{j-1}} \right] Y_{l_j}^{m_j*}(\theta_j, \varphi_j) \\ &\quad \times Y_{l_{j-1}}^{m_{j-1}}(\theta_{j-1}, \varphi_{j-1}). \end{aligned} \quad (1.55)$$

En employant la relation d'orthogonalité des harmoniques sphériques

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^m(\theta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}, \quad (1.56)$$

les intégrations sur les variables angulaires peuvent être effectuées, après quoi le propagateur peut s'écrire

$$K(\vec{r}_f, \vec{r}_i; T) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l K_l(r_f, r_i; T) Y_l^{m*}(\theta_f, \varphi_f) Y_l^m(\theta_i, \varphi_i), \quad (1.57)$$

où

$$K_l(r_f, r_i; T) = \frac{1}{r_f r_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int \sqrt{f(r_j)} dr_j \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M(\Delta r_j)^2}{2\varepsilon h(r_j)h(r_{j-1})} - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr_j r_{j-1}} - \varepsilon (V(r_j) + \Delta V(r_j)) \right] \right\}. \quad (1.58)$$

Le calcul de ce propagateur radial dépend de la spécification de la fonction  $h(r)$ , c'est à dire de la nature de l'espace courbe en considération.

# Chapitre 2

## L'atome d'hydrogène dans un espace courbe de constante de courbure positive

### 2.1 Introduction

Nous nous proposons ici d'utiliser le formalisme de l'intégrale de chemin dans un espace courbe introduit dans le chapitre précédent pour étudier le problème d'un atome hydrogénoïde dans un espace courbe sphérique à trois dimensions qui a fait l'objet d'un grand nombre de travaux et était sans doute connu de Schrödinger [3] dès 1940. Citons par exemple Stevenson [19] qui a obtenu les solutions de ce problème par la méthode conventionnelle. Le même problème a été étudié dans une approche algébrique [20] qui repose sur le groupe de symétrie dynamique  $SU(1, 1)$  et à l'aide de la méthode des intégrales de chemin [5] développée sur la variété du groupe non compact  $SU(1, 1)$ . Signalons aussi qu'une méthode de construction d'un ensemble d'états cohérents [21] et une analyse par la technique de la supersymétrie en mécanique quantique accompagnée de l'application de la condition d'invariance de forme du potentiel [22] ont été proposées dernièrement.

Dans le cadre de l'intégrale de chemin, notons que Barut et ses collaborateurs ont trouvé les fonctions d'onde des états continus d'un atome hydrogénoïde dans l'espace sphérique plat par des considérations de prolongement analytique hormis un facteur constant particulièrement important dans la détermination de la densité de particules au point  $r = 0$ . Dans le cas répulsif, ce facteur constant permet de trouver le facteur de Gamow [23, 24] qui est le terme dominant dans le rapport de réactions entre des noyaux de charges positives à des énergies de bombardement basses lorsque le rayon nucléaire peut être supposé assez petit. Par conséquent, il est utile de réexaminer le problème d'un atome hydrogénoïde dans un espace courbe en employant une variante de l'intégrale de chemin différente de celle qui se base sur la variété du groupe  $SU(1, 1)$ . Dans un premier paragraphe, nous allons calculer la fonction de Green radiale sous une forme compacte en ramenant ce problème à celui du potentiel de Pöschl-Teller modifié au moyen de la technique de transformation spatio-temporelle. Dans un deuxième paragraphe, nous déterminons le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés. Dans un troisième paragraphe, nous considérons le problème de Kepler dans un espace plat. Nous déduisons des résultats précédent la fonction de Green sous forme compacte en faisant tendre le rayon de courbure  $R$  vers l'infini. Nous vérifions que les spectres d'énergie ainsi que les fonctions d'onde des états liés et des états de diffusion sont exactement ceux d'un atome hydrogénoïde établis dans la littérature.

## 2.2 Fonction de Green

L'espace sphérique dont il s'agit ici est un espace uniformément courbe avec une constante de courbure positive  $K = \frac{1}{R^2}$ . La forme quadratique de l'élément linéaire de cet espace est défini en coordonnées polaires par :

$$ds^2 = \frac{dr^2}{1 - \frac{r^2}{R^2}} + r^2 (d\theta^2 \sin^2 \theta + d\varphi^2), \quad (2.1)$$

avec  $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \theta < \pi$  et  $0 \leq \varphi < 2\pi$ . En prenant pour nouvelle variable  $\chi$  définie par la relation

$$\sin \chi = \frac{r}{R}; \quad \chi \in [0, \pi[, \quad (2.2)$$

on peut écrire l'élément linéaire (2.1) sous la forme :

$$ds^2 = R^2 d\chi^2 + R^2 \sin^2 \chi (d\theta^2 \sin^2 \theta d\varphi^2), \quad (2.3)$$

appelée métrique de Roberston et Walker.

L'expression du tenseur métrique dans ce système de coordonnées est donnée par :

$$(g_{ab}) = \begin{pmatrix} R^2 & 0 & 0 \\ 0 & R^2 \sin^2 \chi & 0 \\ 0 & 0 & R^2 \sin^2 \chi \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

d'où résulte le déterminant

$$g = R^6 \sin^4 \chi \sin^2 \theta. \quad (2.5)$$

Le potentiel de Coulomb dans cet espace [5] est de la forme :

$$V(\chi) = -\frac{Ze^2}{R} \cot \chi, \quad (2.6)$$

et l'Hamiltonien quantique qui gouverne le mouvement d'une particule de masse  $M$  dans cet espace s'écrit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{LB} + V(\chi), \quad (2.7)$$

où l'opérateur de Laplace-Beltrami est d'après la définition (1.8) égal à

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{R^2 \sin^2 \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} \sin^2 \chi \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{1}{R^2 \sin^2 \chi \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{R^2 \sin^2 \chi \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (2.8)$$

Pour calculer le propagateur relatif à une particule en mouvement dans l'espace sphé-

rique défini par la métrique (2.1), la fonction  $h(r)$  a pour expression

$$h(r) = \sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}}, \quad (2.9)$$

et la correction quantique déterminée par l'équation (1.30) vaut alors

$$\Delta V(r_j) = -\frac{3\hbar^2}{4MR^2} - \frac{3\hbar^2 r_j^2}{8MR^4 h^2(r_j)}. \quad (2.10)$$

Ainsi, par un argument semblable à celui qui a conduit à l'équation (1.10), le propagateur radial pour ce problème se met sous la forme :

$$\begin{aligned} K_l(r_f, r_i; T) &= \frac{1}{r_f r_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int \frac{dr_j}{\sqrt{1 - \frac{r_j^2}{R^2}}} \right) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(j, j-1) \right\}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

où

$$\begin{aligned} S(j, j-1) &= \frac{M}{2\varepsilon \sqrt{1 - \frac{r_j^2}{R^2}} \sqrt{1 - \frac{r_{j-1}^2}{R^2}}} (\Delta r_j)^2 - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr_j r_{j-1}} + \frac{3\varepsilon\hbar^2}{4MR^2} \\ &+ \frac{3\varepsilon\hbar^2 r_j^2}{8MR^4 \left(1 - \frac{r_j^2}{R^2}\right)} - \varepsilon V(r_j). \end{aligned} \quad (2.12)$$

À ce stade, il est commode d'appliquer la transformation spatiale (2.2) et de remplacer le propagateur radial (2.11) par l'expression équivalente suivante :

$$K_l(r_f, r_i; T) = \frac{1}{R^3 \sin \chi_f \sin \chi_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d\chi_j \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N A(j, j-1) \right\}, \quad (2.13)$$

avec l'action élémentaire donnée par :

$$\begin{aligned}
A(j, j-1) &= \frac{MR^2}{2\varepsilon} \left[ (\Delta\chi_j)^2 + \frac{1}{4} \left( \tan^2 \chi_j + \frac{2}{3} \right) (\Delta\chi_j)^4 \right] \\
&\quad - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2MR^2 \sin^2 \chi_j} + \frac{3\varepsilon\hbar^2}{4MR^2} + \frac{3\varepsilon\hbar^2}{8MR^4} \tan^2 \chi_j + \varepsilon \frac{Ze^2}{R} \cot \chi_j.
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Nous pouvons remplacer le terme en  $(\Delta\chi_j)^4$  par une correction quantique en utilisant l'identité [16]

$$\langle (\Delta\chi_j)^4 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta\chi_j) (\Delta\chi_j)^4 \left[ \frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[ \frac{iMR^2}{2\hbar\varepsilon} (\Delta\chi_j)^2 \right] = -3 \left( \frac{\hbar\varepsilon}{MR^2} \right)^2. \tag{2.15}$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}
K_l(r_f, r_i; T) &= \frac{1}{R^3 \sin \chi_f \sin \chi_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d\chi_j \right) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{MR^2}{2\varepsilon} (\Delta\chi_j)^2 + \frac{\varepsilon\hbar^2}{2MR^2} - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2MR^2 \sin^2 \chi_j} + \varepsilon \frac{Ze^2}{R} \cot \chi_j \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Il est plus commode de calculer la fonction de Green partielle, c'est à dire la transformée de Fourier du propagateur (2.16),

$$\begin{aligned}
G_l(r_f, r_i; \tilde{E}) &= \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{i}{\hbar} ET \right] K_l(r_f, r_i; T) \\
&= \frac{1}{R^3 \sin \chi_f \sin \chi_i} \int_0^\infty P_l(\chi_f, \chi_i; T) dT
\end{aligned} \tag{2.17}$$

où

$$P_l(\chi_f, \chi_i; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{MR^2}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d\chi_j \right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \tilde{A}(j, j-1) \right\}, \quad (2.18)$$

est appelé couramment le promoteur avec l'action élémentaire modifiée,

$$\tilde{A}(j, j-1) = \frac{MR^2}{2\varepsilon} (\Delta\chi_j)^2 - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2MR^2 \sin^2 \chi_j} + \varepsilon \frac{Ze^2}{R} \cot \chi_j + \varepsilon \left( E + \frac{\hbar^2}{2MR^2} \right). \quad (2.19)$$

Comme dans la référence [20], effectuons la transformation spatiale complexe définie par :

$$e^\beta = \tanh \left( \frac{i\chi}{2} \right), \quad (2.20)$$

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

$$\frac{dt}{ds} = \frac{4}{\sinh^2 \chi}, \quad (2.21)$$

qui, sous forme discrète, s'écrit

$$\varepsilon = \frac{4\sigma_j}{\sinh \chi_j \sinh \chi_{j-1}}. \quad (2.22)$$

Sous ces transformations, l'action élémentaire (2.19) devient

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{A}}(j, j-1) &= \frac{M\mathcal{R}^2}{2\sigma_j} \left[ \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)^2 + \frac{1}{12} \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)^4 \right] \\
&+ \frac{M\mathcal{R}^2}{2\sigma_j} \left[ \frac{1}{4} - \frac{1}{12} \left( \frac{1}{\sinh^2 \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)} - \frac{1}{\cosh^2 \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)} \right) \right] \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)^4 \\
&\sigma_j \frac{\left( E - \frac{\hbar^2}{2M\mathcal{R}^2} - \kappa \right)}{\sinh^2 \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)} - \sigma_j \frac{\left( E - \frac{\hbar^2}{2M\mathcal{R}^2} + \kappa \right)}{\cosh^2 \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)} - \frac{2l(l+1)\hbar^2}{2M\mathcal{R}^2} \sigma_j,
\end{aligned} \tag{2.23}$$

où

$$\mathcal{R} = iR, \quad \kappa = \frac{Ze^2}{\mathcal{R}} \tag{2.24}$$

et la mesure se réécrit

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{R^3 \sin \chi_f \sin \chi_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M\mathcal{R}^2}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d\chi_j \right) \\
&= \frac{i}{2} (\sinh \beta_f \sinh \beta_i)^{\frac{3}{2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left( \frac{M\mathcal{R}^2}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right) \right).
\end{aligned} \tag{2.25}$$

À l'aide de la procédure de Mc Laughlin et Schulman [16], nous introduisons une correction purement quantique en effectuant la substitution suivante :

$$\left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)^4 \longrightarrow - \left( \frac{\hbar\sigma_j}{M\mathcal{R}^2} \right)^2. \tag{2.26}$$

En tenant compte de la contrainte

$$\frac{4}{\sinh \beta_f \sinh \beta_f} \int_0^\infty dS \delta \left( T - 4 \int_0^S \frac{ds}{\sinh^2 \beta} \right) = 1, \tag{2.27}$$

la fonction de Green partielle (2.17) devient alors

$$G_l(r_f, r_i; \tilde{E}) = \frac{2i}{R^3} (\sinh \beta_f \sinh \beta_i)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dS \exp \left[ -i \frac{2(l + \frac{1}{2})^2 \hbar}{M\mathcal{R}^2} \right] P_{mPT}(\beta_f, \beta_i; S), \quad (2.28)$$

où

$$\begin{aligned} P_{mPT}(\beta_f, \beta_i; S) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left( \frac{M\mathcal{R}^2}{2i\pi\hbar\sigma_j} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right) \right) \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M\mathcal{R}^2}{2\sigma_j} \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)^2 \right. \right. \\ &\left. \left. + \sigma_j \left( \frac{\tilde{E} - \kappa}{\sinh^2 \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)} - \frac{\tilde{E} + \kappa}{\cosh^2 \left( \frac{\Delta\beta_j}{2} \right)} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Le potentiel contenu dans le propagateur (2.29) a la forme du potentiel de Pöschl-Teller modifié, qui a été étudié récemment par plusieurs auteurs [8, 25, 26, 27, 28]. Puisque sa solution exacte est bien connue, nous nous contentons donc d'écrire directement l'expression finale de (2.28) sous la forme :

$$\begin{aligned} G_l(r_f, r_i; \tilde{E}) &= \frac{4M}{\hbar R} \frac{\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}}) \Gamma(L_{\tilde{E}} + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 + M_2 + 1) \Gamma(M_1 - M_2 + 1)} \\ &\left[ \sinh \left( \frac{\beta_f}{2} \right) \sinh \left( \frac{\beta_i}{2} \right) \right]^{M_1 + M_2 + 1} \left[ \cosh \left( \frac{\beta_f}{2} \right) \cosh \left( \frac{\beta_i}{2} \right) \right]^{2M_2 + 1} \\ &\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{1}{\cosh^2 \left( \frac{\beta_{<}}{2} \right)} \right) \\ &\times {}_2F_1 \left( M_1 - L_{\tilde{E}}, L_{\tilde{E}} + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \tanh^2 \left( \frac{\beta_{>}}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.30)$$

où nous avons employé les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_{\tilde{E}} = \frac{1}{2} \left( -1 + \sqrt{1 + \frac{2MR^2}{\hbar^2} (\tilde{E} + \kappa)} \right), \\ M_1 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{MR^2}{2\hbar^2} (\tilde{E} - \kappa)} + l + \frac{1}{2}, \\ M_2 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{MR^2}{2\hbar^2} (\tilde{E} - \kappa)} - l - \frac{1}{2}, \\ \tilde{E} = E + \frac{3\hbar^2}{8MR^2}. \end{array} \right. \quad (2.31)$$

## 2.3 Spectre et fonctions d'onde des états liés

Le spectre d'énergie des états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (2.30). Ces pôles sont justement ceux de la fonction  $\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}})$  qui se trouvent lorsque

$$M_1 - L_{\tilde{E}} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.32)$$

En nous servant des équations (2.31) dans (2.32), nous obtenons les niveaux d'énergie

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2MR^2} (n^2 - 1) - \frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}, \quad (2.33)$$

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

Les fonctions d'onde correspondantes aux états liés peuvent être trouvées par approximation de la fonction  $\Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}})$  au voisinage des pôles (2.32) :

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_{\tilde{E}}) &\simeq \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_{\tilde{E}} + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{\hbar^2}{nMR^2} \frac{n^2 + \varepsilon_n^2}{E - E_n}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

avec  $\varepsilon_n = \frac{Ze^2}{iR}$ . Alors en se servant du comportement (2.34) et en tenant compte de la

formule de transformation de Gauss (voir Ref. [29], p. 1043, Eq. (9.131.2))

$$\begin{aligned}
{}_2F_1(a, b, c, z) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1, 1-z) \\
&\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1, 1-z),
\end{aligned} \tag{2.35}$$

il est facile de voir que le second terme dans (2.35) est nul du fait que la fonction  $\Gamma(a)$  est infinie ( $a = -n_r$ ). Donc, l'expression de la fonction de Green (2.30) peut se mettre sous la forme d'un développement spectral

$$G_l(r_f, r_i; \tilde{E}) = i\hbar \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{R_{nl}(r_f)R_{nl}(r_i)}{E - E_n}, \tag{2.36}$$

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

$$\begin{aligned}
R_{nl}(r) &= \exp\left[\frac{i\pi}{2}(2n_r + l + 1)\right] \frac{2^{l+1}}{\Gamma(2l+2)} \\
&\quad \times \left[\frac{i}{R^3} \frac{n^2 + \varepsilon_n^2}{n} \frac{\Gamma(1+l+i\varepsilon_n)\Gamma(1+l+n)}{\Gamma(i\varepsilon_n-l)\Gamma(n-l)}\right]^{\frac{1}{2}} \exp[-i\chi(1+l-n+i\varepsilon_n)] \\
&\quad \times \sin^l \chi {}_2F_1(1+l-n, 1+l+i\varepsilon_n, 2l+2; 1 - e^{-2i\chi}).
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Cette expression est obtenue après avoir effectué les transformations suivantes :

$$\sin \chi = \frac{1}{i \sinh \beta}, \quad \sinh^2\left(\frac{\beta}{2}\right) = \frac{e^{-i\chi}}{2i \sin \chi}, \quad \cosh^2\left(\frac{\beta}{2}\right) = \frac{e^{i\chi}}{2i \sin \chi}. \tag{2.38}$$

En utilisant la relation fonctionnelle (voir Ref.[29], p.1043, Eq. (9.131.1)),

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{-a} {}_2F_1\left(a, c-b, c; \frac{z}{1-z}\right), \tag{2.39}$$

nous pouvons aussi exprimer (2.37) sous la forme :

$$\begin{aligned}
R_{nl}(r) = & \exp \left[ \frac{i\pi}{2} (2n_r + l + 1) \right] \frac{2^{l+1}}{\Gamma(2l + 2)} \left[ \frac{i}{R^3} \frac{n^2 + \varepsilon_n^2}{n} \frac{\Gamma(1 + l + i\varepsilon_n)\Gamma(1 + l + n)}{\Gamma(i\varepsilon_n - l)\Gamma(n - l)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \times \exp [-i\chi(n + i\varepsilon_n - l - 1)] \sin^l \chi {}_2F_1(1 + l - n, 1 + l - i\varepsilon_n, 2l + 2; 1 - e^{2i\chi}).
\end{aligned}
\tag{2.40}$$

Notons que les conditions aux limites sur les fonctions d'onde (2.40) sont satisfaites. Le nombre de niveaux d'énergie est infini comme nous pouvons le voir d'ailleurs sur la figure1. Cela signifie que le spectre d'énergie est entièrement discret.

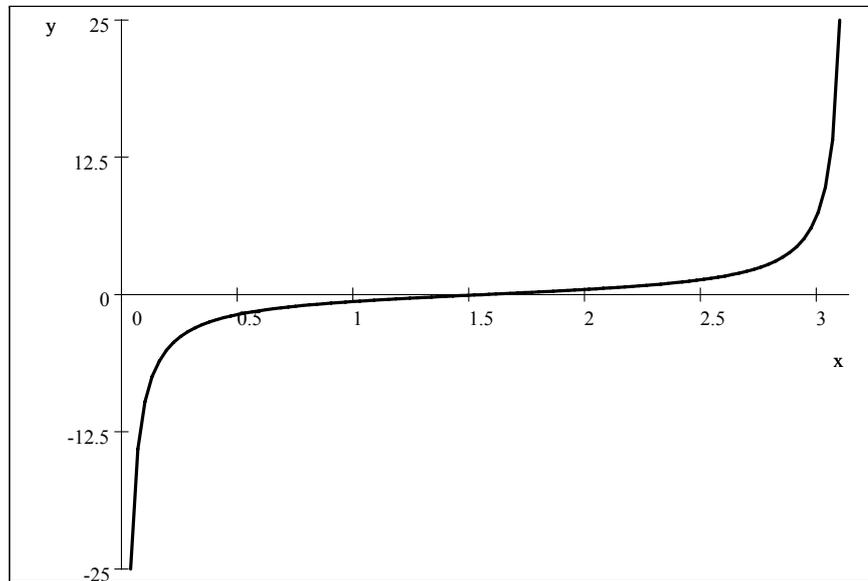


Figure 1 : allure du potentiel  $\frac{R}{Ze^2}V(\chi)$ .

## 2.4 Atome d'hydrogène dans un espace plat

Lorsque  $R \rightarrow \infty$ , la constante de courbure  $K$  devient nulle et l'espace prend la forme d'un espace plat. Le potentiel (2.6) se ramène à l'expression standard du potentiel de

Coulomb attractif

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (2.41)$$

Dans ce cas, nous pouvons voir à partir des équations (2.31) que les paramètres  $L_{\tilde{E}}$ ,  $M_1$  et  $M_2$  se réduisent approximativement à

$$L_{\tilde{E}} \underset{R \rightarrow \infty}{\simeq} -\frac{1}{2} - i\frac{Ze^2}{2} \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}} + \frac{R}{2} \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}, \quad (2.42)$$

$$M_1 \underset{R \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{2} + l + i\frac{Ze^2}{2} \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}} + \frac{R}{2} \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}, \quad (2.43)$$

$$M_2 \underset{R \rightarrow \infty}{\simeq} -\frac{1}{2} - l + i\frac{Ze^2}{2} \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}} + \frac{R}{2} \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}. \quad (2.44)$$

D'autre part, en utilisant la formule de transformation de Gauss (2.35) et en tenant compte de la formule déduite de la fonction hypergéométrique  ${}_2F_1(a, b, c; z)$  par passage à la limite en nous servant de la formule [31]

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} {}_2F_1\left(\alpha, \beta, \gamma; \frac{z}{\beta}\right) &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left[ 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \left(\frac{z}{\beta}\right) + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \left(\frac{z}{\beta}\right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\beta(\beta+1)(\beta+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)} \left(\frac{z}{\beta}\right)^3 + \dots \right] \\ &= \left[ 1 + \frac{\alpha}{\gamma} z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots \right] \\ &= {}_1F_1(\alpha, \gamma; z), \end{aligned} \quad (2.45)$$

nous montrons après quelques calculs simples qu'à la limite  $R \rightarrow \infty$ , la fonction de Green (2.30) vaut

$$\begin{aligned}
\lim_{R \rightarrow \infty} G_l(r_f, r_i; \tilde{E}) &= \frac{4M}{\hbar} \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu - \lambda)}{\Gamma(2\mu + 1)} \\
&\times z_i^{\mu - \frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(z_f + z_i)} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda, 2\mu + 1; z_i\right) \\
&\times \left[ \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu - \lambda)} z_f^{\mu - \frac{1}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda, 2\mu + 1; z_f\right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu - \lambda)} z_f^{-\mu - \frac{1}{2}} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \mu - \lambda, -2\mu; z_f\right) \right], \tag{2.46}
\end{aligned}$$

où nous avons posé

$$\mu = \frac{1}{2} + l, \quad \lambda = -i \frac{Ze^2}{2} \sqrt{\frac{M}{2\hbar^2 E}}, \tag{2.47}$$

et

$$z_i = 2i \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} r_i, \quad z_f = 2i \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} r_f. \tag{2.48}$$

En utilisant des liens entre les fonctions de Whittaker et les fonctions hypergéométriques confluentes (voir Ref. [29], p.1059, Eqs. (9.220.2) et (9.220.3))

$$M_{\lambda, \mu}(z) = z^{\mu - \frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}z} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda, 2\mu + 1; z\right), \tag{2.49}$$

$$M_{\lambda, \mu}(z) = z^{-\mu - \frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}z} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - \mu - \lambda, -2\mu + 1; z\right), \tag{2.50}$$

et la relation suivante entre les fonctions de Whittaker (voir Ref. [29], p.1059, Eq. (9.220.4))

$$W_{\lambda, \mu}(z) = \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu - \lambda)} M_{\lambda, \mu}(z) + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu - \lambda)} M_{\lambda, -\mu}(z), \tag{2.51}$$

nous pouvons aussi exprimer (2.46) sous la forme

$$\begin{aligned}
\lim_{R \rightarrow \infty} G_l(r_f, r_i; \tilde{E}) &= G_l^c(r_f, r_i; \tilde{E}) \\
&= -\frac{1}{\omega} \frac{\Gamma\left(1 + l + i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}\right)}{\Gamma(2l + 2) r_f r_i} \\
&\quad \times M_{-i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}, l + \frac{1}{2}}\left(\frac{2iM\omega}{\hbar} r_i\right) W_{-i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}, l + \frac{1}{2}}\left(\frac{2iM\omega}{\hbar} r_f\right), \quad (2.52)
\end{aligned}$$

où

$$\omega = \sqrt{\frac{2E}{M}}. \quad (2.53)$$

### 2.4.1 Etats liés

Le spectre de l'énergie pour les états liés d'un atome hydrogénoïde dans un espace plat peut être obtenu en faisant tendre  $R$  vers l'infini dans l'expression (2.33) ou encore à partir des pôles de la fonction de Green radiale (2.52). Ces pôles sont ceux de la fonction  $\Gamma\left(1 + l + i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}\right)$  qu'on trouve lorsque son argument est un entier négatif ou nul, c'est à dire lorsque

$$1 + l + i\frac{Ze^2}{\hbar\omega} = -n_r; \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.54)$$

En tenant compte de (2.53), les valeurs propres de l'énergie sont alors données par

$$E_n = -\frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad (2.55)$$

où le nombre quantique principal prend les valeurs  $n = 1, 2, 3, \dots$ . En faisant tendre  $R$  vers l'infini, nous obtenons les fonctions d'onde radiales d'un atome hydrogénoïde dans l'espace plat standard à partir de (2.40) comme nous pouvons les déterminer également en exprimant la fonction de Green (2.52) sous la forme d'un développement spectral comme suit :

$$G_l^c(r_f, r_i; \tilde{E}) = i\hbar \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{R_{nl}^c(r_f) R_{nl}^c(r_i)}{E - E_n}. \quad (2.56)$$

Il s'ensuit que les fonctions d'onde radiales convenablement normalisées sont

$$\begin{aligned}
R_{nl}^c(r) &= \frac{1}{(2l+1)!} \left[ \frac{1}{an^2} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} M_{n,l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2}{an}r\right) \\
&= \frac{1}{(2l+1)!} \left[ \left(\frac{2}{an}\right)^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2r}{an}\right)^l \\
&\quad \times \exp\left[-\frac{r}{an}\right] {}_1F_1\left(1+l-n, 2l+2; \frac{2r}{an}\right). \tag{2.57}
\end{aligned}$$

## 2.4.2 Etats de diffusion

Pour évaluer la contribution du spectre continu à la fonction de Green, exprimons (2.52) sous la forme :

$$\begin{aligned}
G_l^c(r_f, r_i; \tilde{E}) &= \frac{i\hbar}{2\pi\Gamma(2l+2)r_f r_i} \oint_C \frac{dz}{E+i0-\frac{\hbar^2 z^2}{2M}} \Gamma\left(1+l+i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}\right) \\
&\quad \times M_{-i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}, l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2iM\omega}{\hbar}r_i\right) W_{-i\frac{Ze^2}{\hbar\omega}, l+\frac{1}{2}}\left(\frac{2iM\omega}{\hbar}r_f\right), \tag{2.58}
\end{aligned}$$

où  $C$  est le contour fermé

$$C : \begin{cases} z = k; & k \in [-\rho, \rho], \\ z = \rho e^{i\phi}; & \phi \in (\pi, 2\pi). \end{cases} \tag{2.59}$$

À la limite  $\rho \rightarrow \infty$ , en tenant compte du comportement asymptotique des fonctions de Whittaker (voir Ref. [29], p.1061, Eqs. (9.227) à (9.229)), il est facile de montrer que l'intégrale sur le demi-cercle est nulle. Nous obtenons donc

$$G_l^c(r_f, r_i; \tilde{E}) = \frac{i\hbar}{2\pi\Gamma(2l+2)r_f r_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{E+i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M}} \times \Gamma\left(1+l + \frac{i}{ak}\right) M_{-\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(2ikr_i) W_{-\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(2ikr_f). \quad (2.60)$$

En utilisant les formules suivantes (voir Ref. [29], p.1061, Eq. (9.231.2); p.1062, Eq. (9.233.2))

$$M_{\lambda, \mu}(z) = e^{-i\pi(\mu+\frac{1}{2})} M_{-\lambda, \mu}(-z); \quad (2\mu \neq -1, -2, -3, \dots), \quad (2.61)$$

et

$$M_{\lambda, \mu}(z) = \Gamma(2\mu+1) e^{i\pi\lambda} \left[ \frac{W_{-\lambda, \mu}(-z)}{\Gamma(\mu-\lambda+\frac{1}{2})} + e^{i\pi(\mu+\frac{1}{2})} \frac{W_{\lambda, \mu}(z)}{\Gamma(\mu+\lambda+\frac{1}{2})} \right], \quad (2.62)$$

valable pour  $\arg z \in ]-\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$ ;  $2\mu \neq -1, -2, -3, \dots$ , l'expression (2.60) devient

$$G_l^c(r_f, r_i; \tilde{E}) = \frac{iM}{2\pi\hbar\Gamma(2l+2)r_f r_i} \int_0^{+\infty} \frac{dE_k}{E+i0 - E_k} \left| \Gamma\left(1+l - \frac{i}{ak}\right) \right|^2 \times \frac{e^{\frac{\pi}{ak}}}{k} M_{\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(-2ikr_i) M_{-\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(2ikr_f), \quad (2.63)$$

avec le spectre d'énergie

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad (2.64)$$

et les fonctions d'onde radiales

$$\begin{aligned} R_{kl}^c(r) &= \left( \frac{M}{2\pi\hbar k} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\left| \Gamma\left(1+l - \frac{i}{ak}\right) \right| e^{\frac{\pi}{2ak}}}{\Gamma(2l+2)} \frac{1}{r} M_{\frac{i}{ak}, l+\frac{1}{2}}(2ikr) \\ &= \left( \frac{2Mk}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} i^{l+1} \frac{\left| \Gamma\left(1+l - \frac{i}{ak}\right) \right|}{\Gamma(2l+2)} e^{\frac{\pi}{2ak}} (kr)^{l+1} e^{-ikr} {}_1F_1\left(1+l + \frac{i}{ak}, 2l+2; 2ikr\right). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Ce résultat coincide avec celui obtenu par des considérations de prolongement analytique [31].

# Chapitre 3

## L'atome d'hydrogène dans un espace hyperbolique

### 3.1 Introduction

Le problème de l'atome d'hydrogène dans un espace hyperbolique, c'est à dire dans un espace de constante de courbure négative a été l'objet de nombreux travaux réalisées suivant des méthodes différentes. Mentionnons seulement les plus récents. Dans une approche basée sur l'intégrale de chemin de Feynman, Barut et ses collaborateurs [6] ont montré que l'intégrale de chemin radiale associée à ce problème se transforme en celle d'une particule libre en mouvement sur la variété du groupe dynamique  $SU(1, 1)$  afin de simplifier le calcul de la fonction de Green à partir de laquelle ils ont déterminé le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normalisées des états liés. Dans un autre travail très récent [22], ce problème a été analysé en utilisant la méthode de la supersymétrie en mécanique quantique, l'approche de l'invariance de forme et les équations différentielles pour obtenir le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états liés.

Dans ce chapitre, nous allons présenter un traitement plus complet de ce système à l'aide d'une autre variante de l'intégrale de chemin.

Dans le second paragraphe, nous montrons qu'en effectuant le lien entre l'intégrale

de chemin relatif au potentiel dans cet espace hyperbolique et celle associée au potentiel de Manning-Rosen par une simple transformation spatiale, il est possible de calculer la fonction de Green radiale sous forme compacte. Dans un troisième paragraphe, nous déduisons respectivement le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées des états liés à partir des pôles et des résidus de la fonction de Green. Dans le quatrième paragraphe, nous déterminons le spectre et les fonctions d'onde des états continus. Les états de l'atome d'hydrogène dans l'espace plat sont considérés comme un cas particulier dans le cinquième paragraphe.

## 3.2 Fonction de Green

L'espace hyperbolique à trois dimensions est un espace caractérisé par une constante de courbure négative  $K = -\frac{1}{R^2}$ . La forme quadratique de l'élément linéaire de cet espace est définie en coordonnées sphériques par :

$$ds^2 = \frac{dr^2}{1 + \frac{r^2}{R^2}} + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2), \quad (3.1)$$

avec  $0 < r < \infty$ ,  $0 \leq \theta < \pi$  et  $0 \leq \varphi < 2\pi$ . En introduisant la variable indépendante  $\chi$  liée à  $r$  par la relation

$$\sinh \chi = \frac{r}{R}; \quad \chi \in [0, \infty[, \quad (3.2)$$

l'élément linéaire peut se mettre sous la forme :

$$ds^2 = R^2 d\chi + R^2 \sinh^2 \chi (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (3.3)$$

Dans ce nouveau système de coordonnées, le tenseur métrique s'écrit

$$(g_{ab}) = \begin{pmatrix} R^2 & 0 & 0 \\ 0 & R^2 \sinh^2 \chi & 0 \\ 0 & 0 & R^2 \sinh^2 \chi \sin^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Son déterminant vaut

$$g = R^6 \sinh^4 \chi \sin^2 \theta. \quad (3.5)$$

Le potentiel de Coulomb dans cet espace [6] étant donné par :

$$V(\chi) = -\frac{Ze^2}{R}(\coth \chi - 1), \quad (3.6)$$

et l'Hamiltonien quantique du système s'écrit alors

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + V(\chi), \quad (3.7)$$

où dans ce cas, l'opérateur de Laplace -Beltrami défini par (1.8) s'écrit

$$\Delta_{LB} = \frac{1}{R^2 \sinh^2 \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} \sinh^2 \chi \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{1}{R^2 \sinh^2 \chi \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{R^2 \sinh^2 \chi \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.8)$$

Pour construire le propagateur associé à l'atome d'hydrogène dans l'espace hyperbolique en question, la fonction  $h(r)$  vaut dans ce cas :

$$h(r) = \sqrt{1 + \frac{r^2}{R^2}}, \quad (3.9)$$

et la correction quantique définie par l'équation (1.30) est égale à

$$\Delta V(r_j) = \frac{3\hbar^2}{4MR^2} - \frac{3\hbar^2 r_j^2}{8MR^2 h(r_j)}. \quad (3.10)$$

Par conséquent le propagateur radial (1.58) s'écrit

$$\begin{aligned}
K_l(r_f, r_i; T) &= \frac{1}{r_f r_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int \frac{dr_j}{\sqrt{1 + \frac{r_j^2}{R^2}}} \right) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{M}{2\varepsilon \sqrt{\left(1 + \frac{r_j^2}{R^2}\right) \left(1 + \frac{r_{j-1}^2}{R^2}\right)}} (\Delta r_j)^2 - \frac{3\hbar^2\varepsilon}{4MR^2} \right. \right. \\
&\left. \left. - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr_j r_{j-1}} + \frac{3\hbar^2 r_j^2}{8MR^2 \left(1 + \frac{r_j^2}{R^2}\right)} - \varepsilon V(r_j) \right] \right\}. \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Pour simplifier cette expression, nous allons introduire la variable  $\chi$  définie par la relation (3.2). En reportant cette variable dans l'équation (3.10), celle-ci s'écrit

$$\begin{aligned}
K_l(r_f, r_i; T) &= \frac{1}{R^3 \sinh \chi_f \sinh \chi_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d\chi_j \right) \\
&\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N A(j, j-1) \right\}, \tag{3.12}
\end{aligned}$$

avec l'action élémentaire

$$\begin{aligned}
A(j, j-1) &= \frac{MR^2}{2\varepsilon} \left[ (\Delta\chi_j)^2 + \frac{1}{4} \left( \tanh^2 \tilde{\chi}_j - \frac{2}{3} \right) (\Delta\chi_j)^4 \right] - \frac{3\hbar^2\varepsilon}{4MR^2} \\
&- \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2M \sinh^2 \tilde{\chi}_j} + \frac{3\varepsilon\hbar^2}{8MR^2} \tanh^2 \tilde{\chi}_j + \varepsilon \frac{Ze^2}{R} (\coth \chi_j - 1). \tag{3.13}
\end{aligned}$$

Notons que le terme en  $(\Delta\chi_j)^4$  a une contribution significative à l'intégrale de chemin. Il peut être évalué en utilisant la formule (2.15). Ceci conduit à

$$\begin{aligned}
K_l(r_f, r_i; T) &= \frac{1}{R^3 \sinh \chi_f \sinh \chi_i} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{2i\pi\hbar\varepsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left( \int d\chi_j \right) \\
&\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{MR^2}{2\varepsilon} (\Delta\chi_j)^2 - \frac{\hbar^2\varepsilon}{2MR^2} \right. \right. \\
&\left. \left. + \varepsilon \frac{Ze^2}{R} (\coth \chi_j - 1) - \varepsilon \frac{l(l+1)\hbar^2}{2M \sinh^2 \tilde{\chi}_j} \right] \right\} \quad (3.14)
\end{aligned}$$

L'intégration des chemins de (3.14) ne peut pas être directement effectuée, mais on peut aisément calculer sa transformée de Fourier, c'est à dire la fonction de Green

$$\begin{aligned}
G_l(r_f, r_i; E) &= \int_0^\infty dT \exp \left( \frac{i}{\hbar} ET \right) K_l(r_f, r_i; T) \\
&= \frac{1}{R^3 \sinh \chi_f \sinh \chi_i} \int_0^\infty dT \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( E - \frac{\hbar^2}{2MR^2} - \frac{Ze^2}{R} \right) T \right] \\
&\times K_{MR}(\chi_f, \chi_i; T), \quad (3.15)
\end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
K_{MR}(\chi_f, \chi_i; T) &= \int \mathcal{D}\chi(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \left[ \frac{MR^2}{2\varepsilon} \dot{\chi}^2 - \frac{\hbar^2}{2MR^2} + \frac{Ze^2}{R} \coth \chi \right. \right. \\
&\left. \left. - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2M \sinh^2 \chi} \right] dt \right\} \quad (3.16)
\end{aligned}$$

est le propagateur associé au potentiel de Manning-Rosen [30] analysé par plusieurs auteurs dans le cadre de l'intégrale de chemin [25, 26] et par conséquent la fonction de Green pour ce potentiel hyperbolique peut être donnée sous une forme compacte comme

il a été rapporté dans la littérature [25]

$$\begin{aligned}
G_{MR}(\chi_f, \chi_i; \tilde{E}) &= \int_0^\infty dT \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E} T\right) K_{MR}(\chi_f, \chi_i; T) \\
&= \frac{MR^2}{i\hbar} \frac{\Gamma(M_1 - L_E) \Gamma(L_E + M_1 + 1)}{\Gamma(M_1 - M_2 + 1) \Gamma(M_1 + M_2 + 1)} \\
&\quad \times \left( \frac{2}{1 + \coth \chi_i} \frac{2}{1 + \coth \chi_f} \right)^{\frac{M_1 + M_2 + 1}{2}} \\
&\quad \times \left( \frac{\coth \chi_i - 1}{\coth \chi_i + 1} \frac{\coth \chi_f - 1}{\coth \chi_f + 1} \right)^{\frac{M_1 - M_2}{2}} \\
&\quad \times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 - M_2 + 1; \frac{\coth \chi_{>} - 1}{\coth \chi_{>} + 1}\right) \\
&\quad \times {}_2F_1\left(M_1 - L_E, L_E + M_1 + 1, M_1 + M_2 + 1; \frac{2}{1 + \coth \chi_{<}}\right), \tag{3.17}
\end{aligned}$$

où  ${}_2F_1(a, b, c; z)$  représente une fonction hypergéométrique. Les symboles  $\chi_{>}$  et  $\chi_{<}$  dénotent le  $\max(\chi_f, \chi_i)$  et le  $\min(\chi_f, \chi_i)$  respectivement. Ici, nous avons utilisé également les abbréviations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_E = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\hbar} \sqrt{2MR^2 \left( \frac{Ze^2}{R} - \tilde{E} \right)}, \\ M_{1,2} = \frac{1}{2} + l \pm \frac{1}{2\hbar} \sqrt{-2MR^2 \left( \frac{Ze^2}{R} + \tilde{E} \right)}, \\ \tilde{E} = E - \frac{\hbar^2}{2MR^2} - \frac{Ze^2}{R}. \end{array} \right. \tag{3.18}$$

### 3.3 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états liés

Le spectre de l'énergie des états liés peut être obtenu à partir des pôles de la fonction de Green (3.17). Ces pôles sont ceux de la fonction gamma  $\Gamma(M_1 - L_E)$  que nous trouvons lorsque son argument est un nombre entier négatif ou nul, c'est à dire lorsque

$$M_1 - L_E = -n_r, \quad (n_r = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (3.19)$$

En remplaçant les paramètres  $M_1, L_E$  et  $\tilde{E}$  par leurs valeurs (voir équations (3.18)), les niveaux d'énergie sont déterminés par l'équation

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2MR^2} (n^2 - 1) + \frac{Ze^2}{R} - \frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}, \quad (3.20)$$

où  $n = n_r + l + 1$ , ( $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ ) est le nombre quantique principal. Pour trouver les fonctions d'onde normalisées correspondantes aux niveaux d'énergie (3.20), nous effectuons l'approximation de la fonction  $\Gamma(M_1 - L_E)$  au voisinage des pôles (3.19) ainsi :

$$\begin{aligned} \Gamma(M_1 - L_E) &\approx \frac{(-1)^{n_r}}{n_r!} \frac{1}{M_1 - L_E + n_r} \\ &= \frac{(-1)^{n_r+1}}{n_r!} \frac{\hbar^2}{nMR^2} \frac{(n^2 - \varepsilon_n^2)}{(E - E_n)}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

où nous avons posé

$$\varepsilon_n = \frac{MRZe^2}{\hbar^2n}. \quad (3.22)$$

En tenant compte du comportement (3.21) et en utilisant la formule de transformation de Gauss (2.35) nous remarquons que le second terme dans (2.35) est nul du fait que la fonction Gamma  $\Gamma(a)$  est infinie ( $a = M_1 - L_E = -n_r \leq 0$ ). Ceci nous permet d'écrire la contribution des états liés à la fonction de Green radiale sous la forme d'un développement spectral comme suit :

$$G_l(r_f, r_i, E) = i\hbar \sum_{n=l+1}^{n_{\max}} \frac{R_{nl}(r_f) R_{nl}(r_i)}{E - E_n}, \quad (3.23)$$

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

$$\begin{aligned}
R_{nl}(r) &= \frac{2^{l+1}}{(2l+1)!} \left[ \frac{(\varepsilon_n^2 - n^2) \Gamma(1+l+\varepsilon_n) \Gamma(1+l+n)}{R^3 n \Gamma(\varepsilon_n - l) \Gamma(n-l)} \right]^{\frac{1}{2}} \sinh^l \chi \\
&\times \exp[-\chi(1+l+\varepsilon_n-n)] {}_2F_1(1+l-n, 1+l+\varepsilon_n, 2l+2; 1 - e^{-2\chi}).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Il est clair que la fonction d'onde (3.24) remplit la condition à la limite

$$\lim_{\chi \rightarrow \infty} R_{nl}(r) = 0, \tag{3.25}$$

lorsque

$$n - \varepsilon_n < 1. \tag{3.26}$$

Donc, le nombre de niveaux discrets est égal au plus grand nombre entier satisfaisant à l'inégalité

$$n_r < \sqrt{\frac{1}{2\Lambda} + \frac{1}{4}} - l - \frac{1}{2}; \quad \Lambda = \frac{\hbar^2}{2MRZe^2}. \tag{3.27}$$

### 3.4 Spectre d'énergie et fonctions d'onde des états de diffusion

Pour les valeurs de  $n_r$  supérieures à  $n_{r \max} = \left\{ \sqrt{\frac{1}{2\Lambda} + \frac{1}{4}} - l - \frac{1}{2} \right\}$ , il est évident que le spectre de l'énergie devient continu et contribue dans l'expression de la fonction de Green (voir figure 2). Pour évaluer cette contribution de la partie continue à la fonction de Green, nous pouvons exprimer (3.17) sous la forme

$$\begin{aligned}
G_l(r_f, r_i; E) &= -\frac{\hbar}{2\pi R \sinh \chi_f \sinh \chi_i} \frac{1}{\oint_C} \frac{z dz}{\widehat{E} + i0 - \frac{\hbar^2 z^2}{2M}} \\
&\times \frac{\Gamma(\overline{M}_1 - \overline{L}_E) \Gamma(\overline{L}_E + \overline{M}_1 + 1)}{\Gamma(\overline{M}_1 + \overline{M}_2 + 1) \Gamma(\overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{2}{1 + \coth \chi_i} \frac{2}{1 + \coth \chi_f} \right)^{\frac{\overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1}{2}} \left( \frac{\coth \chi_i - 1}{\coth \chi_i + 1} \frac{\coth \chi_f - 1}{\coth \chi_f + 1} \right)^{\frac{\overline{M}_1 - \overline{M}_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( \overline{M}_1 - \overline{L}_E, \overline{L}_E + \overline{M}_1 + 1, \overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1; \frac{\coth \chi_{>} - 1}{\coth \chi_{>} + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( \overline{M}_1 - \overline{L}_E, \overline{L}_E + \overline{M}_1 + 1, \overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1; \frac{2}{\coth \chi_{<} + 1} \right), \tag{3.28}
\end{aligned}$$

où le contour  $C$  est un demi cercle de rayon  $\rho$  dans le demi-plan inférieur. En tenant compte du comportement asymptotique des fonctions hypergéométriques, nous obtenons

$$\begin{aligned}
G_l(r_f, r_i; E) &= -\frac{\hbar}{2\pi R \sinh \chi_f \sinh \chi_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k dk}{\widehat{E} + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M}} \\
&\times \frac{\Gamma(\overline{M}_1 - \overline{L}_E) \Gamma(\overline{L}_E + \overline{M}_1 + 1)}{\Gamma(\overline{M}_1 + \overline{M}_2 + 1) \Gamma(\overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1)} \\
&\times \left( \frac{2}{1 + \coth \chi_i} \frac{2}{1 + \coth \chi_f} \right)^{\frac{\overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1}{2}} \left( \frac{\coth \chi_i - 1}{\coth \chi_i + 1} \frac{\coth \chi_f - 1}{\coth \chi_f + 1} \right)^{\frac{\overline{M}_1 - \overline{M}_2}{2}} \\
&\times {}_2F_1 \left( \overline{M}_1 - \overline{L}_E, \overline{L}_E + \overline{M}_1 + 1, \overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1; \frac{\coth \chi_{>} - 1}{\coth \chi_{>} + 1} \right) \\
&\times {}_2F_1 \left( \overline{M}_1 - \overline{L}_E, \overline{L}_E + \overline{M}_1 + 1, \overline{M}_1 - \overline{M}_2 + 1; \frac{2}{\coth \chi_{<} + 1} \right), \tag{3.29}
\end{aligned}$$

où

$$\left\{ \begin{array}{l} \widehat{E} = E - \frac{\hbar^2}{2MR^2} - \frac{Ze^2}{R}, \\ \overline{M}_1 = \frac{1}{2} + l + i\frac{kR}{2} \sqrt{1 + \frac{2MZe^2}{\hbar^2 k^2 R}}, \\ \overline{M}_2 = \frac{1}{2} + l - i\frac{kR}{2} \sqrt{1 + \frac{2MZe^2}{\hbar^2 k^2 R}}, \\ \overline{L}_E = -\frac{1}{2} + i\frac{kR}{2} \sqrt{1 - \frac{2MZe^2}{\hbar^2 k^2 R}}. \end{array} \right. \quad (3.30)$$

Nous pouvons réécrire (3.30) sous la forme :

$$\begin{aligned} G_l(r_f, r_i; E) &= -\frac{\hbar}{2\pi R} \frac{1}{\sinh \chi_f \sinh \chi_i} \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{kdk}{\widehat{E} + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M}} (z_i z_f)^{l+1} \\ &\times \left\{ \frac{\Gamma(1+l+i\lambda_-) \Gamma(1+l+i\lambda_+)}{\Gamma(1+i\mu)} [(1-z_i)(1-z_f)]^{\frac{i\mu}{2}} \right. \\ &\times {}_2F_1(1+l+i\lambda_-, 1+l+i\lambda_+, 1+i\mu; 1-z_>) \\ &\times {}_2F_1(1+l+i\lambda_-, 1+l+i\lambda_+, 2l+2; z_<) \\ &- \frac{\Gamma(1+l-i\lambda_-) \Gamma(1+l-i\lambda_+)}{\Gamma(1-i\mu)} [(1-z_i)(1-z_f)]^{-\frac{i\mu}{2}} \\ &\times {}_2F_1(1+l-i\lambda_-, 1+l-i\lambda_+, 1-i\mu; 1-z_>) \\ &\left. \times {}_2F_1(1+l-i\lambda_-, 1+l-i\lambda_+, 2l+2; z_<) \right\}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

avec

$$\lambda_{\pm} = \frac{kR}{2} \left[ \sqrt{1 + \frac{2MZe^2}{\hbar^2 k^2}} \pm \sqrt{1 - \frac{2MZe^2}{\hbar^2 k^2}} \right]; \quad \mu = kR \sqrt{1 + \frac{2MZe^2}{\hbar^2 k^2}} \quad (3.32)$$

et  $z = 2/(1 + \coth \chi)$ .

Compte tenu de l'identité [26]

$$\begin{aligned} & z^{\frac{1}{2}+l} (1-z)^{-i\frac{\mu}{2}} {}_2F_1(1+l-i\lambda_-, 1+l-i\lambda_+, 2l+2; z) \\ & \equiv z^{-\frac{1}{2}+l} (1-z)^{+i\frac{\mu}{2}} {}_2F_1(1+l+i\lambda_-, 1+l+i\lambda_+, 2l+2; z), \end{aligned} \quad (3.33)$$

nous pouvons factoriser l'expression (3.31) comme suit :

$$\begin{aligned}
G_l(r_f, r_i; E) &= \frac{i\hbar}{2\pi R} \frac{1}{\sinh \chi_f \sinh \chi_i} \frac{1}{\Gamma(2l+2)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{kdk}{\widehat{E} + i0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2M}} \\
&\times (z_f z_i)^{l+1} (1-z_i)^{-i\frac{\mu}{2}} (1-z'')^{i\frac{\mu}{2}} \\
&\times {}_2F_1(1+l-i\lambda_-, 1+l-i\lambda_+, 2l+2; z_<) \\
&\times \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\Gamma(1+l+i\lambda_-) \Gamma(1+l+i\lambda_+)}{\Gamma(i\mu)} \right. \\
&\times {}_2F_1(1+l+i\lambda_-, 1+l+i\lambda_+, 1+i\mu; 1-z_>) \\
&+ \frac{\Gamma(1+l-i\lambda_-) \Gamma(1+l-i\lambda_+)}{\Gamma(-i\mu)} (1-z_>)^{-i\mu} \\
&\left. \times {}_2F_1(1+l-i\lambda_-, 1+l-i\lambda_+, 1-i\mu; 1-z_>) \right]. \quad (3.34)
\end{aligned}$$

En utilisant la formule de transformation de Gauss (2.35) et en posant

$$a = 1 + l + i\lambda_-, \quad b = 1 + l + i\lambda_+, \quad c = 2l + 2, \quad (3.35)$$

l'expression entre crochets dans (??) se simplifie en

$$\left| \frac{\Gamma(1+l+i\lambda_-) \Gamma(1+l+i\lambda_+)}{\Gamma(i\mu)} \right|^2 \frac{1}{\Gamma(2l+2)} {}_2F_1(1+l+i\lambda_-, 1+l+i\lambda_+, 2l+2; z_>) \quad (3.36)$$

et par conséquent les fonctions d'onde correctement normalisées sont

$$\begin{aligned}
R_{kl}(r) &= \frac{2^{l+1}}{\sqrt{2\pi R\mu}} \left| \frac{\Gamma(1+l+i\lambda_-) \Gamma(1+l+i\lambda_+)}{\Gamma(i\mu)} \right| \frac{1}{\Gamma(2l+2)} e^{\chi(1+l-i\mu)} \\
&\times \sinh^l \chi {}_2F_1(1+l+i\lambda_-, 1+l+i\lambda_+, 2l+2; 1-e^{-2\alpha\chi}), \quad (3.37)
\end{aligned}$$

avec

$$E_{kl} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \frac{\hbar^2}{2MR^2} + \frac{Ze^2}{R}. \quad (3.38)$$

### 3.5 Atome d'hydrogène dans l'espace plat

L'espace plat est caractérisé par une constante de courbure nulle, c'est à dire  $R \rightarrow \infty$ , il est évident que le spectre d'énergie se réduit d'après l'équation (3.21) à

$$E_n = -\frac{Ze^2}{2an^2} \quad (3.39)$$

où  $a = \frac{\hbar^2}{MZe^2}$  est le rayon de Bohr.

Dans ce cas,  $\varepsilon_n = \frac{R}{an} \rightarrow \infty$ . En utilisant la formule (2.45) et en tenant compte des limites

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \exp[-\chi(1+l+\varepsilon_n-n)] = \exp\left(\frac{-r}{an}\right), \quad (3.40)$$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \sinh^l \chi \left[ \frac{(\varepsilon_n^2 - n^2) \Gamma(1+l+\varepsilon_n)}{R^3 n \Gamma(\varepsilon_n - l)} \right]^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{r}{an}\right)^l \left[ \frac{1}{a^3 n^4} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.41)$$

il est possible de montrer que les fonctions d'onde (3.26) deviennent celles de l'atome d'hydrogène dans l'espace plat :

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= \left[ \left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{2r}{na}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{an}\right) \\ &\times {}_1F_1\left(1+l-n, 2l+2; \frac{2r}{an}\right). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Les fonctions d'onde des états continus de l'atome d'hydrogène s'obtiennent de la même manière que dans le chapitre précédent et valent

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &= \left(\frac{2Mk}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} i^{l+1} \frac{|\Gamma(1+l-\frac{i}{ak})|}{\Gamma(2l+2)} e^{\frac{\pi}{2ak}} \\ &\times (2kr)^{l+1} e^{-ikr} {}_1F_1\left(1+l+\frac{i}{ak}, 2l+2; 2ikr\right), \end{aligned} \quad (3.43)$$

avec  $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$ .

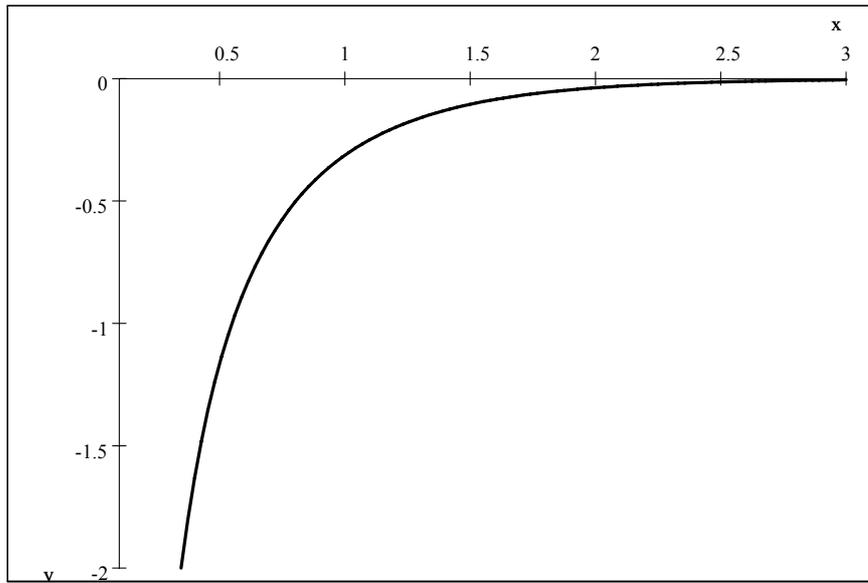


Figure 2 : allure du potentiel  $\frac{R}{Ze^2}V(x)$ .

# Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons repris l'étude du problème d'un atome hydrogénoïde dans deux espaces courbes par la méthode des intégrales de chemin de Feynman adaptée à ce type d'espaces.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté un formalisme simplifié de l'intégrale de chemin dans un espace courbe de dimensions arbitraires en considérant un système de coordonnées généralisées. Un aperçu est donné sur les différentes formulations décrites dans la littérature. Le formalisme est appliqué ensuite au problème d'un système physique commandé par un potentiel central quelconque dans un espace courbe à trois dimensions. Nous avons montré que la partie du propagateur qui dépend des variables angulaires est séparable de la partie radiale.

Le deuxième et le troisième chapitres sont consacrés à l'application du formalisme basé sur la définition de la forme produit de l'action au problème de Kepler dans cet espace. Nous avons d'abord traité le cas d'un atome hydrogénoïde dans un espace courbe sphérique en convertissant l'intégrale de chemin radiale en une intégrale de chemin associée au potentiel de Pöschl-Teller modifié. La fonction de Green radiale est construite sous forme compacte. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées des états liés sont extraits respectivement des pôles et des résidus de la fonction de Green. Il faut souligner que le potentiel de Coulomb dans un espace courbe sphérique est caractérisé par l'absence d'états continus.

Ensuite, nous avons présenté une étude complète du même système physique dans un espace hyperbolique. De l'expression sous forme compacte de la fonction de Green radiale,

nous avons déterminé les spectres d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes aux états liés et de diffusion.

Pour terminer, il faut mentionner que dans le cas de l'espace plat, c'est à dire quand  $R \rightarrow \infty$ , nous avons pu trouver les résultats standard relatifs à un atome hydrogénoïde. De la forme compacte de la fonction de Green radiale obtenue en faisant tendre  $R$  vers l'infini, les spectres d'énergie et les fonctions d'onde des états liés et aussi bien des états de diffusion sont complètement retrouvés.

# Bibliographie

- [1] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.49
- [2] W. Heisenberg, Zeitsch. f. Phys. **33** (1925) 879.
- [3] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79** (1925) 361 et 489; **80** (1926) 437; **81** (1926) 109.
- [4] B. S. DeWitt, Rev. Mod. Phys. **29** (1957) 377.
- [5] A. O. Barut, A. Inomata et G. Junker, J. Phys. A : Math. Gen. **20** (1987) 6271.
- [6] A. O. Barut, A. Inomata et G. Junker, J. Phys. A : Math. Gen. **23** (1990) 1179.
- [7] V. Bargmann, Ann. Math. **48** (1947) 568.
- [8] G. Junker et M. Bohm, Phys. Lett. **A 117** (1986) 375.
- [9] R. P. Feynman et A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integral* (Mc Graw Hill, New York, 1965).
- [10] M. Mizrahi, J. Math. Phys. **16** (1975) 2201.
- [11] T. D. Lee, *Particle Physics and Introduction to Field Theory* ( Academic Press, Harwood, 1981).
- [12] M. Omote, Nucl. Phys. **B 120** (1977) 325.
- [13] C. Grosche, Phys. Lett. **A 128** (1988) 113.
- [14] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (J. Wiley and Sons, New York, 1981).
- [15] C. Grosche et F. Steiner, Ann. Phys. (N. Y) **182** (1988) 120.
- [16] D. W. Mc Laughlin et L. S. Schulman, J. Math. Phys. **12** (1971) 2520.

- [17] A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions* (Mc Graw-Hill, New York, 1953) Vol. 2.
- [18] F. Constantinescu et E. Magyari, *Problems in Quantum Mechanics* (Pergamon Press, Oxford, 1978).
- [19] A. F. Stevenson, Phys. Rev. **59** (1941) 842.
- [20] A. O. Barut et R. Wilson, Phys. Lett. **110A** (1985) 353.
- [21] M. Thaik et A. Inomata , J. Phys. **A** : Math. Gen. **38** (2005) 1767.
- [22] H. Moulla, Mémoire de Magister, Univ. Constantine 1, 2012.
- [23] G. Gamow, Z. Phys. **51** (1928) 204.
- [24] R. W. Gurney et E. U. Condon, Phys. Rev. **33** (1929) 127.
- [25] C. Grosche, J. Phys. **A** : Math. Gen. **38** (2005) 2947.
- [26] H. Kleinert et I. Mustapic, J. Math. Phys. **33** (1992) 643.
- [27] M. Bohm et G. Junker, J. Math. Phys. 28 (1987)1978.
- [28] C. Grosche, Nuovo Cimento **B 108** (1993) 1365.
- [29] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).
- [30] M. F. Manning et N. Rosen, Phys. Rev. **44** (1933) 953.
- [31] L. D. Landau et E. M. Lifchitz, *Quantum mechanics* (Pergamon, Oxford, 1958).
- [32] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics Polymer Physics and Financial Markets* (fourth ed., World Scientific, Singapore, 2006).

## ملخص

إن هذا العمل يتطرق إلى مناقشة شاملة لمشكلة ذرة Hydrogénoïde في الفضاء المنحني في إطار نظرية تكامل مسالك Feynman .

حيث توجد هناك نوعين من الفضاءات المنحنية الأولى هو الفضاء المنحني الكروي أما الثانية عبارة عن مساحة القطعة الزائدة . ففي كل حالة من دالة Green الشعاعية نجدها شيدت في شكل مدمج للحصول على طيف الطاقة ودوال الموجة . ففي الحالة الكروية توجد حالات مرتبطة و في حالة القطع الزائدة

بالإضافة إلى الحالات المرتبطة توجد حالات تتأثر بامتداد طيف الطاقة المستمرة  $\left( \frac{\mathbf{h}^2}{2MR^2} + \frac{Ze^2}{R} \right)$  إلى

ملا نهاية . ففي حدود الفضاء المستوي طيف الطاقة و دوال الموجة لذرة Hydrogène ( $Z = 1$ ) قد تم ضبطها .

مفاتيح الكلمات: تكامل المسار، دالة Green، كمول Coulomb، كمول Pöschl-Teller المعدل، طيف الطاقة، دوال الموجة .

Title

"Study of the hydrogen atom in a curved space by the path integral»

**Extended Abstract:**

This thesis provides a comprehensive discussion of the problem of a hydrogenic system in a curve, approaching the Feynman path integral space.

Two types of curved spaces are considered. The first is a spherical space curve, is a curve characterized by a space of positive curvature constant and the second space is a hyperbolic curve which is a continuous space with negative curvature.

The propagator for a particle in a symmetrical potential in three-dimensional space having a general metric tensor defined in polar coordinates on the basis of developed spherical harmonics using the formulation based on the definition of the product form  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$ . The calculation depends on the radial propagator specification of the function  $f(r)$  which depends on the metric.

In both cases (spherical and hyperbolic curve space), the radial Green function is built in a compact form. The spectrum energy and the wave functions properly standardized are respectively extracted by the poles and residues of the Green's function radial. In the case of movement in spherical curve space, the particle has only bound states and that of hyperbolic space curve, there are also scattering states with continuous energy spectrum extends from  $(\hbar^2 / (2MR^2)) + ((Ze^2) / R)$  to infinity. In the limit of flat space, is when  $R$  tends to infinity, the spectrum energy and wave functions of the hydrogen atom ( $Z = 1$ ) are exactly recovered. In particular, the problem of the missing factor in the expression of the wave function of continuous states in flat space is clarified.

Keywords :

Path integrals, Green's function, Coulomb potential, Pöschl-Teller potential change, spectrum energy, bound states, scattering states.

## Résumé:

Ce mémoire concerne une discussion complète du problème d'un système hydrogénoïde dans un espace courbe par l'approche de l'intégrale de chemin de Feynman.

Deux types d'espaces courbes sont considérés. Le premier étant un espace courbe sphérique, c'est à dire un espace courbe caractérisé par une constante de courbure positive et le second est un espace hyperbolique qui est un espace courbe avec une constante de courbure négative.

Le propagateur pour une particule dans un potentiel à symétrie dans un espace à trois dimensions muni d'un tenseur métrique général défini en coordonnées polaires est développé sur la base des harmoniques sphériques en utilisant la formulation basée sur la définition de la "forme produit". Le calcul du propagateur radial dépend de la spécification de la fonction  $f(r)$  dont dépend la métrique.

Dans les deux cas (espace courbe sphérique et espace hyperbolique), la fonction de Green radiale est construite sous forme compacte. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde convenablement normalisées sont extraits respectivement des pôles et des résidus de la fonction de Green radiale. Dans le cas du mouvement dans l'espace courbe sphérique, la particule possède uniquement des états liés et dans celui de l'espace courbe hyperbolique en plus des états liés, il y a des états de diffusion dont le spectre continu d'énergie s'étend de  $((\hbar^2)/(2MR^2)) + ((Ze^2)/R)$  à l'infini. A la limite de l'espace plat, c'est à dire lorsque  $R$  tend vers l'infini, le spectre d'énergie et les fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène ( $Z=1$ ) sont exactement retrouvés. En particulier, le problème du facteur manquant dans l'expression de la fonction d'onde des états continus dans l'espace plat est clarifié.

## Mots clés:

Intégrales de chemin, fonction de Green, potentiel de Coulomb, potentiel de Pöschl-Teller modifié, spectre d'énergie, états liés, états de diffusion.