

République Algérienne Démocratique et Populaire.
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique.

Université De Blida.

Institut des Sciences Exactes.

Département de Physique.

THESE

Présentée

A L'université de BLIDA



Pour l'obtention du grade

DOCTEUR D'ETAT Es-SCIENCES

Option: Physique Théorique

Par

Mustapha BENTAIBA

*Les Intégrales Fonctionnelles de Feynman et leurs
Applications .*

SOUTENUE LE 29/04/1997 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M'.H.BOUABDELAH, Professeur à l'U.S.T.H.B.

Président.

M'.D.E.MEDJADI, Professeur à l'E.N.S. Kouba

Examineur.

M'.Th.F.HAMMANN, Professeur à l'U.H.A, Mulhouse(France)

Examineur.

M'.A.CHOUCHAOUI, Docteur es-Sciences (l'U.S.T.H.B.)

Examineur.

M'.L.CHETOUANI, Professeur à l'U.de Constantine.

Rapporteur.

BLIDA (ALGERIE) 1997.

32 - 530 - 552 - 1

République Algérienne Démocratique et
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche



32-530-552-1

Université De Blida.

Institut des Sciences Exactes.

Département de Physique.

THESE

Présentée

A L'université de BLIDA

Pour l'obtention du grade

DOCTEUR D'ETAT Es-SCIENCES

Option: Physique Théorique

Par

Mustapha BENTAIBA

*Les Intégrales Fonctionnelles de Feynman et leurs
Applications .*

SOUTENUE LE 29/04/1997 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M.H.BOUABDALLAH, Professeur à l'U.S.T.H.B.

Président.

M.D.E.MEDJADI, Professeur à l'E.N.S. Kouba

Examineur.

M.Th.F.HAMMANN, Professeur à l'U.H.A, Mulhouse(France)

Examineur.

M.A.CHOUCHAOUI, Docteur es-Sciences (l'U.S.T.H.B.)

Examineur.

M.L.CHETOUANI, Professeur à l'U.de Constantine.

Rapporteur.

BLIDA (ALGERIE) 1997.

A mes parents ,

A ma femme ,

à mes enfants .

Remerciements

J'exprime toute ma reconnaissance à monsieur L. CHEYOLAN, professeur à l'Université de Constantine, (Département de Physique Théorique, Institut de Physique), qui m'a suggéré ce travail et m'a constamment guidé au cours de sa réalisation par ses conseils, ses critiques et ses remarques. Il a dirigé mon travail avec compétence et efficacité.

Je remercie également monsieur T. F. HAMMAN, professeur à l'Université de Haute Alsace, (Laboratoire de Mathématiques, Physique Mathématique et Informatique, Faculté des Sciences et Techniques, Mulhouse - France -), pour m'avoir accueilli dans son laboratoire dans une grande chaleur humaine, pour ses encouragements ses commentaires constructifs et d'avoir accepté de faire partie du jury de cette thèse.

Je tiens aussi à remercier monsieur H. BOUABDELLAH, professeur à l'U.S.T.H.B., d'avoir accepté d'assumer la présidence du jury, messieurs D. E. MEDJADI, professeur à l'E.N.S. Kouba (Alger), A. CHOUCHAOU, Docteur es Sciences à l'U.S.T.H.B., d'avoir bien voulu accepter de participer au jury de cette thèse.

Je ne saurais oublier ma famille, mes collègues et mes amis, qui n'ont à aucun moment ménagé leur aide. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma sincère gratitude.



<i>Table des Matières.</i>

	<i>Page</i>
Introduction	1
 Chapitre 1:	
1.1. L'intégrale de chemin.	6
1.1.1 Formulation mathématique.....	6
1.1.1.1 Introduction.....	6
1.1.1.2 Le propagateur.....	6
1.2 L'intégrale de chemin dans l'espace des phases.....	8
1.2.1 Introduction.....	8
1.2.2 L'intégrale de chemin.....	12
 Chapitre 2:	
2.1 La supersymétrie de la mécanique quantique.....	12
2.1.1 Introduction.....	12
2.1.2 Formulation mathématique.....	12
2.2 Approche variationnelle de la mécanique quantique statistique.....	18
2.2.1 Introduction.....	18
2.2.2 Approche variationnelle de Feynman.....	18
2.2.2.1 Expression de l'intégrale de chemin de la mécanique statistique.....	18
2.2.2.2. Approche variationnelle.....	20
2.3 L'approximation Feynman-Kleinert et les corrections systématiques.....	22
2.3.1 Introduction.....	22
2.3.2 Fonction de partition effective classique.....	22
2.3.3 La fonction de partition d'essai de Feynman-Kleinert.....	35

Résumé: Une nouvelle formulation de la mécanique quantique basée sur les intégrales fonctionnelles de parcours ou « Path-Integral » est présentée. Bien qu'équivalente aux formulations de **Schrödinger** et **Heisenberg**, elle est basée sur une méthode géométrique pour exprimer le principe de superposition quantique. Elle est particulièrement intéressante puisqu'elle permet une formulation lagrangienne de la mécanique quantique et se prête aisément à une généralisation relativiste.

Malgré le progrès considérable, grâce à l'introduction du paramètre temps et de la reparamétrisation des chemins pour le calcul analytique exact du propagateur via l'approche Path-Integral, plusieurs intégrales de chemins ne sont pas encore résolues exactement. En particuliers les intégrales de chemins relatives aux nouveaux potentiels que nous avons trouvé à l'aide de la supersymétrie de la mécanique quantique. Nous faisons appel donc, à une méthode d'approximation variationnelle convergente pour le calcul des intégrales de chemins à des températures finies introduite par Feynman et Kleinert(F-K).

Dans un premier article [Bentaiba and Al, Z.Naturforsch 47a (1992) 1013], nous traitons numériquement via la méthode (F.K) une classe de potentiels de l'oscillateur harmonique que nous obtenons par la méthode de factorisation de la supersymétrie de la mécanique quantique.

Dans un second article [Bentaiba and Al, Phys.Lett.A189 (1994) 433], nous appliquons à la classe de potentiels de Morse généralisée par la supersymétrie de la mécanique quantique, la méthode (F.K) et les corrections systématiques introduites récemment par Kleinert.

Nous étudions analytiquement dans un troisième article [Bentaiba and Al, J.Phys. I France (1994) 7-27] une classe de potentiels à deux dimensions d'un système avec une dégénérescence d'ordre multiple à cause de certaines propriétés cachées (hidden). Nous montrons que la fonction de Green est calculable pour un paramètre d du potentiel et une énergie $E = 0$, en utilisant d'abord les coordonnées polaires. Il est connu par exemple pour le potentiel de Coulomb que la fonction de Green s'écrit sous forme compacte via la transformation Levi-Cevita. Nous généralisons cette transformation pour d quelconque et calculons cette même fonction de Green. Nous sommes la série obtenue en coordonnées polaires en montrant qu'elle se compose de deux parties l'une discrète et finie de fonctions de Green et l'autre continue. Nous étudions aussi quelques cas limites pour $E = 0$ et déduisons le spectre et la fonction d'onde pour E quelconque et $d = 1, 2$.



2.3.4 La limite supérieure optimale.....	31
2.3.5 La précision de l'approximation.....	33
2.3.6 Les corrections systématiques.....	34

Chapitre 3:

3.1 Traitement d'une classe des oscillateurs harmoniques par l'approche des intégrales de chemin de Feynman-Kleinert.....	37
3.2 Traitement par la méthode de Feynman-Kleinert du potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie de la mécanique quantique.....	46

Chapitre 4:

4.1 La méthode de Duru-Kleinert généralisée.....	62
4.1.1 Introduction.....	62
4.1.2 La méthode de transformation dans le cas à une dimension.....	62
4.2 Les solutions par les intégrales de parcours d'une classe de potentiels à deux dimensions d'un système avec des dégénérescences locales.....	67
1. Introduction.....	68
2. Fonctions de Green en coordonnées polaires.....	69
3. Fonctions de Green via la transformation de type Levi-Civita.....	77
3.1 Fonctions de Green en coordonnées (u, v).....	77
3.2 Somme de la fonction de Green pour $E = 0$	83
4. Les états limites.....	93
5. Les états continus.....	95
6. Conclusion.....	103
Conclusion:	104
Références	106
Annexes	110



Introduction.

Dans l'état actuel des connaissances scientifiques, la mécanique quantique joue un rôle fondamental par la description et la compréhension des phénomènes naturels.

La mécanique quantique constitue la base théorique des sciences concernant la structure et les propriétés de la matière. Elle traite les problèmes relatifs aux propriétés de la matière à un niveau plus profond et partant plus fondamental que ne le fait la physique classique. De ce fait elle peut répondre à de nombreuses questions concernant les causes de l'apparition des différentes propriétés, auxquelles la physique classique ne pouvait pas donner de réponse.

Pour préciser les rapports existant entre la physique classique et la mécanique quantique, on notera tout d'abord que la mécanique classique constitue un cas limite de la mécanique quantique; dès que l'on passe des corps de tailles microscopiques à des corps de tailles macroscopiques, les lois de la mécanique quantique se ramènent aux lois classiques.

La mécanique quantique a été formulée indépendamment par Heisenberg[1,2] et Schrödinger[2,3]. La formulation de Heisenberg-Dirac[1,2,4] est basée sur l'algèbre des matrices. Dans cette algèbre les opérateurs évoluent dans le temps et les états sont fixés. La formulation de Schrödinger est basée sur une équation différentielle (ou méthode analytique). Dans cette dernière formulation les opérateurs sont généralement fixés et les états évoluent dans le temps.

Une troisième formulation de la mécanique quantique non relativiste a été introduite par Feynman[5,7]. Elle est appelée formalisme de Feynman basé sur les intégrales fonctionnelles de parcours ou « Path-Integral ». Cette dernière formulation bien qu'équivalente aux deux premières formulations est basée sur une méthode géométrique pour exprimer le principe de superposition quantique.

La formulation de Feynman est particulièrement intéressante puisqu'elle permet une formulation lagrangienne de la mécanique quantique.

R. P. Feynman avait commencé par une autre façon d'énoncer la loi de Newton en mécanique classique. Cet énoncé était le suivant: L'énergie cinétique moyenne, moins l'énergie potentielle moyenne, est aussi petite que possible le long du trajet d'un mobile allant d'un point à un autre, ce qui a permis de définir une certaine grandeur que nous appelons l'action S . Cette action était en fait l'intégrale par rapport au temps du lagrangien, qui est une fonction des seules vitesses et coordonnées de positions des particules, ou le principe de moindre action.

En mécanique classique une particule n'emprunte pas seulement le vrai trajet, mais qu'elle choisit celui de la moindre action d'une façon analogue à celle par laquelle la lumière choisit le temps le plus court.

En mécanique quantique (dans un cas non relativiste et en négligeant le spin de l'électron) marche ainsi: La probabilité pour qu'une particule partant du point 1 à l'instant t_1 arrive au point 2 à l'instant t_2 est le carré d'une amplitude de probabilité. L'amplitude totale peut être écrite comme la somme des amplitudes relatives à chaque trajet possible, à chaque chemin d'arrivée. Pour chaque trajectoire imaginée possible nous devons calculer une amplitude. Puis, nous les additionnons toutes ensemble. Notre intégrale d'action nous indiquera ce que doit être l'amplitude relative à un trajet unique. L'amplitude est proportionnelle au produit d'une certaine constante par $\exp(iS/\hbar)$ [4], où S est l'action le long de ce trajet. C'est à dire que si nous représentons la phase de l'amplitude par un

nombre complexe, l'angle de la phase est S/\hbar . L'action a les dimensions d'une énergie multipliée par un temps, et la constante de Planck \hbar a les mêmes dimensions. C'est la constante qui détermine quand la mécanique quantique est importante. Dans le cas limite où la constante de Planck \hbar tend vers zéro, les lois correctes de la mécanique quantique peuvent se résumer en disant: La particule parcourt bien un trajet particulier à savoir celui suivant lequel S ne varie pas en première approximation. Telle est la relation qui existe entre le principe de moindre action et la mécanique quantique.

La formulation lagrangienne de la mécanique quantique présente de nombreux avantages, nous signalons seulement à titre d'exemples, qu'elle se prête aisément à une généralisation relativiste, puisqu'on raisonne directement dans l'espace-temps; de plus, elle peut s'appliquer à tout système classique (pas forcément mécanique) régi par un principe variationnel. Un autre avantage de l'intégrale de chemin est, qu'elle donne une solution globale (intégrale) du problème de la mécanique quantique considéré. Par contre, l'approche standard de la mécanique quantique basée sur l'équation de Schrödinger donne une formulation locale (différentielle) du problème.

L'approche intégrale de parcours de Feynman ou « Path-Integral » exprime directement les amplitudes de transitions et réduit l'intégration de l'équation de Schrödinger à une intégrale fonctionnelle dans l'espace des phases quantiques (ou communément, espace des configurations).

L'objet de ce travail concerne l'application du formalisme de Feynman basé sur les intégrales de parcours « Path-Integral » à divers potentiels intéressant plusieurs domaines de la physique et de la chimie. Malgré le progrès considérable, grâce à l'introduction du paramètre temps[8] et la reparamétrisation des chemins pour le calcul analytique exact du propagateur *via* l'approche path-integral, plusieurs intégrales de chemins ne sont pas encore résolues exactement. Il est donc, nécessaire de mettre en oeuvre des méthodes d'approximation, nous permettant ainsi d'approcher le résultat exact avec une bonne précision. En effet, une méthode d'approximation variationnelle convergente pour le calcul

des intégrales de chemins à des températures finies a été introduite par Feynman et Kleinert[9,10,11,12]. Cette dernière est basée sur la représentation de l'intégrale de chemin comme une fonction de partition de la mécanique quantique, laquelle peut être approximée par une fonction de partition effective classique. Cette méthode a été étendue par des corrections systématiques[13] conduisant ainsi, à une extension convergente de la perturbation variationnelle du potentiel effectif classique d'un système de la mécanique quantique. Cette méthode a été appliquée avec un grand succès à différents potentiels en physique et en chimie.

L'introduction de la supersymétrie de la mécanique quantique a généré un intérêt particulier concernant les problèmes de la mécanique quantique non relativiste. En effet, cette approche permet de trouver de nouveaux potentiels relatifs à des hamiltoniens isospectraux à partir de potentiels connus. Plusieurs nouveaux potentiels solvables exactement sont alors construits. La relation entre les spectres d'énergies des potentiels obtenus à partir de la méthode de factorisation a aussi été établie à travers l'algèbre de la supersymétrie de la mécanique quantique.

Ce thèse comporte deux parties. La première partie est consacrée au traitement numérique *via* la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert[9,10,11,12] à la classe de potentiels de l'oscillateur harmonique obtenue par la méthode de factorisation de la supersymétrie de la mécanique quantique[14,15]. Nous appliquons aussi à la classe de potentiels de Morse généralisée par la supersymétrie de la mécanique quantique[16,17] la méthode de Feynman-Kleinert et les corrections systématiques à cette méthode introduites par Kleinert[13]. Dans le *chapitre 1*, nous exposons la formulation de Feynman des intégrales de chemin. Puis, nous exprimons l'intégrale de chemin dans l'espace des phases. Dans le *chapitre 2*, nous donnons un aperçu sur la théorie de la supersymétrie de la mécanique quantique. La méthode variationnelle de Feynman-Kleinert et les corrections systématiques sont aussi détaillées. Dans le *chapitre 3*, nous appliquons la méthode variationnelle à la classe de potentiels de l'oscillateur harmonique obtenue par la méthode de factorisation de la supersymétrie de la mécanique quantique[14,15]. En plus de la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert, nous appliquons les corrections systématiques [13] au potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie de la mécanique quantique [16,17].

La deuxième partie de ce travail est consacrée à travers le *chapitre 4*, à la méthode de Duru-Kleinert[8,18], qui consiste à ramener des intégrales de chemin relatives à des potentiels singuliers où il est impossible de déduire leurs fonctions de Green à des intégrales de chemin plus classiques. Cette transformation est rendue possible grâce à des transformations dites de Duru-Kleinert.

Nous étudions[19] une classe de potentiels radiaux de la forme $V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}$ [20]. Où α et β sont deux paramètres positifs et d un nombre rationnel positif ou nul *via* l'approche des intégrales de chemin. Nous montrons, que la fonction de Green est calculable pour d quelconque et $E = 0$ en utilisant d'abord les coordonnées polaires. Or il est connu, par exemple pour le *potentiel de Coulomb* que la fonction de Green s'écrit sous forme compacte *via* la transformation de Levi-Cevita. Nous généralisons alors cette transformation pour d quelconque et calculons cette même fonction de Green. Nous sommes la série obtenue en coordonnées polaires en montrant qu'elle se compose de deux parties l'une discrète et finie de fonction de Green et l'autre continue. Nous étudions aussi quelques cas limites pour $E = 0$ et déduisons le spectre et la fonction d'onde pour E quelconque et $d = 1, 2$.



Chapitre 1.

1-1. L'intégrale de chemin.

1-1-1. Formulation de Feynman.

1-1-1-1. Introduction.

Les intégrales de chemin de Feynman sont des intégrales fonctionnelles, dont il faut ramener à des intégrales multiples de Riemann d'ordre N , en remplaçant la fonctionnelle[21] par une fonction d'un nombre fini N de variables. Le propagateur de Feynman a été réduit au calcul d'une intégrale fonctionnelle en divisant l'intervalle de temps entre le point de départ et le point d'arrivée en N intervalles de temps égaux de longueur ε [6,7].

1-1-1-2. Le propagateur.

Les notions de propagateur et de chemin d'espace-temps permettent une nouvelle formulation du postulat concernant l'évolution des systèmes physiques dans le temps.

L'amplitude de transition en mécanique quantique pour qu'une particule parte de $a(x_a)$ à l'instant t_a , arrive en $b(x_b)$ à l'instant t_b est définie directement par le propagateur de Feynman $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$.

$K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ est la somme d'une infinité de contributions une par chacun des chemins espace-temps.

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\substack{\text{sur tous les} \\ \text{chemins de } a \text{ à } b}} \phi[x(t)] \quad (1.1)$$

La contribution d'un chemin est donnée de la manière suivante[22]

$$\phi[x(t)] = \mathcal{N} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(x(t))\right\}, \quad (1.2)$$

S correspond à l'action classique évaluée entre t_a et t_b et donnée par :

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt, \quad (1.3)$$

où $L(x, \dot{x}, t)$ est le lagrangien classique de la particule et \mathcal{N} est une constante de normalisation.

Une forme plus conventionnelle de l'intégrale de chemin est donnée par l'intégrale sur tous les chemins.

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(x(t))\right\} \mathcal{D}[x(t)], \quad (1.4)$$

où le symbole $\mathcal{D}[x(t)]$ est la mesure différentielle du chemin.

Si on divise [22] l'intervalle de temps $T = t_b - t_a$ en N intervalles égaux de longueur ε , c'est à dire:

$$t_b - t_a = N\varepsilon, \quad t_j - t_{j-1} = \varepsilon, \quad t_0 = t_a, \quad t_N = t_b; \quad j = 1, 2, \dots, N$$

et la discretisation correspondante au chemin est :

$$x_j = x(t_j), \quad x_a = x(t_0) = x_0, \quad x_b = x(t_N) = x_N$$

L'action $S(x(t))$ exprimée dans la forme discrète est :

$$S(x_j) = \varepsilon \sum_{j=1}^N L\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}, \frac{x_j - x_{j-1}}{\varepsilon}; j\varepsilon\right). \quad (1.5)$$

La mesure d'intégration du chemin prend la forme suivante :

$$\mathcal{D}[x(t)] \rightarrow A_N \prod_{j=1}^{N-1} dx_j$$

Pour une particule de masse m , $A_N = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right]^{3N/2}$. La discretisation des chemins, nous permet d'écrire le propagateur approprié comme une intégrale multiple de Riemann.

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty}} A_N \int \cdots \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_j) \right] \prod_{j=1}^{N-1} dx_j. \quad (1.6)$$

La quantité physique principale de l'approche de Feynman est le propagateur $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$, qui représente l'amplitude de probabilité pour qu'une particule aille d'un point espace-temps à un autre. En mécanique classique, il y a seulement un chemin ou trajectoire reliant les points de départ et d'arrivée. Ce chemin est où l'action est minimum. En mécanique quantique tous les chemins (et non pas seulement le chemin classique) contribuent à l'amplitude, de la même façon dans l'amplitude mais d'une façon différente par rapport à la phase. La phase de chaque chemin est l'action classique mesurée en termes de \hbar .

1-2 Intégrale de chemin dans l'espace des phases.

1-2-1. Introduction.

La définition de l'intégrale de chemin de la dynamique quantique reste l'expression des amplitudes de transformation quantique dépendantes du temps, à travers un opérateur d'évolution $\hat{U}(t_b, t_a) = \exp[-(t_b - t_a)\hat{H}/\hbar]$ où \hat{H} est l'hamiltonien du système; et l'insertion répétée de l'opérateur identité, comme étant la limite d'un nombre infini d'intégrations.

L'intégrale de chemin de Feynman[6] et l'intégrale de chemin dans l'espace des phases[23,24,25,26,27,28], nous permettent de concrétiser cette définition d'une manière générale. La seule différence fondamentale entre les deux approches est la représentation de l'opérateur identité inséré plusieurs fois et qui nous conduit à un nombre infini de variables d'intégrations intermédiaires différentes et des mesures d'intégrations différentes.

1-2-2. L'intégrale de chemin.

L'intégrale de chemin dans l'espace des phases utilise la représentation de l'opérateur identité dans l'espace des phases définie comme suit :

$$\hat{I} = \int |p\rangle \exp[-ipq/\hbar] \langle q| \frac{dpdq}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (1.7)$$

Par contre, celle de Feynman utilise la représentation de l'opérateur identité dans l'espace des configurations ;

$$\hat{I} = \int |q\rangle \langle q| dq \quad (1.8)$$

L'observation faite par Schrödinger et Dirac, relative à un temps très court est que l'amplitude de transformation quantique s'écrit :

$$\langle q_b | q_a \rangle(t) = \langle q_b | \exp[-i\hat{H}t/\hbar] | q_a \rangle. \quad (1.9)$$

L'amplitude (1.9) est proportionnelle à $\exp[iS/\hbar]$, où S est la solution de l'équation de Hamilton-Jacobi correspondante.

Nous divisons l'intervalle de temps $(t_b - t_a)$ en $N+1$ intervalles égaux de longueurs ε , c'est à dire $\varepsilon = (t_b - t_a)/(N+1)$, tout en utilisant N fois la représentation de l'opérateur identité (1.8) dans l'espace des configurations, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
K(q_b, t_b; q_a, t_a) &= \langle q_b | q_a \rangle(t) \\
&= \int [dq_N \dots dq_1] \langle q_b | \exp(-i\hat{H}\epsilon/\hbar) | q_N \rangle \langle q_N | \exp(-i\hat{H}\epsilon/\hbar) | q_{N-1} \rangle \dots \\
&\quad \times \dots \langle q_2 | \exp(-i\hat{H}\epsilon/\hbar) | q_1 \rangle \langle q_1 | \exp(-i\hat{H}\epsilon/\hbar) | q_a \rangle.
\end{aligned} \tag{1.10}$$

Nous avons supposé que l'hamiltonien ne contient pas de terme dépendant explicitement du temps.

Nous insérons une série complète des états impulsions p et nous utilisons,

$$\begin{aligned}
\langle q_j | \exp(-i\hat{H}\epsilon/\hbar) | q_{j-1} \rangle &= \int \langle q_j | \exp(-i\hat{H}\epsilon/\hbar) | p \rangle \langle p | q_{j-1} \rangle dp \\
&= \int \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p(q_j - q_{j-1}) - \epsilon H(q_j, p))\right] \frac{dp}{2\pi\hbar}
\end{aligned} \tag{1.11}$$

Le remplacement des opérateurs \hat{p} et \hat{q} par leurs valeurs propres p et q_j et dû au réajustement de l'opérateur hamiltonien \hat{H} à travers l'expression du produit de Trotter[29] ou un mécanisme équivalent. Nous répétons le processus sur les $(N+1)$ éléments de matrices de (1.10), nous obtenons,

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) = \int \frac{dp_{N+1}}{2\pi\hbar} \left[\prod_{k=1}^N \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} \right] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} p_k (q_k - q_{k-1}) - \epsilon H(q_k, p_k) \right\}, \tag{1.12}$$

où par définition, $q_N = q_j$ et $q_0 = q_i$.

La limite intégrale de chemin est obtenue en prenant la limite $N \longrightarrow \infty$ et en faisant les identifications suivantes :

$$\sum_{k=1}^{N+1} p_k (q_k - q_{k-1}) = \sum_{k=1}^{N+1} p(t_k) \frac{q(t_k) - q(t_k - \epsilon)}{\epsilon} \epsilon \longrightarrow \int_{t_a}^{t_b} p(t) \dot{q}(t) dt,$$

et,

$$\sum_{k=1}^{N+1} H(q_k, p_k) \epsilon \longrightarrow \int_{t_a}^{t_b} H(p(t), q(t)) dt ,$$

pour les termes de l'exponentielle puis, nous définissons la mesure d'intégration comme ;

$$\prod_{k=1}^N \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar} = \mathcal{D}p. \mathcal{D}q .$$

Nous insérons toutes ces relations dans l'équation (1.12), nous obtenons ;

$$K(q_b, t_b; q_a, t_a) = \int \frac{dp_{N+1}}{2\pi\hbar} \mathcal{D}p. \mathcal{D}q \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [p(t)\dot{q}(t) - H(q(t), p(t))] dt \right\} . \quad (1.13)$$

$K(q_b, t_b; q_a, t_a)$ de l'équation (1.13) n'est autre que l'expression du propagateur de Feynman dans l'espace des phases [28], appelée aussi formulation canonique[30] de l'intégrale de chemin. Si nous reprenons les identifications faites précédemment et concernant l'exponentielle de (1.13), cela représente l'action classique relative à une particule allant d'un point q_a à un point q_b . Si nous regardons maintenant la mesure d'intégration, l'intégrale de chemin dans l'espace des phases semble être une somme d'intégration sur tous les chemins possibles dans l'espace des phases entre un état initial et un état final. Néanmoins, comme il a souvent été noté, cette interprétation est complètement fautive[28]. Nous examinons maintenant la forme discrète de (1.10), qui montre que les configurations intermédiaires sont exceptionnellement discontinues et ne peuvent être égalées à des chemins classiques, c'est ce qu'on appelle parfois « le problème des chemins incontrôlés ».

Pour les hamiltoniens quadratiques en p , et en particulier ceux de la forme $p^2/2M + V(q)$, les intégrations sur les impulsions p peuvent être faites explicitement, sur la forme discrète de (1.10) ou formellement à travers une phase stationnaire fonctionnelle dans le propagateur (1.13).

Chapitre 2.

2-1. La supersymétrie de la mécanique quantique .

2-1-1. Introduction .

La supersymétrie est une symétrie, qui décrit les transformations entre bosons et fermions. Elle est apparue en premier dans les études de la théorie des champs. La dégénérescence du spectre d'énergie de différents systèmes en mécanique quantique est interprétée à l'aide de la supersymétrie. En effet, la connaissance de la fonction d'onde de l'état fondamental d'un potentiel à une dimension de la mécanique quantique non relativiste, nous permet de construire d'autres potentiels de mêmes spectres d'énergies, excepté l'énergie de l'état fondamental[31,32]. La supersymétrie de la mécanique quantique est aussi une reformulation de la méthode de factorisation de Schrödinger [33,34,35].

2-1-2. Formulation mathématique.

La théorie de la supersymétrie décrit les bosons et les fermions d'une manière unifiée, fait intervenir les commutateurs et les anticommutateurs. L'algèbre de la supersymétrie de la mécanique quantique contient N opérateurs de charges Q_i . L'hamiltonien supersymétrique \mathcal{H} vérifie l'algèbre $S(N)$ [36].

$$\begin{aligned} \{Q_i, Q_j\} &= \delta_{ij} \mathcal{H}, \quad i, j = 1, 2, \dots, N. \\ [Q_i, \mathcal{H}] &= 0. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Les résultats les plus importants de la supersymétrie de la mécanique quantique sont obtenus à partir de l'algèbre de $S(2)$.

Nous introduisons de nouveaux opérateurs de charges dans l'algèbre S(2),

$$Q = (Q_1 + iQ_2) / \sqrt{2} \quad \text{et} \quad Q^+ = (Q_1 - iQ_2) / \sqrt{2},$$

nous obtenons alors;

$$\{Q, Q^+\} = \mathcal{N}, \quad Q^2 = (Q^+)^2 = 0 \quad (2.2)$$

$$[Q, \mathcal{N}] = [Q^+, \mathcal{N}] = 0$$

Les opérateurs de charges sont nilpotents et commutent avec l'hamiltonien supersymétrique \mathcal{N}

Nous considérons deux matrices des opérateurs de charges comme suit:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^+ = \begin{pmatrix} 0 & A^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.3a)$$

où A et A⁺ deux opérateurs que nous définissons par la suite. L'hamiltonien supersymétrique \mathcal{N} est par conséquent;

$$\mathcal{N} = \begin{pmatrix} A^+A & 0 \\ 0 & AA^+ \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} H_- & 0 \\ 0 & H_+ \end{pmatrix}. \quad (2.3b)$$

Les deux matrices (2.3a) et l'hamiltonien (2.3b) représentent la réalisation de l'algèbre S(2) dans l'équation (2.2), connue aussi comme étant la superalgèbre de Lie SI(1/1). L'hamiltonien supersymétrique \mathcal{N} donné par (2.3b) peut être interprété comme étant la composition de deux hamiltoniens scalaires H₋ et H₊. Ces deux opérateurs agissent respectivement dans les secteurs « bosonique » et « fermionique » sur les deux états de base. Ces deux secteurs sont reliés par:

$$Q \begin{pmatrix} \Psi_B \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ A\Psi_B \end{pmatrix}, \quad Q^+ \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^+\Psi_F \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

où ψ_B et ψ_F contiennent les états propres de l'hamiltonien « bosonique » $H_- = A^+A$ et l'hamiltonien « fermionique » $H_+ = AA^+$. H_- et H_+ sont appelés des hamiltoniens partenaires supersymétriques.

L'existence de la superalgèbre (2.2), et en particulier, la relation de commutation entre les charges supersymétriques et l'hamiltonien supersymétrique a des conséquences importantes concernant le spectre d'énergie de H_- et H_+ [32,36]. Premièrement, de leur construction les valeurs propres de $H_- = A^+A$ et $H_+ = AA^+$ ne sont pas négatives.

Nous considérons maintenant que les fonctions $\psi^{(-)}$ et $\psi^{(+)}$ sont des fonctions propres normalisées de H_- et H_+ dont les valeurs propres sont $E^{(-)}$ et $E^{(+)}$. Nous écrivons :

$$H_- \psi^{(-)} = E^{(-)} \psi^{(-)}, \quad (2.5)$$

$$H_+ \psi^{(+)} = E^{(+)} \psi^{(+)}$$

L'équation,

$$H_+ (A \psi^{(-)}) = AA^+ (A \psi^{(-)}) = AH_- \psi^{(-)} = E^{(-)} A \psi^{(-)}, \quad (2.6)$$

montre que $E^{(-)}$ est aussi valeur propre de H_+ et la fonction propre normalisée associée à H_+ est;

$$\psi^{(+)} = (E^{(-)})^{-1/2} A \psi^{(-)}, \quad (2.7)$$

sauf si $A \psi^{(-)} = 0$.

Nous écrivons aussi l'équation:

$$H_-(A^+\psi^{(+)}) = A^+A(A^+\psi^{(+)}) = A^+H_+\psi^{(+)} = E^{(+)}A^+\psi^{(+)}, \quad (2.8)$$

et qui montre que $E^{(+)}$ est aussi valeur propre de H_- et la fonction propre normalisée associée à H_- est;

$$\psi^{(-)} = (E^{(+)})^{-1/2} A^+\psi^{(+)}, \quad (2.9)$$

sauf si $A^+\psi^{(+)} = 0$.

Ces relations entre les hamiltoniens partenaires supersymétriques conduisent à trois modèles possibles relatifs à leurs spectres d'énergies. (figure ci-dessous).

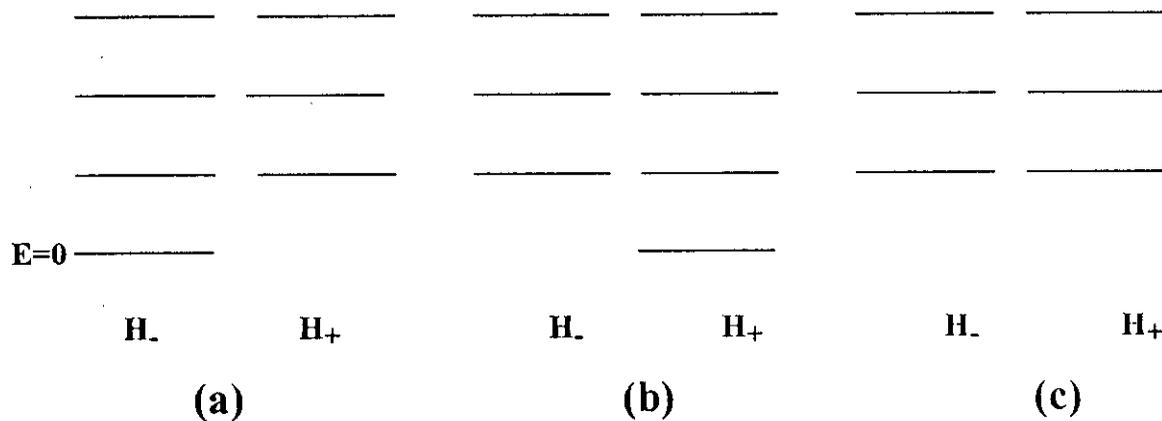


Fig:1.Schéma d'arrangement possible des spectres d'énergies relatifs à H_- et H_+ .

i) A chaque fois que $A\psi_0^{(-)} = 0$ est un état propre normalisable de H_- , alors $H_-\psi_0^{(-)} = A^+A\psi_0^{(-)} = 0$, implique que cet état propre est un état fondamental de H_- avec $E_0^{(-)} = 0$ comme énergie propre. Inversement, si $0 = E_0^{(-)} = \langle \psi_0^{(-)} | A^+A | \psi_0^{(-)} \rangle = | A | \psi_0^{(-)} \rangle|^2$ conduit à $A\psi_0^{(-)} = 0$. Dans ce cas H_+ a un état propre non normalisable et une énergie nulle, nous obtenons la situation décrite dans la figure (fig 1a) où ,

$$E_{n+1}^{(-)} = E_n^{(+)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \text{où } E_0^{(-)} = 0, \quad (2.10)$$

Les états propres de H_- et H_+ ayant les mêmes spectres d'énergies sont reliés les uns aux autres comme suit:

$$\psi_n^{(+)} = \left(E_{n+1}^{(-)}\right)^{-1/2} A \psi_{n+1}^{(-)} \quad \text{et} \quad \psi_{n+1}^{(-)} = \left(E_n^{(+)}\right)^{-1/2} A^+ \psi_n^{(+)}$$

ii) Le même raisonnement est fait au cas où les rôles de H_- et H_+ sont échangés et les spectres d'énergies sont ceux de la figure (fig 1 b).

iii) Si maintenant H_- et H_+ n'ont pas des états propres normalisables avec une énergie fondamentale nulle, les spectres d'énergies de H_- et H_+ deviennent identiques comme le montre la figure (fig 1c). Ce cas correspond à la supersymétrie brisée.

Nous allons nous intéresser dans tout ce qui suit seulement au cas *i*).

Nous avons considéré jusqu'à présent, les opérateurs comme des quantités mathématiques abstraites satisfaisant à des relations prescrites, sans les avoir spécifiés en détail. Nous allons commencer par considérer une réalisation différentielle spécifique des opérateurs A et A^+ pour laquelle l'équation de Schrödinger à une dimension peut se mettre sous la forme suivante:

$$H_{\pm} \psi^{(\pm)}(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm}(x) \right) \psi^{(\pm)}(x) = E^{(\pm)} \psi^{(\pm)}(x), \quad (2.11)$$

Pour pouvoir factoriser cette équation, un choix possible pour les opérateurs A et A^+ est

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} + W(x)$$

(2.12)

$$A^+ = -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} + W(x)$$

et qui vérifient l'équation (2.11), où les potentiels s'écrivent comme suit :

$$V_{\pm}(x) = W^2(x) \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} W(x). \quad (2.13)$$

$W(x)$ est reliée uniquement à l'état fondamental de la fonction d'onde de H_- via $A\psi_0^{(-)} = 0$:

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2M}} \frac{d}{dx} \text{Ln}(\psi_0^{(-)}(x)), \quad (2.14)$$

où,

$$\psi_0^{(-)}(x) \equiv \exp\left(-\frac{\sqrt{2M}}{\hbar} \int^x W(y) dy\right). \quad (2.15)$$

Une conséquence immédiate de ces résultats est: dès que les solutions relatives au potentiel $V_-(x)$ sont connues, les solutions relatives au potentiel partenaire supersymétrique,

$$V_+(x) = V_-(x) - \frac{\hbar^2}{M} \frac{d}{dx} \text{Ln}(\psi_0^{(-)}(x)) \quad (2.16)$$

sont ainsi directement obtenues, en outre les énergies des états fondamentaux des deux potentiels sont reliées par l'équation (2.10). Cette procédure peut s'appliquer pour n'importe quel potentiel (après un simple changement possible dans l'échelle des énergies, en posant $E_0^{(-)} = 0$, en plus, elle peut être appliquée aux potentiels qui peuvent être résolus soit analytiquement ou numériquement.

Un aspect remarquable de la supersymétrie de la mécanique quantique est que des séries entières de potentiels de mêmes spectres d'énergies solvables peuvent être construites par l'application consécutive de cette procédure.

2-2. L'approche variationnelle de la mécanique quantique statistique.

2-2-1. Introduction.

Des méthodes théoriques ont été testées pour réduire les calculs de la mécanique quantique aux calculs de la mécanique classique et elles ont eu un grand intérêt dès lors de la naissance de la mécanique quantique. L'idée fondamentale était de définir des représentations convenables tel que l'espace des phases pourrait être utilisé. Dans cet ordre d'idée, l'expression de Wigner [37], La représentation de Weyl [38] et les états cohérents [39,40], étaient découvertes. Ces approches ont été récemment révisées[41,42,43] et améliorées [44,45], à cause du peu de méthodes analytiques bien connues, des techniques numériques efficaces peuvent être mises en oeuvre [46,47,48].

La formulation de l'intégrale de chemin de la mécanique statistique [6,49] représente un outil idéal puisqu'elle permet des extensions à partir d'un régime classique et qui est donné par le minimum de l'action euclidienne. Le caractère quantique de la statistique est donné par le rapport des trajectoires en plus des trajectoires classiques. En particulier, une méthode particulière de l'intégrale de chemin, appelée approche variationnelle [6,49], qui apparaît comme très adéquate pour construire un potentiel effectif pour être inséré de nouveau dans une configuration intégrale. De cette façon, au moins dans l'approximation à faibles couplage, le calcul de la fonction de partition se réduit à un calcul facile avec un potentiel modifié en tenant compte des effets quantiques.

2-2-2. L'approche variationnelle de Feynman.

2-2-2-1. Expression de l'intégrale de chemin de la mécanique statistique.

L'expression de l'intégrale de chemin de la mécanique statistique est basée sur la rotation de Wick pour un temps imaginaire $t = i\tau = i\hbar\beta$ avec $\beta = (k_B T)^{-1}$. Pour la fonction de partition Z ou pour l'énergie libre F , l'expression dans la forme lagrangienne est,

$$Z = \exp(-\beta F) = \int_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp(-\mathcal{A}[x(\tau)]/\hbar), \quad (2.17)$$

où l'intégrale de chemin est calculée sur tous les chemins fermés et $\mathcal{A}[x(\tau)]$ est l'action euclidienne. Nous allons considérer le cas simple d'une particule de masse M dans un potentiel anharmonique. Dans ce cas l'action euclidienne s'écrit:

$$\mathcal{A}[x(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{Mx'^2(\tau)}{2} + V(x(\tau)) \right]. \quad (2.18)$$

Une forme équivalente est déduite, en considérant le point moyen de chaque chemin tel que:

$$y = (\beta\hbar)^{-1} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau) \equiv \bar{x}, \quad (2.19)$$

et nous sommions premièrement sur tous les chemins périodiques satisfaisants (2.19) avec un y fixé et puis, nous intégrons sur les points y .

$$Z = \exp(-\beta F) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{\bar{x}=y} \mathcal{D}[x(\tau)] \exp(-\mathcal{A}[x(\tau)]/\hbar). \quad (2.20)$$

La limite classique est rétablie lorsque $\beta\hbar \rightarrow 0$, puisque dans ce cas, les chemins éloignés du point initial ont une contribution négligeable à l'intégrale de chemin, à cause de la très haute énergie cinétique. Alors on peut supposer que,

$$V(x(\tau)) \cong V(x(0)) \cong V(y), \quad (2.21)$$

et nous avons,

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(-\beta V(y)) \int \mathcal{D}[x(\tau)] \exp \left[(-1/\hbar) \int_0^{\beta\hbar} d\tau M \dot{x}'^2 / 2 \right]. \quad (2.22)$$

L'intégrale de chemin d'une particule libre peut être facilement calculée et réduit à une configuration d'intégrale bien connue dans la mécanique classique statistique,

$$Z = \left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(-\beta V(y)). \quad (2.23)$$

2-2-2-2 . L'approche variationnelle.

Nous considérons une action d'essai \mathcal{A}_0 et une approximation au premier ordre, à l'aide de l'inégalité de Jensen-Peierls [50], on trouve que la vraie énergie libre F a une limite supérieure donnée par:

$$F \leq F_0 + \frac{1}{\beta\hbar} \langle \mathcal{A} - \mathcal{A}_0 \rangle_{\mathcal{A}_0}, \quad (2.24)$$

où F_0 est calculée par (2.17) avec l'action d'essai \mathcal{A}_0 et la moyenne $\langle \mathcal{A} - \mathcal{A}_0 \rangle_{\mathcal{A}_0}$ est calculée par rapport à \mathcal{A}_0 . D'après Feynman [6,49,50], et en supposant que :

$$\mathcal{A}_0 = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{M}{2} \dot{x}'^2(\tau) \right] + \beta\hbar\omega(y), \quad (2.25)$$

où $\omega(y)$ est un paramètre variationnel déterminé par la minimisation du membre de droite de l'inégalité de Jensen-Peierls (2.24). L'interprétation physique de l'action d'essai \mathcal{A}_0 est simple. La particule se propage le long du chemin comme étant libre, et assujettie au point moyen y à un potentiel effectif $\omega(y)$, qui tient compte des effets quantiques.

En tenant compte de la forme particulière de l'action (2.25), cette condition s'écrit[6,50]:

$$\frac{\delta}{\delta\omega(y)} [F_0 + \langle V - V_0 \rangle_{\mathcal{A}_0}] = 0. \quad (2.26)$$

Le résultat final est donc,

$$\omega(y) = \left(\frac{1}{\pi\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz V(z) \exp\left[-(y-z)^2/\alpha\right], \quad (2.27)$$

tel que $\langle V - V_0 \rangle_{\mathcal{A}_0} = 0$ et par conséquent $F \cong F_0$. En raison de ces caractéristiques particulières, $\omega(y)$ définie un potentiel effectif, une fois insérée dans une configuration intégrale permet de réduire les calculs de la mécanique statistique au calculs classiques.

$$F \cong F_0 = \beta^{-1} \text{Ln} \left[\left(\frac{M}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp(-\beta\omega(y)) \right]. \quad (2.28)$$

De l'équation (2.27), $\omega(y)$ devient le potentiel classique $V(y)$ « maculé » par les fluctuations quantiques gaussiennes avec le carré du déplacement moyen pour une particule libre.

$$\alpha/2 = \langle y^2 \rangle_{\text{tot}} - \langle y^2 \rangle_{\text{clas}} = \hbar^2\beta/12M. \quad (2.29)$$

$\langle y^2 \rangle_{\text{tot}}$ est la fluctuation quantique gaussienne totale, $\langle y^2 \rangle_{\text{clas}}$ est sa contre partie classique.

Dans la limite classique, nous avons $\alpha = 0$ et $\omega(y) = V(y)$.

2-3. L'approximation Feynman-Kleinert et les corrections systématiques.

2-3-1. Introduction.

Si plusieurs intégrales de chemin ne peuvent pas être calculées exactement, il est donc nécessaire de faire appel à des procédures d'approximation, qui nous permettent d'approcher le résultat exact avec de bonnes précisions.

Nous allons dans ce qui va suivre développer une procédure d'approximation convergente aux calculs des intégrales de chemin euclidiennes à une température finie. La base de cette procédure est l'approche variationnelle de Feynman-Kleinert[9,10], et qui est récemment[17] étendue à une expression de perturbation variationnelle uniformément convergente et systématique.

2-3-2. Fonction de partition effective classique.

Nous considérons l'intégrale de chemin euclidienne d'une particule donnée par (2.17). Nous exprimons la mesure d'intégration dans l'équation (2.17) en termes de composantes

de Fourier du chemin $x(\tau) = x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m \exp(i\omega_m \tau) + c.c.)$,

où, $\omega_m = 2\pi m/\beta$.

La fonction de partition s'écrit :

$$Z \equiv \exp(-\beta F) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{\pi/M\beta\omega_m^2} \right] \times \\ \times \exp \left[-M\beta \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau V(x(\tau)) \right] \quad (2.30)$$

Nous intégrons sur les composantes réelles et imaginaires de x_m avec $m \neq 0$. Le résultat est l'intégrale simple,

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \exp[-\beta V^{\text{eff,clas}}(x_0)], \quad (2.31)$$

avec x_0 , qui coïncide avec la position moyenne du chemin fluctuant (équation.(2.19)) dans l'intervalle de temps $\tau \in [0, \beta]$.

L'intégrale (2.31) a la même forme qu'une fonction de partition classique (2.23). C'est pour cette raison, que la fonction $V^{\text{eff,clas}}(x_0)$ est désignée par un potentiel effectif classique du système. Elle tient compte des effets de toutes les fluctuations quantiques. La définition explicite de l'intégrale de chemin du potentiel effectif classique est :

$$\exp(-\beta V^{\text{eff,clas}}(x_0)) \equiv \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}/\hbar), \quad (2.32)$$

avec la fonction δ modifiée,

$$\bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \equiv \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M} \cdot \delta(\bar{x} - x_0), \quad (2.33)$$

qui permet une restriction des chemins à une position moyenne x_0 .

Pour un oscillateur harmonique, le potentiel effectif classique peut être calculé exactement. Le facteur de Boltzmann dans (2.30) est simplement,

$$\exp\left[-M\beta\sum_{m=1}^{\infty}(\omega_m^2 + \omega^2)|x_m|^2\right] \exp(-M\beta\omega^2 x_0^2/2) \quad (2.34)$$

Les intégrations sur x_m^{re} , x_m^{im} sont représentées avec le résultat :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right] \exp(-M\beta\omega^2 x_0^2/2). \quad (2.35)$$

Le rapport des fréquences est donné par :

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left[\frac{\omega_m^2}{\omega_m^2 + \omega^2} \right] = \frac{\hbar\beta\omega/2}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} \quad (2.36)$$

alors la fonction de partition locale est:

$$Z_{\omega}^{x_0} = \frac{\hbar\beta\omega/2}{\sinh(\hbar\beta\omega/2)} \exp(-M\beta\omega^2 x_0^2/2), \quad (2.37)$$

correspondant au potentiel effectif classique

$$\begin{aligned} V_{\omega}^{\text{eff,clas}}(x_0) &= \beta^{-1} \text{Ln} \frac{\sinh(\hbar\beta\omega/2)}{\hbar\beta\omega/2} + V(x_0) \\ &= -\beta^{-1} \text{Ln}(\beta\hbar\omega) + \frac{\hbar\omega}{2} + \beta^{-1} \text{Ln}(1 - \exp(\beta\hbar\omega)) + V(x_0), \end{aligned} \quad (2.38)$$

La fonction de partition complète exacte, incluant les effets quantiques, est obtenue à partir de l'intégrale (2.31) et s'écrit;

$$Z_\omega = \frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega / 2)}. \quad (2.39)$$

Notons que le potentiel effectif classique de l'oscillateur harmonique est composé simplement du potentiel classique à la position moyenne du chemin x_0 plus une constante additionnelle dépendant de la température. A la limite des basses températures, nous trouvons :

$$V^{\text{eff,clas}}(x_0) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{\hbar \omega}{2} + V(x_0), \quad (2.40)$$

c'est à dire la constante additionnelle tend vers $\frac{\hbar \omega}{2}$. Ceci est juste l'énergie du point zéro de la mécanique quantique, qui garantie la limite correcte des basses températures,

$$Z \xrightarrow{T \rightarrow 0} e^{-\beta \hbar \omega / 2} \beta \hbar \omega \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi \hbar^2 \beta / M}} \exp(-M\beta \omega^2 x_0^2 / 2) = \exp(-\beta \hbar \omega / 2). \quad (2.41)$$

La fonction de partition est égale au facteur de Boltzmann avec une énergie du point zéro $\hbar \omega / 2$.

2-3-3. La fonction de partition d'essai de Feynman-Kleinert.

En général, il est possible de calculer $V^{\text{eff,clas}}(x_0)$ exactement. Il n'y a pas de difficultés à trouver une approximation simple et assez précise pour $V^{\text{eff,clas}}(x_0)$, qui, néanmoins, approche la vraie valeur de $V^{\text{eff,clas}}(x_0)$ par excès. L'approximation est obtenue en comparant l'intégrale de chemin en question avec l'intégrale de chemin d'essai. L'intégrale de chemin d'essai consiste en une superposition convenable des intégrales de chemin de l'oscillateur harmonique local centré sur des positions moyennes arbitraires x_0 , chaque

oscillateur avec sa propre fréquence $\Omega^2(x_0)$. Les coefficients de la superposition et les fréquences sont choisis de telle manière que le potentiel effectif classique du système d'essai est une limite supérieure optimale du vrai potentiel effectif classique. Dans les systèmes où les potentiels n'ont pas de singularités, la précision de l'approximation est assez bonne.

L'action d'essai locale relative à un oscillateur harmonique centré au point x_0 .

$$\mathcal{A}_\Omega^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau M \left[\frac{\dot{x}^2}{2} + \Omega^2(x_0) \frac{(x - x_0)^2}{2} \right], \quad (2.42)$$

avec une fréquence d'essai locale $\Omega(x_0)$ est inconnue. La fonction de partition d'essai locale est:

$$\begin{aligned} Z_\Omega^{x_0} &\equiv \int \mathcal{D}x(\tau) \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}_\Omega^{x_0}/\hbar) \\ &= \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{(\pi/M\beta\omega_m^2)} \right] \exp\left(-M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] |x_m|^2\right). \end{aligned} \quad (2.43)$$

nous remplaçons ω par $\Omega(x_0)$ (équations (2.34; 2.35)), nous trouvons

$$Z_\Omega^{x_0} = \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)}. \quad (2.44)$$

Le potentiel effectif classique des oscillateurs harmoniques est égal à l'énergie libre correspondante.

$$V_\Omega^{\text{eff,clas}}(x_0) = F_\Omega^{x_0} \equiv -\beta^{-1} \text{Ln} \left\{ \frac{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)}{\hbar\beta\Omega(x_0)/2} \right\}. \quad (2.45)$$

Nous définissons maintenant, les valeurs moyennes locales d'une fonction arbitraire $F[x(\tau)]$ par rapport à l'intégrale de chemin harmonique (2.43) :

$$\langle F[x(\tau)] \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar) F[x(\tau)]. \quad (2.46)$$

Le potentiel effectif classique s'exprime comme;

$$\begin{aligned} \exp(-\beta V^{\text{eff,clas}}(x_0)) &= Z^{x_0} = \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}/\hbar) \\ &\equiv \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar) \exp(-(\mathcal{A}/\hbar - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar)) \\ &= [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \langle \exp(-(\mathcal{A}/\hbar - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar)) \rangle_{\Omega}^{x_0}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

D'après l'inégalité de Jensen-Péierls, nous avons :

$$\langle \exp(-(\mathcal{A}/\hbar - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar)) \rangle_{\Omega}^{x_0} \geq \exp(-(\mathcal{A}/\hbar - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar))_{\Omega}^{x_0}. \quad (2.48)$$

Cela implique que le potentiel effectif classique a une limite supérieure,

$$V^{\text{eff,clas}}(x_0) \leq F_{\Omega}^{x_0} + \beta^{-1} \langle (\mathcal{A}/\hbar - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}/\hbar) \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (2.49)$$

Puisque les énergies cinétiques dans les deux actions \mathcal{A} et $\mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}$ dans l'équation (2.49) sont égales, l'inégalité s'écrit:

$$V^{\text{eff,clas}}(x_0) \leq F_{\Omega}^{x_0} + \hbar\beta^{-1} \left\langle \left[V(x(\tau)) - M \frac{\Omega^2(x_0)}{2} (x(\tau) - x_0) \right] \right\rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (2.50)$$

La valeur moyenne du deuxième membre de l'inégalité se calcule facilement. Nous trouvons premièrement la fluctuation locale de largeur $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$. Nous insérons la décomposition en termes ω_m . Nous obtenons :

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = \langle \sum_m [x_m]^2 + \sum_{m \neq m'} x_m x_{m'}^* \exp(-i(\omega_m - \omega_{m'})\tau) \rangle_{\Omega}^{x_0}.$$

où, $x_{-m} \equiv x_m^*$

Nous utilisons la décomposition correspondante à la fonction de partition (2.43), nous trouvons que les valeurs moyennes locales (2.46) sont des produits d'intégrales,

$$\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0} = [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{(\pi/M\beta\omega_m^2)} \right] \left[\exp \left(-M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] |x_m|^2 \right) \right] \dots \quad (2.51)$$

Les corrélations de variables d'intégrations sont

$$\langle x_m x_{m'}^* \rangle_{\Omega}^{x_0} = \delta_{mm'} \frac{1}{M\beta} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}. \quad (2.52)$$

En sommant sur toutes les valeurs $m = m'$, nous obtenons la largeur des fluctuations locales.

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = a^2(x_0), \quad (2.53)$$

où,

$$a^2(x_0) \equiv 2 \frac{1}{M\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}. \quad (2.54)$$

Le produit des termes dans la somme est connu d'après (2.36). Nous utilisons cette équation pour calculer la somme comme suit :

$$\begin{aligned}
 a^2(x_0) &\equiv 2 \frac{1}{M\beta} \frac{\partial}{\partial \Omega^2} \text{Ln} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)}{\omega_m^2} \\
 &= \frac{1}{M\beta} \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega} \text{Ln} \frac{\sinh(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)}{(\hbar\beta\Omega(x_0)/2)} \quad (2.55) \\
 &= \frac{1}{M\beta\Omega^2(x_0)} \left[\frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2} \coth \frac{\hbar\beta\Omega(x_0)}{2} - 1 \right]
 \end{aligned}$$

Nous notons que le résultat est indépendant du temps τ dû à la l'invariance de translation suivant l'axe des τ .

La largeur de la fluctuation locale $a^2(x_0)$ diffère de la valeur moyenne $\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0}$ de l'oscillateur harmonique par le terme manquant $\omega_0 = 0$ dans la somme (2.54)

$$\langle (x(\tau) - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} = a^2(x_0) + \frac{1}{M\beta\Omega^2(x_0)} \quad (2.56)$$

Cette différence est essentielle pour la qualité de l'approximation. Lorsque la largeur de la fluctuation locale (2.55) diminue pour les hautes températures, le terme négligé $\omega_0 = 0$ tend vers l'infini. La largeur de la fluctuation locale $a^2(x_0)$ mesure l'importance des fluctuations quantiques à des températures non nulles. Par contre, la largeur du terme $\omega_0 = 0$ croît avec la température montrant ainsi l'importance de la croissance des fluctuations thermiques. Elle décroît lorsque les températures croient. Puisque $a^2(x_0)$ est fini à toutes les températures, les fluctuations quantiques peuvent être traitées approximativement. L'approximation s'améliore avec les températures croissantes où $a^2(x_0)$ tend vers zéro. Les fluctuations thermiques divergent à hautes températures. Pour les évaluer, il faut intégrer numériquement sur x_0 la fonction de partition effective classique finale.

Ayant calculé $a^2(x_0)$, la valeur moyenne locale $\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0}$ est assez facile. Nous décomposons $V(x(\tau))$ en composantes de Fourier

$$V(x(\tau)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ikx(\tau)) \tilde{V}(k), \quad (2.57)$$

nous écrivons, en utilisant (2.42)

$$\begin{aligned} \langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} &= [Z_{\Omega}^{x_0}]^{-1} \prod_{m=1}^{\infty} \left[\int \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{(\pi/M\beta\omega_m^2)} \right] \exp \left(-M\beta \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] |x_m|^2 \right) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp \left(ik \left[x_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{-i\omega_m \tau} + c.c.) \right] \right) \tilde{V}(k). \end{aligned} \quad (2.58)$$

L'intégrale multiple diffère de l'intégrale de chemin de $Z_{\Omega}^{x_0}$ (2.43) seulement par les termes $ik \left[\sum_{m=1}^{\infty} (x_m e^{-i\omega_m \tau} + c.c.) \right]$ dans l'exposant. Ces termes sont traités comme des termes quadratiques qui ramènent l'exposant à la forme

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\beta M \sum_{m=1}^{\infty} [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)] \left[\left(x_m^{re} - ik \frac{1}{\beta [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]} \cos \omega_m \tau \right)^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(x_m^{im} - ik \frac{1}{\beta [\omega_m^2 + \Omega^2(x_0)]} \sin \omega_m \tau \right)^2 \right] - \frac{a^2(x_0)}{2} k^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Les intégrations gaussiennes sur x_m^{re} et x_m^{im} sont maintenant évaluées, et produisent un facteur $Z_{\Omega}^{x_0}$, qui simplifie la constante de normalisation dans (2.49). Le résultat est:

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ikx_0 - a^2(x_0)k^2/2) \tilde{V}(k). \quad (2.60)$$

L'intégration sur k nous donne

$$\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = V_{a^2}(x_0) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'_0}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(-\frac{1}{2a^2}(x' - x_0)^2\right) V(x'_0). \quad (2.61)$$

Cette valeur moyenne $\langle V(x(\tau)) \rangle_{\Omega}^{x_0} = V_{a^2}(x_0)$ du potentiel provient de l'intégrale de convolution du potentiel original avec une distribution gaussienne de largeur $a^2(x_0)$. L'intégrale de convolution macule « smears » le potentiel original $V(x_0)$ sur une longueur d'échelle $a(x_0)$. De cette façon l'approximation tient compte des fluctuations de la mécanique statistique.

Nous obtenons l'approximation du potentiel effectif classique,

$$W_1(x_0) \equiv F_{\Omega}^{x_0} + V_{a^2}(x_0) - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0), \quad (2.62)$$

A l'aide de l'inégalité de Jensen-Peierls, nous avons

$$W_1(x_0) \geq V^{\text{eff,clas}}(x_0). \quad (2.63)$$

Une minimisation de $W_1(x_0)$ par rapport à $\Omega^2(x_0)$ produit une limite supérieure.

2-3-4. Limite supérieure optimale.

Nous déterminons maintenant la fréquence $\Omega(x_0)$ de l'oscillateur d'essai qui optimise la limite supérieure dans l'inégalité (2.63). La dérivée de $W_1(x_0)$ par rapport à $\Omega^2(x_0)$, nous donne deux termes:

$$\frac{dW_1(x_0)}{d\Omega^2(x_0)} = \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} + \frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} \bigg|_{\Omega(x_0)} \frac{\partial a^2(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)}$$

Le premier terme est :

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial \Omega^2(x_0)} = \frac{M}{2} \left\{ \frac{1}{\beta M \Omega^2(x_0)} \left[\frac{\hbar \Omega \beta}{2} \coth\left(\frac{\hbar \Omega \beta}{2}\right) - 1 \right] - a^2(x_0) \right\}, \quad (2.64)$$

qui s'annule automatiquement. Nous avons seulement à minimiser $W_1(x_0)$ par rapport à $a^2(x_0)$ satisfaisant la condition

$$\frac{\partial W_1(x_0)}{\partial a^2(x_0)} = 0.$$

Insérons (2.62) dans cette dernière équation pour déterminer la fréquence d'essai.

$$\Omega^2(x_0) = \frac{2}{M} \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)}. \quad (2.65)$$

Dans l'intégrale de Fourier (2.60) pour $\partial V_{a^2}(x_0)$, la dérivée $2 \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)}$ est représentée par

un facteur $-k^2$, qui est équivalent à $\frac{\partial}{\partial x_0^2}$. Cela conduit à l'équation :

$$\Omega^2(x_0) = \frac{1}{M} \left[\frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2(x_0)} \right]_{a^2=a^2(x_0)} \quad (2.66)$$

Le potentiel $W_1(x_0)$ avec l'extremum $\Omega^2(x_0)$ et $a^2(x_0)$ associés constituent l'approximation de Feynman-Kleinert du potentiel effectif classique $V^{\text{eff.clas}}(x_0)$. Dans l'équation (2.62) $\Omega^2(x_0)$ et $a^2(x_0)$ sont considérés comme des paramètres variationnels arbitraires.

A partir de l'extremum de $W_1(x_0)$, nous obtenons l'approximation de la fonction de partition et de l'énergie libre.

$$Z_1 = \exp(-\beta F_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\hbar^2\beta\pi/M}} \exp[-\beta W_1(x_0)] \leq Z. \quad (2.67)$$

2-3-5 . La précision de l'approximation.

La précision de l'approximation du potentiel effectif classique $W_1(x_0)$ est en général assez bonne, en effet, dans la limite des hautes températures l'approximation est parfaite. L'approximation $W_1(x_0)$ tend vers le potentiel classique $V(x_0)$ de la même façon que le vrai potentiel effectif classique. Par contre, dans la limite des basses températures, l'intégrale sur x_0 dans (2.67) est dominée par le minimum de $W_1(x_0)$, qui donne l'approximation F_1 de l'énergie libre, en prenant la limite $T \rightarrow 0$ dans (2.62), nous voyons que :

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) = V_{a^2}(x_0) + \left[\frac{\hbar\Omega(x_0)}{2} - \frac{M}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) \right]. \quad (2.68)$$

Dans la même limite (2.55) donne

$$\lim_{T \rightarrow 0} a^2(x_0) = \frac{\hbar}{2M\Omega(x_0)}, \quad (2.69)$$

Ainsi que,

$$\lim_{T \rightarrow 0} W_1(x_0) = V_{a^2}(x_0) + \frac{\hbar\Omega(x_0)}{4} = \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \quad (2.70)$$

Le dernier membre de l'égalité (2.70) n'est autre que la valeur moyenne de l'opérateur hamiltonien.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(x), \quad (2.71)$$

En effet,

$$\langle \hat{H} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) = \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{M a^2(x_0)} + V_{a^2}(x_0). \quad (2.72)$$

où $\psi(x)$ est donnée par :

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{1}{4a^2}(x-x_0)^2\right]. \quad (2.73)$$

Soit E_1 le minimum de cette valeur moyenne sous la variation de x_0 et a^2 :

$$E_1 = \min_{x_0, a^2} \langle \hat{H} \rangle_{\psi}. \quad (2.74)$$

Dans la limite des basses températures, l'approximation F_1 de l'énergie libre converge vers E_1 .

$$\lim_{T \rightarrow 0} F_1 = E_1. \quad (2.75)$$

L'approximation du potentiel effectif classique pour toutes les températures et les valeurs de x_0 est plus précise que l'estimation de l'énergie de l'état fondamental E_0 par le minimum de la valeur moyenne (2.74) de l'opérateur hamiltonien.

2-3-6. Corrections systématiques.

Une correction systématique à l'approche variationnelle conduit à une expression de la perturbation variationnelle pour le potentiel effectif classique du système de la mécanique quantique [13]. Pour ce type de correction, nous exprimons l'action en série des écarts des chemins par rapport à la position moyenne $x_0 = \bar{x}$:

$$x'(\tau) \equiv x(\tau) - x_0, \quad (2.76)$$

donc,

$$\mathcal{A} = V(x_0) + \mathcal{A}_\Omega^{x_0} + \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}, \quad (2.77)$$

où $\mathcal{A}_\Omega^{x_0}$ est l'action d'essai des fluctuations de $x(\tau)$,

$$\mathcal{A}_\Omega^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau M \left[\frac{\dot{x}'^2}{2} + \Omega^2(x_0)x'^2(\tau) \right], \quad (2.78)$$

et $\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}$ leur interaction,

$$\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \frac{M}{2} \left[\frac{V''(x_0)}{2!} x'(\tau)^2 + \frac{V'''(x_0)}{3!} x'(\tau)^3 + \frac{V^{(4)}(x_0)}{4!} x'(\tau)^4 + \dots \right]. \quad (2.79)$$

L'approximation Feynman-Kleinert de la fonction de partition effective classique s'écrit donc :

$$W_1(x_0) \equiv F_\Omega^{x_0} + V_{a^2}(x_0) + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0}. \quad (2.80)$$

Pour généraliser cette décomposition, nous remplaçons l'énergie libre locale $F_\Omega^{x_0}$ par $F_\Omega^{x_0} + \Delta F^{x_0}$, où,

$$\Delta F^{x_0} = -\frac{1}{2! \hbar^2 \beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \frac{1}{3! \hbar^3 \beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \dots \quad (2.81)$$

Cela conduit à l'expression de la perturbation variationnelle du potentiel effectif classique:

$$V^{\text{eff,clas}}(x_0) \equiv E_{\Omega}^{x_0} + V_{a^2}(x_0) + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0} - \frac{1}{2! \hbar^2 \beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \frac{1}{3! \hbar^3 \beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \dots \quad (2.82)$$

en de valeurs moyennes reliées par des séries d'interactions

$$\langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} \equiv \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega}^{x_0} - \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0 2}$$

$$\langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} \equiv \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega}^{x_0} - 3 \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0} + 2 \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0 3}, \quad (2.83)$$

Par construction, la somme infinie (2.82) est indépendante du choix de la fréquence $\Omega(x_0)$.

Dans nos applications il est suffisant de travailler avec l'approximation au troisième ordre.

$$W_1(x_0) \equiv E_{\Omega}^{x_0} + V_{a^2}(x_0) + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0} - \frac{1}{2! \hbar^2 \beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} + \frac{1}{3! \hbar^3 \beta} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} \quad (2.84)$$

Chapitre 3.

Traduction :

Z. Naturforsch. 47 a 1013-1016 (1992).

M. Bentaiba, L. Chetouani and T.F.Hammann.*

Traitement d'une classe des oscillateurs harmoniques par l'approche des intégrales de chemin de Feynman-Kleinert.

Résumé. - *La méthode de Feynman-Kleinert est appliquée à la classe de potentiel de l'oscillateur harmonique obtenue à travers la méthode de factorisation de la supersymétrie de la mécanique quantique. Il est trouvé que l'énergie libre est en bon accord avec l'énergie de l'oscillateur harmonique.*

Feynman-Kleinert 's Treatment of a Class of Harmonic-Oscillators.

Abstract. - *The Feynman-Kleinert method is applied to harmonic oscillator class of potentials obtained through the factorisation method of quantum mechanics. It is found that the free energy is in good agreement with the exact energy of the harmonic oscillator.*

Nous appliquons la méthode d'approximation de Feynman-Kleinert [9,11,12] à une classe de potentiel reliée à l'oscillateur harmonique obtenue à l'aide de la méthode de factorisation de la supersymétrie de la mécanique quantique [51].

Le calcul analytique exact du propagateur *via* l'approche des intégrales de chemin n'est pas tout à fait au point, malgré le progrès considérable dans ce domaine grâce à l'introduction du paramètre temps [8] et la reparamétrisation des chemins.

Nous allons rappeler les principales étapes de la méthode de Feynman-Kleinert, et qui consiste à la représentation de l'intégrale de chemin de la fonction de partition [6] en mécanique quantique (nous prendrons dans toute la suite; $M = \hbar = 1$)

$$Z = \exp(-\beta F) \equiv \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \left(\frac{\dot{x}^2(\tau)}{2} + V(x(\tau)) \right) \right\}$$

$$= \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \left[\prod_{m=1}^{\infty} \int \frac{dx_m^{re} dx_m^{im}}{\pi/(\beta\omega_m^2)} \exp \left\{ -\beta \sum_{m=1}^{\infty} \omega_m^2 |x_m|^2 - \int_0^\beta d\tau V(x(\tau)) \right\} \right] \quad (1)$$

avec $\omega_m = 2\pi m/\beta$.

Les intégrations sur x_m^{re} et x_m^{im} , pour $m > 0$ convergent rapidement, laissant l'intégration sur x_0 .

$$Z = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp \{ -\beta W(x_0) \} \quad (2)$$

où,

$$W(x_0) \approx W_1(x_0) = \min_{a^2, \Omega} \left[\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0)) \right], \quad (3)$$

$a^2(x_0)$ et $\Omega(x_0)$ sont deux fonctions arbitraires de x_0 , et

$$\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0)) = \frac{1}{\beta} \text{Ln} \left[\frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{(\beta\Omega/2)} \right] - \frac{\Omega^2 a^2}{2} + V_{a^2}(x_0), \quad (4)$$

où Ω est un paramètre permettant de définir le potentiel auxiliaire $\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ et $V_{a^2}(x_0)$ le potentiel de Gauss, défini par:

$$V_{a^2}(x) \equiv \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp \left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2} \right] V(x_0), \quad (5)$$

avec a^2 est un paramètre inconnu.

La limite classique de la fonction de partition est recherchée pour les températures élevées ($T \rightarrow \infty$), pour lesquelles $W(x_0)$ tend vers $V(x_0)$ et cependant.

$$Z \rightarrow Z_{\text{cla}} = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp[-\beta V(x_0)]. \quad (6)$$

Nous pouvons dire aussi, à cause de l'analogie avec la limite classique $W(x_0)$ tend vers $V(x_0)$, $W(x_0)$ est le potentiel effectif classique, et que l'intégrale (2) est la fonction de partition effective.

Une relation entre les paramètres a^2 et Ω peut être établie à travers la minimisation de $\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ par rapport à Ω . Ainsi pour chaque valeur de x_0 , nous obtenons la relation ;

$$a^2 = \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[\frac{\beta\Omega}{2} \coth \frac{\beta\Omega}{2} - 1 \right] \quad (7)$$

La minimisation de $\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ par rapport à $a^2(x_0)$, nous permet de déterminer $\Omega^2(x_0)$,

$$\Omega^2(x_0) = 2 \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2} = \frac{\partial^2 V_{a^2}(x_0)}{\partial x_0^2} \quad (8)$$

Les équations (3) - (5) ont été obtenues à partir de la fonction de partition d'essai Z , le fait que son énergie potentielle sur les composantes x_m ($m \neq 0$) ayant été approchée par un potentiel de Gauss, accordant à l'équation,

$$Z_1 \equiv \exp(-\beta F) = \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \left\{ \frac{\dot{x}^2(\tau)}{2} + \frac{\Omega^2(x_0)}{2} (x(\tau) - x_0)^2 \right\} - \beta L_1(x_0) \right\}, \quad (9)$$

où $\Omega^2(x_0)$ est une courbure locale est arbitraire du potentiel, et où $L_1(x_0)$ est le potentiel d'essai dépendant seulement de la coordonnée moyenne x_0 . Les fonctions $\Omega(x_0)$ et $L_1(x_0)$ sont déterminées par le principe d'extremum. Ainsi (9) se réduit à une simple intégrale sur x_0 .

$$Z_1 = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \frac{\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh(\beta\Omega(x_0)/2)} \exp\{-\beta L_1(x_0)\}, \quad (10)$$

où $L_1(x_0)$ est donnée par la relation suivante ;

$$L_1(x_0) = V_{a^2(x_0)}(x_0) - \Omega^2(x_0)a^2(x_0)/2 \quad (11)$$

On peut voir que (10) et (2) sont similaires. L'exemple que nous allons étudier dans cet article est la famille de potentiels de l'oscillateur harmonique obtenue par la méthode de factorisation de la supersymétrie de la mécanique quantique [51].

Plusieurs potentiels ont été étudiés : Le potentiel de Coulomb [52], l'oscillateur anharmonique [9,11,12], le potentiel de Yukawa [9,11,12] et l'oscillateur harmonique plus la distribution de Dirac [53].

Nous allons maintenant appliquer la méthode de Feynman-Kleinert à la classe de potentiels des oscillateurs harmoniques. Ces potentiels, nous allons les obtenir à travers la méthode de factorisation.

$$H + \frac{1}{2} = aa^+, \quad (12)$$

où H est l'opérateur hamiltonien, a^+ et a sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation définis par ;

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dx} + x \right), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dx} + x \right)$$

Nous définissons maintenant deux nouveaux opérateurs,

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dx} + \beta(x) \right), \quad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dx} + \beta(x) \right), \quad (13)$$

et nous imposons la condition suivante :

$$H + \frac{1}{2} = bb^+, \quad (14)$$

qui nous conduit à,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \beta' + \beta^2 \right] \quad , \quad (15)$$

où $\beta' = d\beta/dx$.

Par conséquent, nous obtenons l'équation différentielle de Riccati pour β tel que ;

$$\beta' + \beta^2 = 1 + x^2 \quad ,$$

dont la solution est donnée par :

$$\beta(x) = x + \phi(x) \quad , \quad (16)$$

où ,

$$\phi(x) = \frac{\exp(-x^2)}{\gamma + \int_0^x dx' \exp(-x'^2)} \quad , \quad \gamma \in \mathcal{R} \quad .$$

La relation entre l'hamiltonien et l'hamiltonien modifié de l'oscillateur harmonique est :

$$H' = H - \frac{d\phi(x)}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad , \quad (17)$$

avec,

$$V(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{d}{dx} \left[\frac{\exp(-x^2)}{\gamma + \int_0^x dx' \exp(-x'^2)} \right] \quad (18)$$

Ce potentiel (18) peut se mettre sous la forme suivante :

$$V(x) = \frac{x^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} g_n x^n, \quad -\infty < x < +\infty, \quad (19)$$

avec, $g_n \rightarrow 0$, lorsque $|\gamma| \rightarrow \infty$.

Si $|\gamma| > \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$, le potentiel $V(x)$ n'a pas de singularités et se conduit comme $x^2/2$, lorsque $x \rightarrow \pm\infty$, nous obtenons ici une famille à un paramètre des hamiltoniens self-adjoints dans $L^2(\mathcal{R})$. Il est à noter que les valeurs propres de H et H' sont les mêmes.

$$H'\phi_n(x) = (n+1)\phi_n(x), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \infty \quad (20)$$

où les fonctions propres $\psi_n(x)$ et $\phi_n(x)$ de l'oscillateur harmonique et de la classe de l'oscillateur harmonique modifiée sont reliées par :

$$\phi_n(x) \equiv b^+ \psi_{n-1}(x) \quad (21)$$

En particulier, pour l'état fondamental, nous avons :

$$\phi_0(x) = C_0 e^{-x^2/2} \exp\left\{-\int_0^x \phi(x') dx'\right\} \quad (22)$$

Nous donnons la table 1 ci-dessous, où nous comparons l'énergie variationnelle $E^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_1$, obtenue à l'aide d'une fonction d'onde d'essai de Gauss, avec l'énergie exacte E_{ex}^0 de l'état fondamental. Les valeurs de la variation de l'énergie entre le premier état excité et l'état fondamental sont données par $\Delta E_{ex}^0 = E_{ex}^1 - E_{ex}^0$ (5^e colonne) où elles sont

en bon accord avec $\Omega(0)$, à $T = 0$. Nous traçons quatre figures, où nous représentons F_{ex} (énergie libre exacte), F_1 (énergie libre calculée par la méthode de Feynman-Kleinert), et F_{cl} (classique) en fonction de $\beta = 1/T$, pour les valeurs de $\gamma = 0.9$, 1.0 , 3.0 et 5.0 respectivement.

$ \gamma $	E^0	E_{ex}^0	E_{ex}^1	ΔE_{ex}^0	$\Omega(0)$	$a^2(0)$
0.9	0.5350	0.4962	1.4962	1.0225	0.8895	0.7889
1.0	0.5211	0.4975	1.4975	1.0065	0.8952	0.6455
1.5	0.5088	0.4990	1.4991	1.0031	0.8983	0.5221
2.0	0.5035	0.4996	1.4995	1.0022	0.9350	0.4858
3.0	0.5012	0.4999	1.4999	1.0005	0.9543	0.4832
5.0	0.5006	0.4999	1.4999	1.0002	0.9860	0.4806

Table 1: Comparaison de l'énergie variationnelle $E^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_1$, obtenue à l'aide d'une fonction d'onde d'essai gaussienne, avec une énergie de l'état fondamental E_{ex}^0 . La variation $\Delta E_{ex}^0 = E_{ex}^1 - E_{ex}^0$ du premier état excité (5^e colonne), qui est approché par la valeur de $\Omega(0)$.

Pour conclure, nous pouvons dire que l'approximation semi-classique proposée par Feynman-Kleinert[9,11,17], appliquée à la classe de potentiels obtenue par la méthode de factorisation[51], conduit à des résultats, qui sont en très bon accord avec les énergies libres exactes, pour toutes les températures. La différence maximale, observée pour $|\gamma| = 0.9$, n'excède pas les 4%. Aux basses températures ($\beta > 0$), l'énergie semi-classique tend vers l'énergie de l'état fondamental E_0 .

Les Graphes.

M. Bentaiba et al. · Feynman-Kleinert's Treatment of a Class of Harmonic-Oscillators

1015

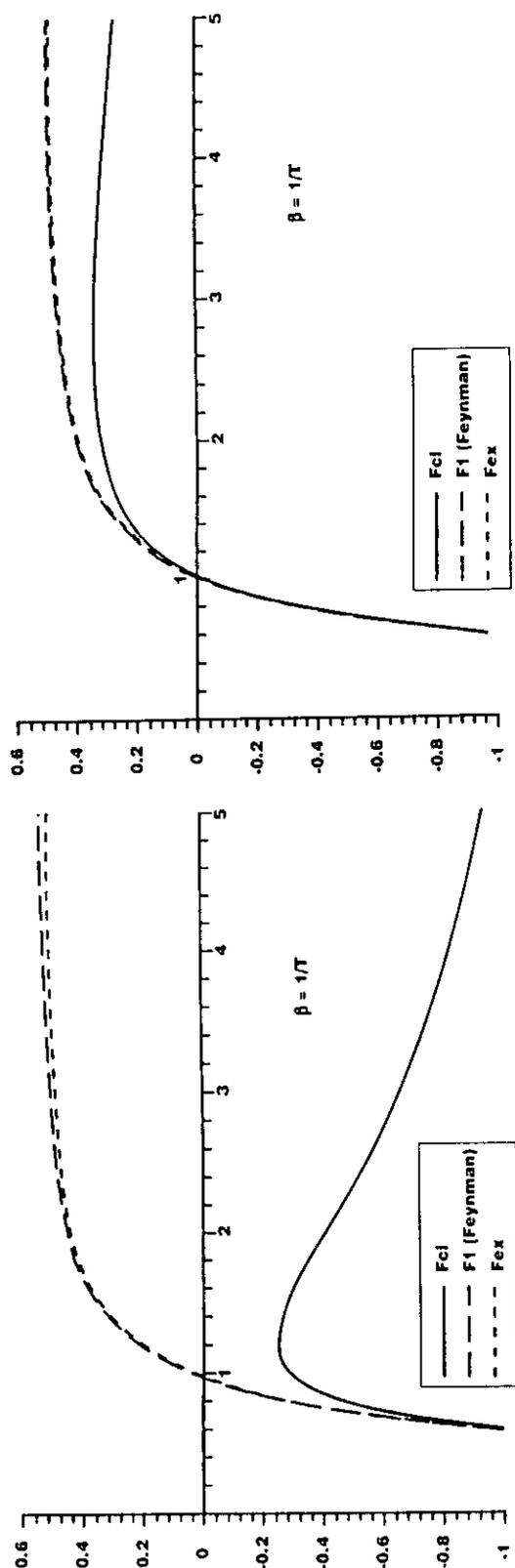


Fig. 1. F_{ex} , F_{01} , F_1 , for $\gamma = 0.9$, versus $\beta = 1/T$.

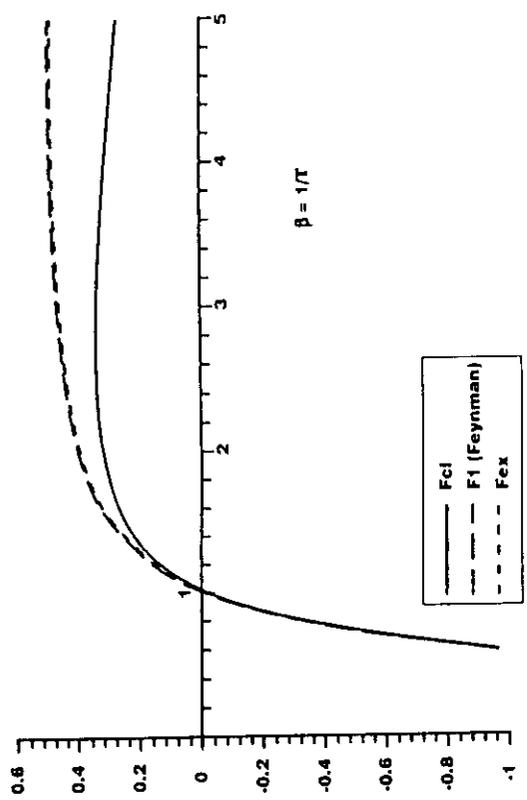


Fig. 3. F_{ex} , F_{01} , F_1 , for $\gamma = 3$, versus $\beta = 1/T$.

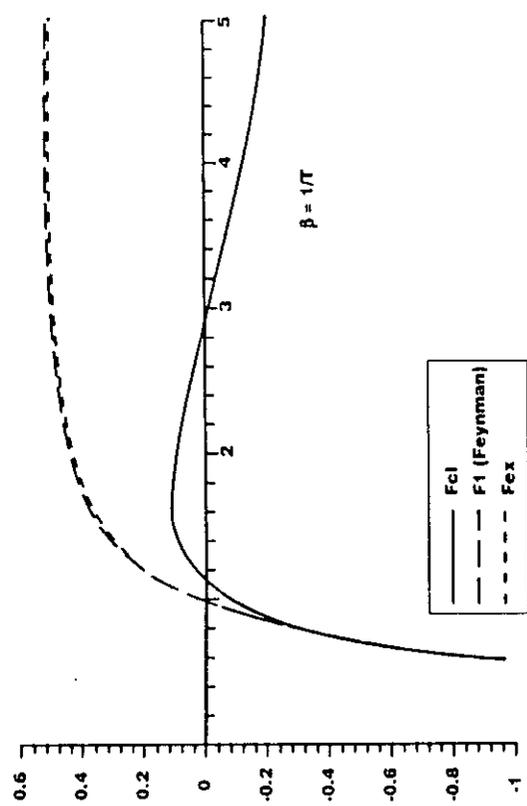


Fig. 2. F_{ex} , F_{01} , F_1 , for $\gamma = 1$, versus $\beta = 1/T$.

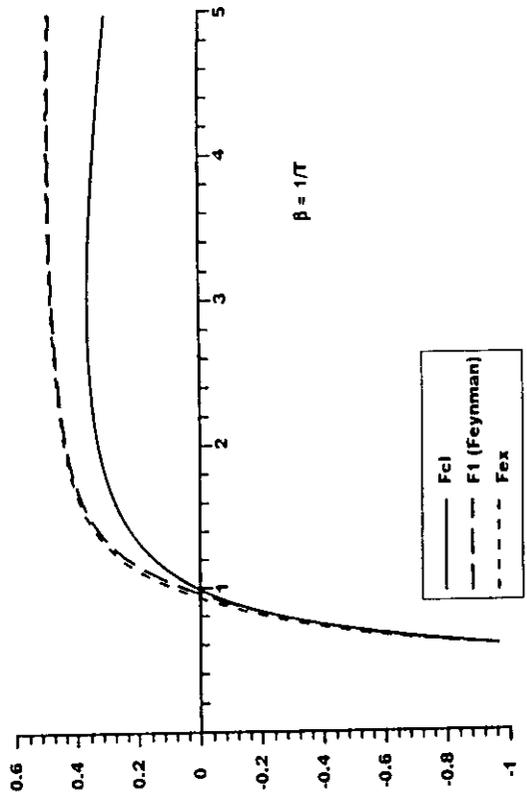


Fig. 4. F_{ex} , F_{01} , F_1 , for $\gamma = 5$, versus $\beta = 1/T$.

Traduction :

Physics Letters A 189 (1994) 433-438 .

M.Bentaiba , L . Chetouani and T.F.Hammann .*

Traitement par la méthode de Feynman-Kleinert du potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie .

Résumé : - *L'approximation de Feynman-Kleinert des intégrales de parcours, avec les corrections systématiques au calcul variationnel du potentiel effectif classique, est appliqué à l'oscillateur de Morse généralisé par la supersymétrie. Il est trouvé que les corrections systématiques à l'approximation Feynman-Kleinert sont extrêmement précises.*

Feynman-Kleinert treatment of the supersymmetric generalisation of the Morse potential.

Abstract :- *The Feynman-Kleinert approximation to path-integrals, with systematic corrections to the variational calculation of the effective classical potential, is applied to the Morse oscillator generalized by supersymmetry. It is found that this systematic improvement scheme of the Feynman-Kleinert approximation to path-integrals is extremely accurate.*

L'objet de cet article est d'appliquer l'approximation de Feynman-Kleinert (F-K) [6,9-12], basée sur le potentiel d'essai de l'oscillateur harmonique local et l'inégalité de Jensen-Peierls pour le traitement du potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie de la mécanique quantique [54], en tenant compte des améliorations récemment proposées par Kleinert [13] pour le calcul variationnel du potentiel effectif classique. Le calcul analytique exact du propagateur *via* l'approche des intégrales de parcours n'est pas tout à fait au point, malgré le progrès considérable dans ce domaine grâce à l'introduction du paramètre temps [8] et la reparamétrisation des chemins.

La méthode Feynman-Kleinert [6,9-12] permet une bonne approximation des intégrales de parcours lorsque le calcul analytique exact du propagateur ne peut pas être réalisé.

Nous allons résumer les principales étapes de la méthode comme suit:

En mécanique quantique, la fonction de partition d'une particule de masse M soumise à un potentiel à une dimension $V(x)$, peut être exprimé comme une intégrale dans l'espace des phases classique,

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\beta\left[p^2/2M + V_{\text{eff,clas}}(x_0)\right]\right\} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \exp\left[-\beta V_{\text{eff,clas}}(x_0)\right], \end{aligned} \quad (1)$$

où $\beta = 1/k_B T$, k_B étant la constante de Boltzmann.

Dans l'équation(1) la variable d'intégration x_0 est la position à une température moyenne,

$$\bar{x} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau) ,$$

de la fluctuation du chemin. Le potentiel effectif classique $V_{\text{eff,clas}}(x_0)$ ne doit être confondu avec le potentiel conventionnel de la théorie des champs [55,56].

Pour des potentiels $V(x)$, une approximation très satisfaisante des intégrales (1) peut être obtenue, et qui conduit à une limite supérieure $W_1(x_0)$ de $V_{\text{eff,clas}}(x_0)$. En effet il est possible de :

i) calculer une version maculée (smeared) du potentiel $V(x)$ comme suit :

$$V_{a^2}(x_0) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'_0}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(-\frac{1}{2a^2}(x' - x_0)^2\right) V(x'_0) \quad (2)$$

avec un paramètre de largeur a^2 inconnu,

ii) introduire un second paramètre Ω , et établir le potentiel auxiliaire

$$\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0)) = \frac{1}{\beta} \text{Ln} \left[\frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{(\beta\Omega/2)} \right] - \frac{\Omega^2 a^2}{2} + V_{a^2}(x_0) , \quad (3)$$

iii) considérer $a^2(x_0)$ et $\Omega(x_0)$ comme deux fonctions arbitraires de x_0 , et calculer par itération à chaque point x_0 le minimum $\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ par rapport à a^2 et Ω . Le résultat est alors l'approximation anticipée du potentiel effectif,

$$W_1(x_0) = \min_{a^2, \Omega} \left[\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0)) \right], \quad (4)$$

Plus explicitement, la minimisation par rapport à Ω donne la relation suivante entre Ω et a^2 , à chaque point x_0 ,

$$a^2 = \frac{1}{M\beta\Omega^2} \left[\frac{\beta\Omega}{2} \coth \frac{\beta\Omega}{2} - 1 \right], \quad (5)$$

par contre la minimisation par rapport à a^2 détermine Ω^2 comme une fonction du potentiel $V_{a^2}(x_0)$,

$$\Omega^2(x_0) = 2 \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{M \partial a^2} = \frac{\partial^2 V_{a^2}(x_0)}{M \partial x_0^2} \quad (6)$$

Nous donnons quelques justifications de toutes ces règles comme suit: nous utilisons la fonction de partition d'essai d'un oscillateur harmonique centré en x_0 avec une action locale

$$\mathcal{A}_\Omega^{x_0} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left[\frac{\dot{x}^2}{2} + \Omega^2(x_0) \frac{(x - x_0)^2}{2} \right], \quad (7)$$

où nous posons $M = \hbar = 1$.

La fonction de partition locale peut être définie par

$$\begin{aligned} Z_\Omega^{x_0} &= \exp[-\beta V_\Omega^{x_0}] \equiv \int \mathcal{D}x(\tau) \delta(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}_\Omega^{x_0}) \\ &= \frac{\frac{1}{2} \beta \Omega(x_0)}{\sinh\left(\frac{1}{2} \beta \Omega(x_0)\right)}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\text{où } \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) = \sqrt{2\pi\beta} \delta(\bar{x} - x_0) \quad (9)$$

Les valeurs moyennes par rapport à la fonction de partition locale seront notées par $\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0}$, c'est à dire,

$$\langle \dots \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv \left[Z_{\Omega}^{x_0} \right]^{-1} \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}) \dots \quad (10)$$

Ainsi en utilisant les équations (8), (10), nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}) &\equiv \int \mathcal{D}x \bar{\delta}(\bar{x} - x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}) \exp(-(\mathcal{A} - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0})) \\ &= \langle \exp(-(\mathcal{A} - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0})) \rangle_{\Omega}^{x_0} , \end{aligned} \quad (11)$$

où \mathcal{A} est l'action euclidienne donnée par :

$$\mathcal{A} = \int_0^{\beta} d\tau \left[\frac{\dot{x}^2}{2} + V(x(\tau)) \right] \quad (12)$$

L'inégalité de Jensen-Peierls,

$$\langle \exp(-(\mathcal{A} - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0})) \rangle_{\Omega}^{x_0} \geq \exp(-\langle \mathcal{A} - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0} \rangle) , \quad (13)$$

nous permet de déduire l'approximation de Feynman-Kleinert pour le potentiel effectif classique,

$$V_{\text{eff,clas}} \approx W_1(x_0) \equiv V_{\Omega}^{x_0} + V_{a^2}(x_0) - \frac{1}{2} \Omega^2(x_0) a^2(x_0) , \quad (14)$$

où les deux derniers termes sont donnés par les valeurs moyennes suivantes:

$$\frac{1}{\beta} \langle \mathcal{H} \rangle_{\Omega}^{x_0} = \langle V(x) \rangle_{\Omega}^{x_0} = V_{a^2}(x_0) , \quad (15a)$$

$$\frac{1}{\beta} \langle \mathcal{H}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0} = \frac{\Omega^2(x_0)}{2} \langle (x - x_0)^2 \rangle_{\Omega}^{x_0} \equiv \frac{\Omega^2(x_0) a^2(x_0)}{2} \quad (15b)$$

L'approximation de la fonction de partition peut être écrite alors:

$$Z_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp[-\beta W_1(x_0)] . \quad (16)$$

La limite classique de la fonction de partition est recherchée pour les températures élevées ($T \rightarrow \infty$), pour lesquelles $W_1(x_0)$ tend vers $V(x_0)$ et cependant.

$$Z \rightarrow Z_{\text{cla}} = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp[-\beta V(x_0)] . \quad (17)$$

conduisant à une énergie libre $F_1 = -\beta^{-1} \text{Ln}(Z_1)$, qui est une assez bonne description, pour toutes les températures, de $F = -\beta^{-1} \text{Ln}(Z)$, la vraie énergie libre du système.

Les potentiels suivants ont été traités *via* l'approximation Feynman-Kleinert (F-K), mais sans utiliser les corrections systématiques au calcul variationnel du potentiel effectif classique, l'oscillateur harmonique, le potentiel de Coulomb, le potentiel de Yukawa [10,11,12] l'oscillateur anharmonique plus la distribution de Dirac [50] et enfin la classe de l'oscillateur obtenue par la méthode de factorisation [15].

Le potentiel de Morse est utilisé dans plusieurs branches de la physique et de la chimie[57]. La méthode de factorisation nous permet d'obtenir de nouveaux potentiels solvables à partir de potentiels connus. Une classe de potentiels solvables reliée au potentiel de Morse, est ainsi obtenue.

Nous définissons les charges comme suit:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a^+ & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^+ = \begin{pmatrix} 0 & a \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

où a et a^+ sont des opérateurs de création et d'annihilation, l'hamiltonien supersymétrique s'écrit,

$$\mathcal{H}_{ss} = QQ^+ + Q^+Q = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^+a & 0 \\ 0 & aa^+ \end{pmatrix}, \quad (19)$$

où H_+ et H_- sont des opérateurs hamiltoniens partenaires supersymétriques. Excepté l'énergie de l'état fondamental, les spectres de H_{\pm} sont identiques.

Nous considérons l'hamiltonien factorisé comme suit :

$$H_+ = a^+a, \quad (20)$$

où,

$$a = \frac{d}{dx} + \lambda(1 - e^{-x}) - \frac{1}{2} \quad (21)$$

$$a^+ = -\frac{d}{dx} + \lambda(1 - e^{-x}) - \frac{1}{2}$$

λ est un paramètre caractérisant le potentiel de Morse [58] défini comme,

$$V_M(x) = \lambda^2(1 - e^{-x})^2 - \lambda + \frac{1}{4}, \quad (22)$$

où le terme constant $-\lambda + \frac{1}{4}$ est utilisé exclusivement pour déplacer le spectre d'énergie, de telle manière que l'énergie de l'état fondamental devient égal à zéro.

L'hamiltonien (20) s'écrit,

$$H_+ = -\frac{d^2}{dx^2} + \lambda^2(1 - e^{-x})^2 - \lambda + \frac{1}{4} \quad (23)$$

La relation de commutation entre les opérateurs a et a^+

$$[a^+, a] = -2\lambda e^{-x}, \quad (24)$$

les opérateurs a et a^+ sont définis par les relations (21), évidemment, ces deux opérateurs ne sont pas les opérateurs de création et d'annihilation habituels.

La relation de commutation (24), nous permet de définir l'hamiltonien supersymétrique H_- partenaire de l'hamiltonien supersymétrique H_+ (23),

$$H_- = aa^+ = a^+a + 2\lambda e^{-x}, \quad (25)$$

le potentiel correspondant est donné par

$$V_-(x) = \lambda^2(1 - e^{-x})^2 + 2\lambda e^{-x} - \lambda + \frac{1}{4}. \quad (26)$$

Les deux opérateurs hamiltoniens H_+ et H_- partenaires supersymétriques ont le même spectre d'énergies.

Nous appelons $\psi_{+,n}$ et $\psi_{-,n}$ les fonctions propres de H_+ et H_- , reliées par,

$$\psi_{+,n} = a\psi_{-,n}. \quad (27)$$

Un nouvel opérateur hamiltonien $\mathcal{H}_+ = A^+A$ avec un potentiel correspondant V_+ est défini à travers les relations suivantes,

$$A = \frac{d}{dx} + f(x), \quad A^+ = -\frac{d}{dx} + f(x) \quad (28)$$

Nous imposons à H_- la condition suivante:

$$H_- = AA^+, \quad (29)$$

nous obtenons l'équation différentielle de Riccati

$$\lambda^2(1 - e^{-x})^2 + 2\lambda e^{-x} - \lambda + \frac{1}{4} = \frac{d}{dx}f(x) + f^2(x), \quad (30)$$

dont la solution est facilement obtenue,

$$f(x) = \lambda(1 - e^{-x}) - \frac{1}{2} + \frac{\exp[-x(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x}]}{\Gamma + \int_0^x \exp[-x'(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x'}] dx'} , \quad (31)$$

où Γ est une constante d'intégration choisie positive de telle façon à éviter les singularités des potentiels. La relation de commutation entre les nouveaux opérateurs A et A^+ est donnée comme suit :

$$[A^+, A] = -2 \frac{d}{dx} f(x) = -2\lambda e^{-x} - 2 \frac{d}{dx} \phi(x) , \quad (32)$$

où,

$$\phi(x) = \frac{\exp[-x(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x}]}{\Gamma + \int_0^x \exp[-x'(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x'}] dx'} \quad (33)$$

Il est clair que pour le nouvel hamiltonien

$$\mathcal{H}_+ = A^+ A = A A^+ + [A^+, A] = A A^+ - 2\lambda e^{-x} - 2 \frac{d}{dx} \phi(x) , \quad (34)$$

A partir de la supersymétrie de la mécanique quantique, nous savons que le spectre d'énergies de \mathcal{H}_+ est le même que celui de H (sauf l'énergie de l'état fondamental), les fonctions propres $\Psi_{+,n}$ de \mathcal{H}_+ sont reliées aux fonctions propres $\psi_{-,n}$ de H par :

$$\Psi_{+,n} = A^+ \psi_{-,n} , \quad (36a)$$

avec,

$$A\Psi_{+,0} \equiv 0, \quad (36b)$$

pour l'état fondamental. Nous avons donc,

$$\Psi_{+,0} = \text{const} \times \exp\left[-y\left(\lambda - \frac{1}{2}\right)\right] \exp(-\lambda e^{-y}) \times \exp\left(-\int_0^y \phi(y') dy'\right) \quad (36c)$$

Les nouvelles fonctions $\Psi_{+,n}$ sont déterminées à partir des fonctions propres $\psi_{+,n}$ du potentiel de Morse original (équation(22)),

$$\Psi_{+,n} = A^+ a \psi_{+,n} \quad (37)$$

Nous appliquons maintenant la méthode de (F-K) [6,12] au potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie (équation(35)).

Le résultat obtenu à l'aide de cette dernière approximation est corrigé à l'aide des corrections systématiques de Kleinert[6], en exprimant l'action euclidienne (12) en série de fluctuations autour du temps moyen $x'(\tau) \equiv x(\tau) - x_0$, appelée

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}'^{x_0}, \quad (38)$$

où

$$\mathcal{A}_0 = \beta V_+(x_0)$$

et

$$\mathcal{A}'^{x_0} = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{\dot{x}'^2}{2} + \Omega^2(x_0) x'^2(\tau) \right], \quad (39a)$$

$$V_+^{x_0}(x') = \frac{V''(x_0)}{2!} x'(\tau)^2 + \frac{V'''(x_0)}{3!} x'(\tau)^3 + \frac{V^{(4)}(x_0)}{4!} x'(\tau)^4 + \dots \quad (39b)$$

Le terme $V_+'(x_0)$ n'apparaît pas dans le développement et c'est par définition

$$\bar{x}' \equiv \int_0^\beta d\tau x'(\tau) = 0$$

L'action \mathcal{A} définie par (38-39) peut être décomposée en une action d'interaction $\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} = \mathcal{A}^{x_0} - \mathcal{A}_{\Omega}^{x_0}$, et d'une interaction locale (7), l'exponentielle $\exp(-\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0})$ est alors remplacée par son expression en série au troisième ordre.

Les valeurs moyennes par rapport à la fonction de partition d'essai sont données par:

$$\exp(-\beta W_3^{x_0}) \equiv \exp\left[-\beta V_+(x_0) - \beta V_{\Omega}^{x_0} - \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0} + \frac{1}{2} \langle (\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0})^2 \rangle_{\Omega, c}^{x_0} - \frac{1}{6} \langle (\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0})^3 \rangle_{\Omega, c}^{x_0} \right], \quad (40)$$

l'indice c définit le lien entre les fonctions de corrélations, *via* l'expression,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} &\equiv \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega}^{x_0} - \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0 2} \\ \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 3} \rangle_{\Omega, c}^{x_0} &\equiv \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega}^{x_0} - 3 \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0 2} \rangle_{\Omega}^{x_0} \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0} + 2 \langle \mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0} \rangle_{\Omega}^{x_0 3}, \dots \end{aligned} \quad (41)$$

Il est à remarquer que l'approximation (F-K) concerne le premier terme de $\mathcal{A}_{\text{int}}^{x_0}$, par contre l'amélioration proposée par Kleinert [13] consiste à ajouter les deux derniers termes dans l'équation (40).

L'approximation de l'énergie libre locale du système est obtenue en minimisant $W_3^{x_0}$ par rapport à la fréquence d'essai. Pour exprimer l'énergie exacte du système, nous donnons la fonction de distribution [9]

$$\rho_{\text{ex}}(x', x) = \sum_n \Psi_{+,n}(x') \Psi_{+,n}^*(x) \exp(-\beta E_n) , \quad (42)$$

les fonctions propres $\Psi_{+,n}$ sont données par les équations (36) et (37) et les énergies E_n sont les énergies du système. La fonction de partition exacte du système est donnée par [2]

$$Z_{\text{ex}} = \int \rho_{\text{ex}}(x, x) dx . \quad (43)$$

La table 1 ci-dessous, nous permet de comparer la nouvelle approximation $E_3^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_3^0$ pour l'énergie de l'état fondamental du potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie, pour différentes valeurs de Γ , avec l'énergie exacte $E_{\text{ex}}^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_{\text{ex}}^0$ et avec l'énergie obtenue à l'aide de l'approximation Feynman-Kleinert $E_{\text{F-K}}^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_{\text{F-K}}^0$. Ici Γ est une constante arbitraire, positive de manière à éviter les singularités du potentiel.

Γ	E_1^0	E_3^0	E_{ex}^0
0.1	0.02710565	0.01759870	-0.012327
0.2	0.02294651	0.00650537	-0.012119
0.3	0.02159368	0.00159615	-0.011856
0.4	0.02090351	-0.00105377	-0.011691
0.5	0.02050745	-0.00265970	-0.011440
0.6	0.02024515	-0.00374707	-0.011183
0.7	0.02005869	-0.00453044	-0.010871
0.8	0.01991941	-0.00511917	-0.010723
0.9	0.01981127	-0.00557708	-0.010595
1.0	0.01972990	-0.00594789	-0.010468
2.0	0.01932791	-0.00764212	-0.010031
5.0	0.01911123	-0.00864442	-0.009506
10.0	0.01903456	-0.00898549	-0.009219

Table 1 : Les énergies de l'état fondamental (F-K) E_0^1 , les énergies améliorées par Kleinert E_3^0 , et les énergies exactes E_{ex}^0 , pour différentes valeurs du paramètre Γ du potentiel de Morse généralisé.

Nous traçons quatre figures (fig 1-4), sur chaque figure les trois courbes F_{ex} , F_{FK} , F_{cl} en fonction de $\beta = 1/T$, pour $\Gamma = 0.1$, 0.5 , 1.0 et 5.0 respectivement. La courbe $E_3^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_3$ n'apparaît pas sur les quatre figures puisqu'elle est confondue avec F_{ex} . Néanmoins les valeurs de F_3 sont données sur la table 1. Nous notons que toutes les courbes coïncident parfaitement aux basses valeurs de β , par contre les courbes F_{FK} et F_{ex} coïncident pour toutes les valeurs de β .

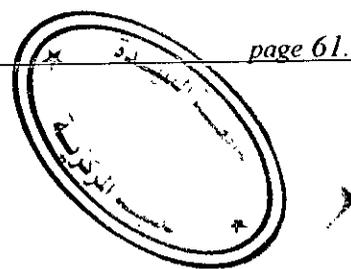


Nous traçons également le potentiel de Morse généralisé de l'équation (35), pour les différentes valeurs de Γ (fig 5). Il apparaît que si Γ est positive, le potentiel de Morse généralisé n'a pas de singularités et tend vers $V_M(x)$ de l'équation (22), pour $x \rightarrow \pm\infty$. Le spectre d'énergie du potentiel de Morse généralisé est identique au potentiel de Morse $V_M(x)$. Pour des valeurs de Γ finies le potentiel généralisé est différent du potentiel de Morse. Les deux potentiels sont identiques seulement pour $\Gamma = \infty$.

En conclusion, nous pouvons dire que l'approximation semi-classique proposée par Feynman-Kleinert[6,9-12] donne des résultats raisonnables et intéressants, lorsqu'elle est appliquée au potentiel de Morse généralisé par la supersymétrie de mécanique quantique, l'amélioration proposée par Kleinert[13] à l'approximation de Feynman-Kleinert est extrêmement précise.

La méthode Feynman-Kleinert donne des différences entre E_1^0 et E_{cx}^0 de l'ordre de 32% pour $\Gamma = 0.1$ et de l'ordre de 31% pour $\Gamma = 10$, par contre, en tenant compte des corrections systématiques, la différence est seulement de 23% pour $\Gamma = 0.1$, de 0.1% lorsque $\Gamma = 10$.

Ces résultats peuvent être compris en observant qu'en général la limite $E_3^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_3$, est égale au minimum à $T = 0$, de $W_3^{x_0}$ définie par (40).



Les Graphes:

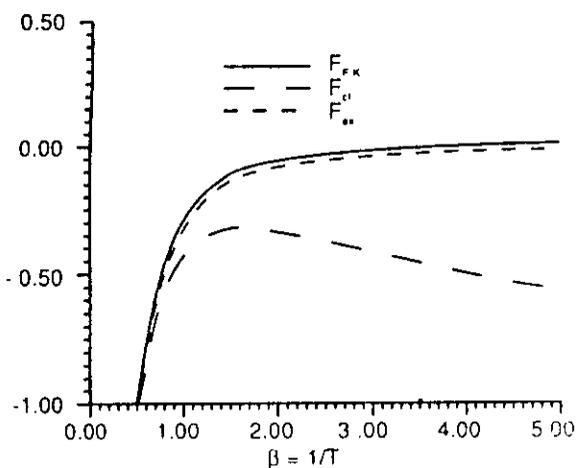


Fig. 1. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=0.1$, versus $\beta=1/T$.

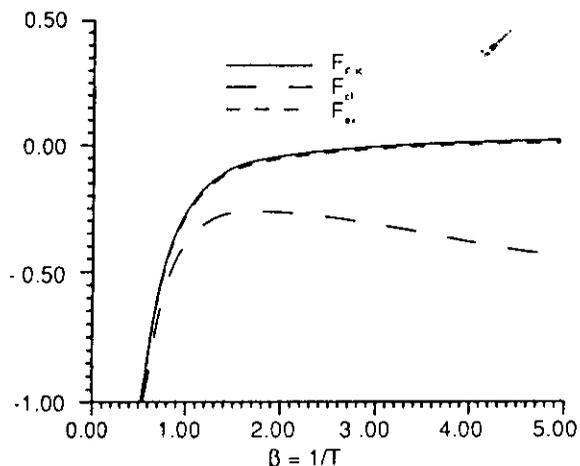


Fig. 3. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=1.0$, versus $\beta=1/T$.

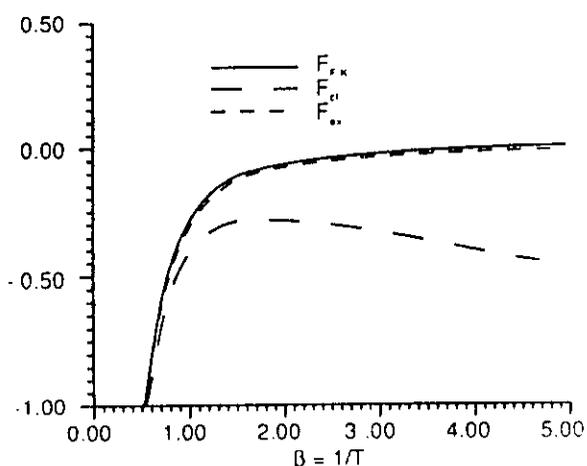


Fig. 2. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=0.5$, versus $\beta=1/T$.

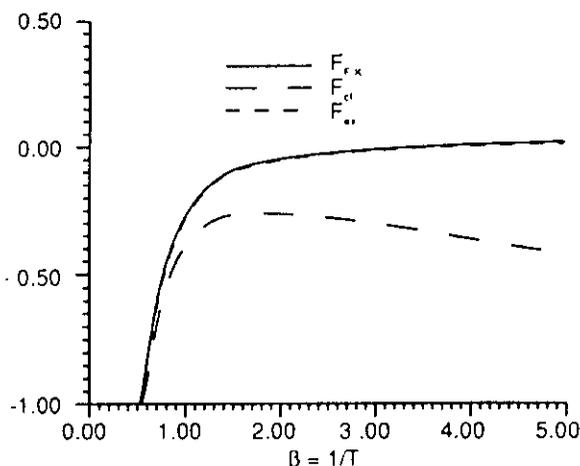


Fig. 4. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=5.0$, versus $\beta=1/T$.

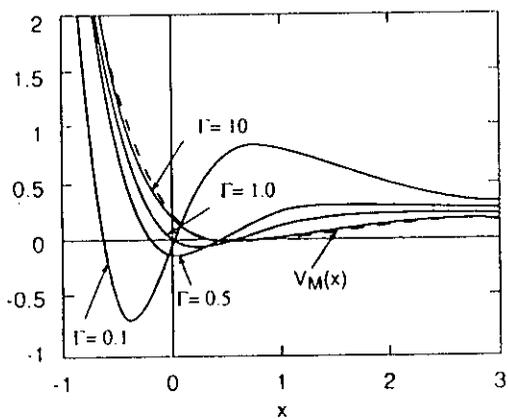


Fig. 5. One-dimensional generalized Morse potential $V_{\Gamma}(x)$ for various values of Γ (full lines) and Morse potential $V_M(x)$ (dotted line).

Chapitre 4.

4.1 Méthode de Duru -Kleinert généralisée.

4-1-1. Introduction.

La reparamétrisation des chemins dépendant du temps et la transformation des coordonnées ont été utilisées par Duru et Kleinert[18] pour ramener l'intégrale de chemin du potentiel de *Coulomb* à une intégrale de chemin de l'*oscillateur harmonique*, cette méthode peut être généralisée pour transformer des intégrales de chemin de formes inconnues à des intégrales de chemin de formes connues.

Pour mieux concevoir la méthode de Duru-Kleinert[18], nous allons commencer par détailler le cas simple des systèmes à une dimension[12], nous appliquons ensuite, la méthode à un système à deux dimensions [19].

4-1-2. La méthode de transformation dans le cas des systèmes à une dimension.

Dans un système à une dimension, l'opérateur hamiltonien est

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (4.1)$$

avec $\hat{T} = \hat{p}^2/2M$. Nous définissons un opérateur hamiltonien auxiliaire[8] comme suit,

$$\hat{\mathcal{H}}_E = \hat{H} - E. \quad (4.2)$$

Comme nous l'avons signalé dans l'introduction, le propagateur est la matrice de transformation dans l'algèbre de Heisenberg-Dirac[1,2,4,59], qui est équivalent à l'élément

de matrice de l'opérateur d'évolution $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)\hat{H}\right]$ pris entre deux positions. Nous appelons donc, le propagateur auxiliaire \mathcal{K} associé à l'opérateur hamiltonien auxiliaire $\hat{\mathcal{H}}_E$.

$$\mathcal{K}(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \langle x_b | \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)\hat{\mathcal{H}}_E\right] | x_a \rangle, \quad (4.3)$$

et la fonction de Green auxiliaire à énergie fixée peut s'écrire formellement comme :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x_b, x_a, E) &= \int_{t_a}^{\infty} dt_b \mathcal{K}(x_b, t_b; x_a, t_a) \\ &= \int_{t_b}^{\infty} dt_b \int \mathcal{D}x(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_E\right], \end{aligned} \quad (4.4)$$

avec une action,

$$\mathcal{A}_E = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{M}{2} \dot{x}^2(t) - V(x(t)) + E \right\}. \quad (4.5)$$

Nous définissons maintenant, un pseudo-hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_E^f$ dépendant de E ,

$$\hat{\mathcal{H}}_E^f = f_l(x) \hat{\mathcal{H}}_E f_r(x) = f_l(x) (\hat{H} - E) f_r(x), \quad (4.6)$$

$f_l(x)$ et $f_r(x)$ sont deux fonctions stabilisatrices (où "l" (left) et "r" (right)), définies comme suit:

$$f_l(x) f_r(x) \equiv f(x).$$

Cette fonction régularisatrice $f(x)$ est choisie positive afin d'éviter les singularités des chemins, est définie à travers la transformation du temps "t" au pseudo-temps "s" ($t \rightarrow s$)

$$dt = dsf(x) = dsf_1(x)f_r(x). \quad (4.7)$$

Le propagateur (4.3) devient,

$$\mathcal{K}^f(x_b, s_b; x_a, s_a) = f_r(x_b)f_l(x_a) \langle x_b | \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(s_b - s_a)\mathcal{H}_E^f\right] | x_a \rangle, \quad (4.8)$$

et la fonction de Green à énergie fixée associée est la même qu'avant,

$$\mathcal{G}(x_b, x_a; E) = \int_0^\infty ds \mathcal{K}^f(x_b, s_b; x_a, s_a). \quad (4.9)$$

ou formellement sous la forme intégrale,

$$\mathcal{G}(x_b, x_a; E) = \int_0^\infty ds \left[f_r(x_b)f_l(x_a) \int \mathcal{D}x(s) \exp(i\mathcal{A}_E^f/\hbar) \right], \quad (4.10)$$

avec une action

$$\mathcal{A}_E^f = \int_0^s ds \left\{ \frac{M}{2f(x(s))} \dot{x}^2(s) - f(x(s)) [V(x(s)) - E] \right\}. \quad (4.11)$$

L'introduction de la fonction régularisatrice $f(x)$ a induit un terme cinétique de forme non conventionnelle. Nous passons donc à une transformation de la coordonnée x afin de redonner une forme conventionnelle au terme cinétique dans (4.11),

$$x = h(q). \quad (4.12)$$

La différentielle de la coordonnée x se transforme comme,

$$dx = h'(q)dq, \quad (4.13)$$

en fait, nous avons pris $h(q)$ telle que;

$$h'^2(q) = f(h(q)), \quad (4.14)$$

sous cette transformation de la coordonnée l'action devient,

$$\mathcal{A}_E^{f,q} = \int_0^s ds \left\{ \frac{M}{2} q'^2(s) - f(q(s)) [V(q(s)) - E] \right\}, \quad (4.15)$$

où nous avons utilisé les notations suivantes,

$$f(q) \equiv f(h(q)) \quad , \quad V(q) \equiv V(h(q)) \quad (4.16)$$

Le terme cinétique dans (4.15) a maintenant la forme standard connue.

La fonction de Green est reliée à une fonction de Green relative à l'action (4.15), si cette dernière est étendue à un potentiel effectif dû à la transformation du temps,

$$V_{\text{eff}}(q) = -\frac{\hbar^2}{M} \left[\frac{1}{4} \frac{h'''}{h'} - \frac{3}{8} \left(\frac{h''}{h'} \right)^2 \right]. \quad (4.17)$$

Cette action étendue est,

$$\mathcal{A}_{E,\mathcal{E}}^{\text{DK}} = \int_0^s ds \left\{ \frac{M}{2} q'^2(s) - f(q(s)) [V(q(s)) - E] - V_{\text{eff}}(q(s)) + \mathcal{E} \right\}. \quad (4.18)$$

L'indice DK indique que cette action est obtenue à travers la généralisation de la procédure de Duru-Kleinert. La fonction de Green à pseudo-énergie fixée est donnée par,

$$\mathcal{G}(q_b, q_a; \mathcal{E}) = \int_0^\infty dS \int \mathcal{D}q(s) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{E, \mathcal{E}}^{\text{DK}}\right]. \quad (4.19)$$

La relation entre les fonctions de Green est donc,

$$\mathcal{G}(x_b, x_a; E) = [f(x_b)f(x_a)]^{1/4} \mathcal{G}(q_b, q_a; \mathcal{E} = 0). \quad (4.20)$$

Les trois actions $\mathcal{A}_E, \mathcal{A}_E^f, \mathcal{A}_{E, \mathcal{E}}^{\text{DK}}$ conduisent toutes à la fonction de Green à énergie fixée $\mathcal{G}(x_b, x_a; E)$ via (4.4), (4.10) et (4.19) avec (4.20) on l'appelle l'équivalent à la procédure Kleinert-Duru (D-K) [8,18].

Traduction :

J. Phys. I France 4 (1994) 7-27

*M. Bentaiba *, M. Benkaddour , L. Chetouani , et T.F. Hammann .*

Les solutions par les intégrales de parcours d'une classe de potentiels à deux dimensions d'un système avec des dégénérescences locales.

Résumé.- Le potentiel $V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}$ est étudié par les intégrales de parcours. La fonction de Green est calculée pour $E = 0$ et d quelconque, en coordonnées polaires et dans des coordonnées généralisant les coordonnées de Levi-Cevita. Il est montré que cette fonction de Green est la somme d'une partie discrète mais finie et d'une partie continue. Des cas limites et des cas particuliers sont étudiés.

Path-integral solutions for a class of 2D systems with local degeneracies .

Abstract.-The potential $V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}$ is studied via the path integral approach. The Green function is calculated for $E = 0$ and for any value of d in polar coordinates as well as in coordinates generalizing the Levi-Cevita transformation. It is shown that this Green function is the sum of a discrete but finite part and of a continuous part. Limiting cases will be investigated.

Classification

Physics bstracts

03.65B - 03.65D - 03.65G

1- Introduction.

Nous utilisons dans cet article le formalisme des intégrales de parcours de Feynman au calcul de la fonction de Green relative à la classe de potentiel définie par :

$$V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2} \quad (1)$$

Où α, β sont des paramètres positifs et d est un nombre rationnel positif ou nul. On peut voir pour :

$d = 1$ $V(r) = \alpha - \beta/r$ est le potentiel de Coulomb, et pour

$d = 2$ $V(r) = \alpha r^2 - \beta$ est l'oscillateur harmonique.

Cette classe de potentiel à deux dimensions a été étudiée récemment [60,61,62]. Il y a été montré notamment que l'état correspondant à $E = 0$ présentait une dégénérescence d'ordre multiple à cause de certaines propriétés de symétrie cachées (hidden).

Nous montrons, que la fonction de Green est calculable pour d quelconque et $E = 0$ en utilisant d'abord les coordonnées polaires. Or il est connu, par exemple pour le potentiel de Coulomb que la fonction de Green s'écrit sous forme compacte via la transformation de Levi-Cevita. Nous généralisons alors cette transformation pour d quelconque et calculons cette même fonction de Green. Nous sommes la série obtenue en coordonnées polaires en montrant qu'elle se compose de deux parties l'une discrète et finie de fonction de Green et l'autre continue. Nous étudions aussi quelques cas limites pour $E = 0$ et déduisons le spectre et la fonction d'onde pour E quelconque et $d = 1, 2$.

2. Fonctions de Green en coordonnées polaires.

Nous exprimons en coordonnées cartésiennes l'amplitude de probabilité, donnée sous la forme canonique de Feynman par :

$$K(\vec{r}_f, \vec{r}_i; T) = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p_x \mathcal{D}y \mathcal{D}p_y \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[p_x \dot{x} + p_y \dot{y} - \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} - V(x, y) \right] dt \right]. \quad (2)$$

Cette intégrale est purement formelle. La classe de potentiels radiaux $V(x, y)$ présente des singularités pour toutes les valeurs du nombre rationnel d , tel que $d \in [0, 2[$.

Nous faisons appel maintenant à la transformation Duru -Kleinert[12,63,64], qui consiste à choisir une fonction régulatrice approprié $f(\vec{r}) > 0$ afin d'éviter le problème des singularités (collapse). Nous utilisons la transformation temporaire $t \rightarrow s$ définie par :

$$dt = ds f(\vec{r}) = ds f_1(\vec{r}) f_r(\vec{r}) \quad (3)$$

C'est à dire sous forme discrète ,

$$\varepsilon = \varepsilon_s f_1(\vec{r}_n) f_r(\vec{r}_{n-1}) ; \quad T = (N+1)\varepsilon ; \quad S = (N+1)\varepsilon_s .$$

où f_1 et f_r sont deux fonctions régulatrices choisies d'une manière adéquate afin de stabiliser l'intégrale de chemin. Nous introduisons l'énergie E via la fonction de Green et nous posons dans tout ce qui suit ($m=1, \hbar=1$);

$$\begin{aligned} G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; E) &= \int_0^\infty dT. K(\vec{r}_f, \vec{r}_i; T) \exp(iET), \\ &= \int_0^\infty dS. P_E(\vec{r}_f, \vec{r}_i; S) . \end{aligned} \quad (4)$$

La nouvelle forme du noyau P_E est :

$$P_E^N(\bar{r}_f, \bar{r}_i; S) = \frac{f_r(\bar{r}_f) f_l(\bar{r}_i)}{2\pi i \epsilon_s f_l(\bar{r}_f) f_r(\bar{r}_i)} \prod_{n=1}^N \int \frac{d^2 r_n}{2\pi \epsilon_s f(\bar{r})} \exp(i A_E^N), \quad (5a)$$

où,

$$A_E^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{1}{2\epsilon_s f_l(\bar{r}_n) f_r(\bar{r}_{n-1})} (\bar{r}_n - \bar{r}_{n-1})^2 - \epsilon_s f_l(\bar{r}_n) [V(\bar{r}_n) - E] f_r(\bar{r}_{n-1}) \right], \quad (5b)$$

est la nouvelle action.

Une famille convenable de fonctions régulatrices est donnée par;

$$f_l(\bar{r}) = f(\bar{r})^{1-\lambda} \quad ; \quad f_r(\bar{r}) = f(\bar{r})^\lambda.$$

Nous posons $\lambda = 0$ pour simplifier le calcul. Les fonctions stabilisatrices sont alors;

$$f_l \equiv f \quad \text{et} \quad f_r \equiv 1$$

Notre potentiel étant central et puisque le problème est à deux dimensions, il est plus commode de passer au système de coordonnées polaires $(x, y) \rightarrow (r, \theta)$,

$$x = r \cos(\theta),$$

$$y = r \sin(\theta),$$

ou plutôt à la transformation $(x, y) \rightarrow (q, \theta)$ définie par les équations suivantes;

$$r = e^q, \quad -\infty < q < +\infty \quad \text{et} \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi, \quad (6)$$

afin d'éviter le problème du collapse.

L'action peut être écrite en termes des nouvelles coordonnées q et θ à travers les équations suivantes;

$$\begin{aligned} \Delta x_n &= x_n - x_{n-1} = r_n \cos \theta_n - r_{n-1} \cos \theta_{n-1}, & \Delta y_n &= y_n - y_{n-1} = r_n \sin \theta_n - r_{n-1} \sin \theta_{n-1}, \\ \Delta r_n &= \exp(q_n) - \exp(q_{n-1}), & \Delta q_n &= q_n - q_{n-1}, & \Delta \theta_n &= \theta_n - \theta_{n-1}. \end{aligned}$$

La fonction régularisatrice est définie comme suit :

$$f = \exp(2q).$$

Ainsi l'action prend la forme suivante :

$$A_E^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{1}{2\varepsilon_s} [(\Delta q_n)^2 + (\Delta \theta_n)^2] \right\} - \varepsilon_s [\alpha e^{2dq_n} - \beta e^{dq_n} - E e^{2q_n}] + \Delta A_n, \quad (7a)$$

où la correction relative à l'action peut être donnée explicitement par;

$$\Delta A_N = \frac{1}{2\varepsilon_s} \left\{ -(\Delta q_n)^3 + \frac{7}{12} (\Delta q_n)^4 - (\Delta q_n)(\Delta \theta_n)^2 + \frac{(\Delta q_n)^2 (\Delta \theta_n)^2}{2} - \frac{1}{12} (\Delta \theta_n)^4 \right\}. \quad (7b)$$

Nous intégrons sur les écarts au lieu des positions (x_n, y_n)

$$\prod_{n=1}^N \int dx_n dy_n = \prod_{n=2}^{N+1} \int d(\Delta x_n) d(\Delta y_n),$$

Le jacobien de la transformation est égal à;

$$J_{n-1} = \frac{\partial(\Delta x_n, \Delta y_n)}{\partial(\Delta q_n, \Delta \theta_n)} = \exp(2q_{n-1}),$$

La mesure de (5a) est donnée par;

$$\frac{1}{2\pi i \epsilon_s} \prod_{n=2}^{N+1} \frac{d(\Delta q_n) d(\Delta \theta_n)}{2\pi i \epsilon_s} \prod_{n=1}^{N+1} \exp(-2\Delta q_n) = \frac{1}{2\pi i \epsilon_s} \prod_{n=2}^{N+1} \frac{d(\Delta q_n) d(\Delta \theta_n)}{2\pi i \epsilon_s} \prod_{n=1}^{N+1} (1 + C_{mes}), \quad (8)$$

où,

$$C_{mes} = -2\Delta q_n + 2(\Delta q_n)^2,$$

est la correction relative à la mesure.

En tenant compte des deux corrections venant de l'action et de la mesure, nous arrivons à la correction totale.

$$C_T = i\Delta A_N - \frac{i(\Delta A_N)^2}{2} + C_{mes}(1 + \Delta A_N) \quad (9)$$

Si nous omettons les termes en $\Delta q_n \cdot \Delta \theta_n$, qui ne contribuent pas dans la limite $\epsilon_s \rightarrow 0$, nous obtenons;

$$(\Delta A_N)^2 = \frac{1}{4\epsilon_s} \left[(\Delta q_n)^6 + 2(\Delta q_n)^4 (\Delta \theta_n)^2 + (\Delta q_n)^2 (\Delta \theta_n)^4 \right].$$

$$C_{mes} \Delta A_N \cong \frac{1}{2\varepsilon_s} \left[2(\Delta q_n)^4 + 2(\Delta q_n)^2 (\Delta \theta_n)^2 \right].$$

En tenant compte des résultats suivants (en unités \hbar / m)

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle = i\varepsilon_s, \quad \langle (\Delta \theta)^2 \rangle = i\varepsilon_s, \quad \langle (\Delta q)^2 (\Delta \theta)^2 \rangle = (i\varepsilon_s)^2, \quad \langle (\Delta q)^4 \rangle = 3(i\varepsilon_s)^2,$$

$$\langle (\Delta \theta)^4 \rangle = 3(i\varepsilon_s)^2, \quad \langle (\Delta q)^6 \rangle = 15(i\varepsilon_s)^3, \quad \langle (\Delta q)^2 (\Delta \theta)^4 \rangle = 3(i\varepsilon_s)^3,$$

$$\langle (\Delta q)^4 (\Delta \theta)^2 \rangle = 3(i\varepsilon_s)^3.$$

La correction (9) conduit alors à un potentiel effectif nul, $V_{eff} = 0$. Ainsi, nous pouvons écrire le noyau P_E^N comme;

$$P_E^N(\bar{r}_f, \bar{r}_i, (N+1)\varepsilon_s) = \frac{1}{2\pi\varepsilon_s} \int \prod_{n=2}^{N+1} \frac{d(\Delta q_n) d(\Delta \theta_n)}{2\pi i \varepsilon_s} \times \\ \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{1}{2\varepsilon_s} \left[(\Delta q_n)^2 + (\Delta \theta_n)^2 \right] - \varepsilon_s \left[\alpha e^{2dq_n} - \beta e^{d\theta_n} - E e^{2q_n} \right] \right\} \right\}. \quad (10)$$

Le résultat peut être écrit sous la forme :

$$P_E^N(\bar{r}_f, \bar{r}_i, S) = \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \mathcal{D}\theta \mathcal{D}p_\theta \exp \left\{ i \int_0^S ds \left[p\dot{q} + p_\theta \dot{\theta} - \alpha e^{2dq} + \beta e^{d\theta} + E e^{2q} \right] \right\}. \quad (11)$$

La fonction de Green s'écrit après intégration sur la variable angulaire θ

$$G(\vec{r}_f, \vec{r}_i, E) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{2\pi} \int_0^\infty dS e^{-i\ell^2 S/2} \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \cdot \exp \left[i \int_0^S (p\dot{q} - H) dS \right], \quad (12a)$$

où l'hamiltonien est une fonction des coordonnées (q,s),

$$H = \frac{p^2}{2} + \alpha e^{2dq} - \beta e^{dq} - E e^{2q}, \quad (12b)$$

Ainsi le mouvement de la particule régit par l'action du potentiel définie par (1) a été ramené à un mouvement régit par l'action à une combinaison de trois potentiels en exponentielles. Il est clair que la fonction de Green n'est calculable analytiquement que pour une combinaison de deux exponentielles, c'est à dire relative au potentiel de Morse. On peut voir qu'il existe quatre cas solubles exactement.

1° - cas : La barrière centrifuge ($d = 0$). Dans le système de coordonnées (q, s), le problème de la barrière est décrit par;

$$H = \frac{p^2}{2} - E e^{2q} + (\alpha - \beta). \quad (13)$$

2° - cas : Le problème de Coulomb ($d = 1$). Dans le système de coordonnées (q, s) le problème de Coulomb est décrit par l'hamiltonien relatif au potentiel de Morse [65].

$$H = \frac{p^2}{2} + (\alpha - E) e^{2q} - \beta e^q. \quad (14)$$

3° - cas : L'oscillateur harmonique ($d = 2$). L'hamiltonien qui le décrit dans le système (q, s) est aussi relatif au potentiel de Morse [65].

$$H = \frac{p^2}{2} + \alpha e^{4q} - (\beta + E) e^{2q}. \quad (15)$$

4° - cas : d quelconque et $E=0$. L'hamiltonien dans ce cas est :

$$H = \frac{p^2}{2} + \alpha e^{2dq} - \beta e^{dq}. \quad (16)$$

Cet hamiltonien est aussi relié au potentiel de Morse[65].

Nous examinons le cas important $E = 0$ avec d quelconque (*4°cas*). La fonction de Green dans ce cas est:

$$G(\bar{r}_f, \bar{r}_i, E) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \exp[i\ell(\theta_f - \theta_i)] \langle q_f | q_i \rangle, \quad (17a)$$

avec,

$$\langle q_f | q_i \rangle = \int_0^\infty dS \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left\{ i \int_0^S dS \left[p\dot{q} - \frac{p^2}{2} - \alpha e^{2dq} + \beta e^{dq} - \frac{\ell^2}{2} \right] \right\}. \quad (17b)$$

A l'aide de la transformation $w = r^{d/2} = \exp[dq/2]$, il existe une relation simple entre $\langle q_f | q_i \rangle$ et $\langle w_f | w_i \rangle$ donnée par [12].

$$\frac{d}{2} \exp \left[\frac{d}{4} (q_f + q_i) \right] \langle q_f | q_i \rangle = \langle w_f | w_i \rangle, \quad (18)$$

où,

$$\langle w_f | w_i \rangle = \int_0^\infty dS \exp \left[iS \left(\frac{2}{d} \right)^2 \beta \right] \left\{ \int \mathcal{D}w \mathcal{D}p_w \exp[iA_{osc}] \right\}, \quad (19)$$

avec,

$$A_{\text{osc}} = \int_0^S dS \left[p_w \dot{w} - \frac{p_w^2}{2} - \left(\frac{2}{d}\right)^2 \alpha w^2 - \frac{1}{2} \frac{(2\ell/d)^2 - 1/4}{w^2} \right] \quad (20)$$

est l'amplitude relative à l'oscillateur harmonique radial. L'expression de $\langle w_f | w_i \rangle$ étant connue[12], la fonction de Green est finalement donnée par;

$$G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{d\pi} \int_0^\infty dS \exp\left(iS \left(\frac{2}{d}\right)^2 \beta \right) \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{i d \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \right) \\ \cdot \exp\left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{d} [r_f^d + r_i^d] \cot(2S\sqrt{2\alpha}/d) \right\} I_{2|\ell|} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{i d \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} r_f^{d/2} r_i^{d/2} \right). \quad (21)$$

Il faut noter qu'à ce niveau, que l'équation (21) nous permet de déduire les fonctions de Green pour E quelconque relatives:

- Au potentiel de Coulomb, il suffit de poser $d = 1$ et de remplacer α par $\alpha - E$

$$G_{\text{Coulomb}}(\vec{r}_f, \vec{r}_i; E) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{\pi} \int_0^\infty dS \exp(i4S\beta) \left(\frac{2\sqrt{2(\alpha - E)}}{i \sin(2S\sqrt{2(\alpha - E)})} \right) \\ \cdot \exp\left\{ i\sqrt{2\alpha} [r_f + r_i] \cot(2S\sqrt{2(\alpha - E)}) \right\} I_{2|\ell|} \left(\frac{2\sqrt{2(\alpha - E)}}{i \sin(2S\sqrt{2(\alpha - E)})} r_f^{1/2} r_i^{1/2} \right) \quad (22)$$

- A l'oscillateur harmonique à deux dimensions, il suffit de poser $d = 2$ et de remplacer β par $\beta + E$.

$$G_{OH}(\vec{r}_f, \vec{r}_i; E) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i l (\theta_f - \theta_i)}}{2\pi} \int_0^{\infty} dS \exp(iS(\beta + E)) \left(\frac{\sqrt{2\alpha}}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \right) \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{2} [r_f^2 + r_i^2] \cot(S\sqrt{2\alpha}) \right\} I_{|l|} \left(\frac{\sqrt{2\alpha}}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} r_f r_i \right) \quad (23)$$

Or il est connue que le potentiel de Coulomb à deux dimensions admet une forme compacte pour la fonction de Green [12]. Cette fonction de Green peut s'obtenir *via* la transformation de Levi-Cevita (coordonnées rectangulaires). Nous reconsidérons le potentiel en question *via* une transformation de type Levi-Cevita généralisé pour d quelconque.

3-Fonction de Green via la transformation de type Levi-Cevita.

3-1-Fonction de Green en coordonnées (u, v) .

Nous considérons la transformation complexe $(r, \theta) \rightarrow (z, z^*)$, définie par :

$$z = r e^{i\theta} \quad \text{et} \quad z^* = r e^{-i\theta}$$

et nous passons à une autre transformation $(z, z^*) \rightarrow (w, w^*)$ définie par,

$$w = \sqrt{\frac{2}{d}} z^{d/2} = u + iv, \quad w^* = \sqrt{\frac{2}{d}} z^{*d/2} = u - iv \quad (24)$$

Le passage des coordonnées (x, y) aux nouvelles coordonnées (u, v) est donné par les relations suivantes:

$$x = \left(\frac{d}{2}\right)^{1/d} \frac{(u+iv)^{2/d} + (u-iv)^{2/d}}{2}, \quad (25)$$

$$y = \left(\frac{d}{2}\right)^{1/d} \frac{(u+iv)^{2/d} - (u-iv)^{2/d}}{2}.$$

La relation entre (u, v) et (r, θ) est simplement égale à

$$\left. \begin{aligned} u &= \sqrt{\frac{2}{d}} r^{d/2} \cos \frac{d\theta}{2}, \\ v &= \sqrt{\frac{2}{d}} r^{d/2} \sin \frac{d\theta}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Nous avons donc les domaines de variations pour (u, v) qui dépendent de d et de θ . En notation matricielle le système (26) s'écrit;

$$\vec{r} = B \cdot \vec{V}, \quad \vec{r} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad \vec{V} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad (27)$$

où,

$$B = \left(\frac{d}{2}\right)^{1/d} \begin{bmatrix} \frac{(u+iv)^{2/d-1} + (u-iv)^{2/d-1}}{2}, & -\frac{(u+iv)^{2/d-1} - (u-iv)^{2/d-1}}{2i} \\ \frac{(u+iv)^{2/d-1} - (u-iv)^{2/d-1}}{2i}, & \frac{(u+iv)^{2/d-1} + (u-iv)^{2/d-1}}{2} \end{bmatrix}$$

Pour $d = 1$, on reconnaît la transformation Levi-Cevita

$$x = \frac{u^2 - v^2}{2}, \quad y = uv,$$

En fonction de ces nouvelles coordonnées (u, v) le noyau $P_E(\vec{V}_f, \vec{V}_i; S)$ de la fonction de Green (4) s'écrit;

$$\begin{aligned}
 P_E(\vec{V}_f, \vec{V}_i; S) &= \frac{g_r(\vec{V}_f)g_l(\vec{V}_i)}{2\pi i \varepsilon_S g_l(\vec{V}_f)g_r(\vec{V}_i)} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{N+1} \frac{1}{2\pi i \varepsilon_S g(\vec{V}_N)} \prod_{n=2}^{N+1} d(\Delta u_n) d(\Delta v_n) J_{n-1} \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \frac{1}{2\varepsilon_S g_l(\vec{V}_N)g_r(\vec{V}_{N-1})} \left[\left(\frac{d}{2} \right)^{2/d} \left| (u_n + iv_n)^{2/d} - (u_{n-1} + iv_{n-1})^{2/d} \right| \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \varepsilon_S \left(\frac{d}{2} \right)^{2-\frac{d}{2}} (u_n^2 + v_n^2)^{1-\frac{1}{d}} g_l(\vec{V}_N) \right\} \times \\
 &\quad \times \left\{ \left[\alpha (u_n^2 + v_n^2) - 2\beta/d - E \left(\frac{d}{2} \right)^{2/d-2} (u_n^2 + v_n^2)^{2/d-1} \right] g_r(\vec{V}_{n-1}) \right\}, \quad (28)
 \end{aligned}$$

où,

$$J_{n-1} = \left| \frac{\partial(\Delta x_n, \Delta y_n)}{\partial(\Delta u_n, \Delta v_n)} \right| = \left(\frac{d}{2} \right)^{2/d-2} (u_{n-1}^2 + v_{n-1}^2)^{2/d-1},$$

est le jacobien et $g = g_l g_r$ le produit des fonctions stabilisatrices.

Nous éliminons le facteur $\frac{g_r(\vec{V}_f)g_l(\vec{V}_i)}{g_l(\vec{V}_f)g_r(\vec{V}_i)}$ en choisissant le mid-point (question de simplicité des calculs) comme prescription

$$g = g_l^2 = g_r^2 = J_n \quad (29)$$

Avec ce choix, il vient alors :

$$\left| (u_n + iv_n)^2 - (u_{n-1} + iv_{n-1})^2 \right| = \left(\frac{d}{2} \right)^2 (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2)^{2/d-1} (\Delta u_n^2 + \Delta v_n^2) \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{(2-d)(3-d)}{24d^2} \left[\left(\frac{\Delta u_n + i\Delta v_n}{\tilde{u}_n + \tilde{v}_n} \right)^2 + \left(\frac{\Delta u_n - i\Delta v_n}{\tilde{u}_n - \tilde{v}_n} \right)^2 \right] \right\} + \dots, (30)$$

et,

$$g_l(\tilde{V}_n)g_r(\tilde{V}_{n-1}) \equiv g_l(\tilde{V}_n)g_l(\tilde{V}_{n-1}) = \left(\frac{d}{2} \right)^{2/d-2} (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2)^{2/d-1} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{d-2}{8d} \left[\left(\frac{\Delta u_n + \Delta v_n}{\tilde{u}_n + i\tilde{v}_n} \right)^2 + \left(\frac{\Delta u_n - i\Delta v_n}{\tilde{u}_n - i\tilde{v}_n} \right)^2 \right] \right\} + \dots, (31)$$

où,

$$\tilde{u}_n = \frac{u_n + u_{n-1}}{2} \quad \text{et} \quad \tilde{v}_n = \frac{v_n + v_{n-1}}{2}$$

En faisant le rappel de ces deux équations (28) et (29), il apparaît dans l'exposant de l'exponentielle de l'équation (28) deux quantités.

i) Une première quantité,

$$A_N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{1}{2\varepsilon_S} (\Delta u_n^2 + \Delta v_n^2) + \varepsilon_S \left[\left(\frac{d}{2} \right)^{2/d-2} E (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2)^{2/d-1} + \frac{2\beta}{d} - \alpha (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2) \right] \right\}, (32a)$$

qui est l'action. Nous notons que si $E = 0$, cette action décrit le mouvement de l'oscillateur harmonique à deux dimensions, mais dont le mouvement est limité dans l'espace.

ii) Une deuxième quantité regroupant les termes d'ordre quatre en Δu_n et Δv_n

$$\Delta A_N = \frac{1}{2\varepsilon_S} \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \left(\Delta u_n^2 + \Delta v_n^2 \right) + \frac{(4-d^2)}{32d^2} \left(\left(\frac{\Delta u_n + i\Delta v_n}{\tilde{u}_n + i\tilde{v}_n} \right)^2 + \text{c.c.} \right) \right\}, \quad (32b)$$

et qui représente la correction.

Or à la limite $\varepsilon_S \rightarrow 0$, il est facile de s'assurer grâce à;

$$\langle \Delta u_n^4 \rangle = \langle \Delta v_n^4 \rangle \quad ; \quad \langle \Delta u_n^3 \Delta v_n \rangle = \langle \Delta u_n \Delta v_n^3 \rangle = 0 \quad ,$$

que $\langle \Delta A_N \rangle = 0$, c'est à dire aucun potentiel effectif n'est induit suite à ces changements.

Donc finalement le nouveau noyau est;

$$P_E(\vec{V}_f, \vec{V}_i; S) = \int \mathcal{D}u \mathcal{D}p_u \mathcal{D}v \mathcal{D}p_v \cdot \exp(iA_E), \quad (33a)$$

où,

$$A_E = \int_0^{S'} dS \left[p_u \dot{u} + p_v \dot{v} - \frac{p_u^2 + p_v^2}{2} + \alpha(u^2 + v^2) + \frac{2\beta}{d} + E \right]. \quad (33b)$$

Nous pouvons voir pour les deux cas particuliers

i) $d = 1$, l'action est relative au *potentiel de Coulomb*.

$$A_E^{\text{Coulomb}} = \int_0^{S'} dS \left[p_u \dot{u} + p_v \dot{v} - \frac{p_u^2 + p_v^2}{2} - (\alpha - E)(u^2 + v^2) + 2\beta \right], \quad (34)$$

obtenue *via* la transformation bien connue de *Levi-Cevita*;

$$x = \frac{u^2 - v^2}{2},$$

$$y = u.v.$$

et la fonction de Green s'écrit alors:

$$G^{\text{Coulomb}}(\vec{r}_f, \vec{r}_i; E) = \int_0^\infty dS' e^{2i\beta S'} \left[\langle \vec{V}_f | \vec{V}_i \rangle + \langle -\vec{V}_f | \vec{V}_i \rangle \right], \quad (35a)$$

où,

$$\langle \vec{V}_f | \vec{V}_i \rangle = \frac{\sqrt{2(\alpha - E)}}{2\pi i \sin(S\sqrt{2(\alpha - E)})} \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2(\alpha - E)}}{\sin(S\sqrt{2(\alpha - E)})} \left[(v_f^2 + v_i^2) \cos(S\sqrt{2(\alpha - E)}) - 2\vec{V}_f \vec{V}_i \right] \right\} \quad (35b)$$

est l'amplitude relative à l'*oscillateur harmonique*.

ii) $d = 2$, l'action est relative au potentiel de l'*oscillateur harmonique*.

$$A_E^{\text{O.H.}} = \int_0^{S'} dS \left[p_u \dot{u} + p_v \dot{v} - \frac{p_u^2 + p_v^2}{2} - \alpha(u^2 + v^2) + (E + \beta) \right], \quad (36a)$$

obtenue *via* la relation,

$$x = u,$$

$$y = v.$$

La fonction de Green s'écrit :

$$G^{O.H}(\vec{r}_f, \vec{r}_i; E) = \int_0^\infty dS \exp(i(\beta + E)S) \langle \vec{r}_f | \vec{r}_i \rangle, \quad (36b)$$

où, $\langle \vec{r}_f | \vec{r}_i \rangle$ est le propagateur habituel de l'oscillateur harmonique à deux dimensions (éq.(5b)).

A travers ces deux cas particuliers ($d = 1$ et 2) la fonction de Green se calcule aisément. Dans le cas général où d est quelconque la fonction de Green est calculable analytiquement pour $E = 0$ (section 2).

Lorsqu'on passe du système de coordonnées (x, y) au système (u, v) , nous constatons que:

- la transformation (25) n'est pas univoque,

- le domaine de variation de u et v n'est pas tout le plan: il dépend du paramètre d et de l'angle θ . Donc il n'est pas clair comment trouver $G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0)$ pour d quelconque à partir de ((31), (33a), (33b)). Pour contourner cette difficulté, nous revenons à l'équation (21), et nous sommes la série pour obtenir $G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0)$ en fonction des nouvelles coordonnées (u, v) .

3.2 Sommation de la fonction de Green pour $E = 0$.

Nous notons tout d'abord que E est compris comme égal à $E + i\varepsilon$ ($\varepsilon \rightarrow 0$). D'après l'expression de l'action (12b) lorsque $E = 0$ le terme imaginaire $-i\varepsilon^{2q} \approx -\varepsilon$ ($\varepsilon > 0$) se combine avec $-\ell^2/2$ pour donner $-\frac{\ell^2}{2} - i\varepsilon \approx -\frac{(\ell + i\varepsilon)^2}{2} \approx -\frac{\ell^2}{2} - i\varepsilon|\ell|$.

Nous faisons appel à la représentation intégrale de la fonction de Bessel [66].

$$I_\mu(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{z \cos \theta} \cos(\mu\theta) d\theta - \frac{\sin(\mu\pi)}{\pi} \int_0^\infty \exp(-z \cos(t) - \mu t) dt,$$

avec, $|\arg(z)| \leq \frac{\pi}{2}$ et $\operatorname{Re}(\mu) > 0$.

Nous pouvons montrer facilement qu'elle à la forme suivante,

$$I_{\mu}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_C dt. \exp(z \cos(t) + i\mu t), \quad (37)$$

où C est le contour d'intégration ci-dessous:

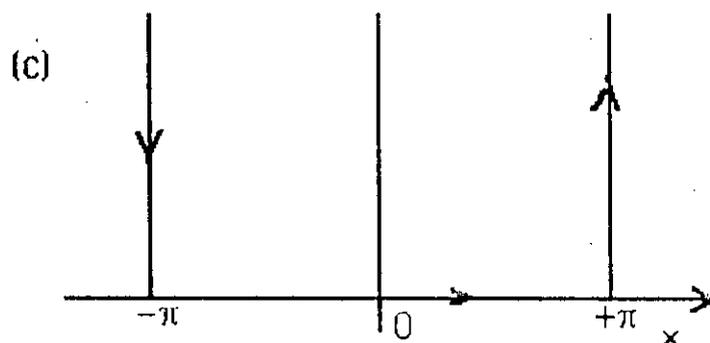


Figure.1: Contour d'intégration de la fonction de Bessel.

Nous considérons la somme,

$$\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp(i\ell\Delta\theta) I_{2|\ell|/d}(z) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \int_C dt. \exp\left(z \cos(t) + 2it \frac{|\ell|}{d} + i\ell\Delta\theta\right), \quad (38)$$

$$\text{où, } z = \frac{2\sqrt{2\alpha}(r_f r_i)^{d/2}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)}, \quad \Delta\theta = \theta_f - \theta_i.$$

Nous calculons la somme suivante;

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp[i(\ell\Delta\theta + 2t|\ell|/d)] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{\ell=-\infty}^{-1} \exp[i\ell(\Delta\theta - 2t/d) + \ell\varepsilon] + \\ &+ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp[i\ell(\Delta\theta + 2t/d) - \ell\varepsilon], \end{aligned} \quad (39)$$

Les termes $\pm \ell\varepsilon$ justifiés auparavant ont été ajoutés pour régulariser les sommations et donc,

$$\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp[i(\ell\Delta\theta + 2t|\ell|/d - |\ell|\varepsilon)] = \frac{i}{2} \left\{ \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} + i\varepsilon\right) + \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{t}{d} - i\varepsilon\right) \right\}, \quad (40)$$

et finalement,

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp[i\ell\Delta\theta] I_{2|\ell|/d}(z) &= \frac{i}{4\pi} \int_C dt. \exp(z \cos(t)) \left\{ \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} + i\varepsilon\right) + \right. \\ &\left. + \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{t}{d} - i\varepsilon\right) \right\}. \end{aligned} \quad (41)$$

Soient J_1 , J_2 des fonctions de Bessel données respectivement par:

$$J_1 = \frac{i}{4\pi} \int_C dt. \exp(z \cos(t)) \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} + i\epsilon\right), \quad (42a)$$

et,

$$J_2 = \frac{i}{4\pi} \int_C dt. \exp(z \cos(t)) \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{t}{d} - i\epsilon\right). \quad (42b)$$

Si nous changeons $t \rightarrow t+i\epsilon$ dans J_1 , nous obtenons

$$J_1 = \frac{i}{4\pi} \int_{C_1} dt. \exp(z \cos(t)) \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right), \quad (43a)$$

où C_1 est le contour d'intégration ci-dessous:

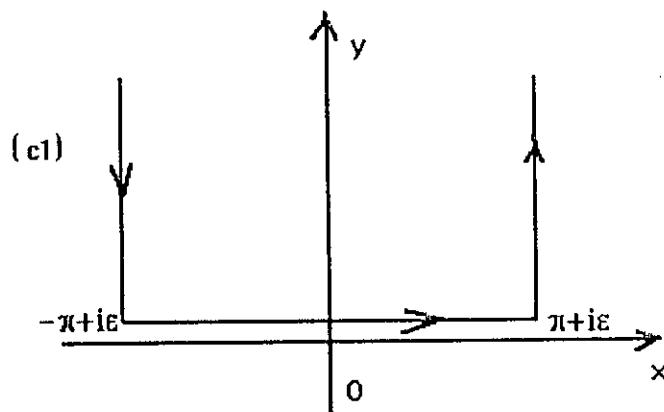


Figure. 2: Contour d'intégration de la fonction de Bessel J_1

Si nous changeons maintenant $t \rightarrow -t+i\epsilon$ dans J_2 , nous obtenons;

$$J_2 = \frac{i}{4\pi} \int_C dt. \exp(z \cos(t)) \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right), \quad (43b)$$

où C_2 est le contour d'intégration ci-dessous;

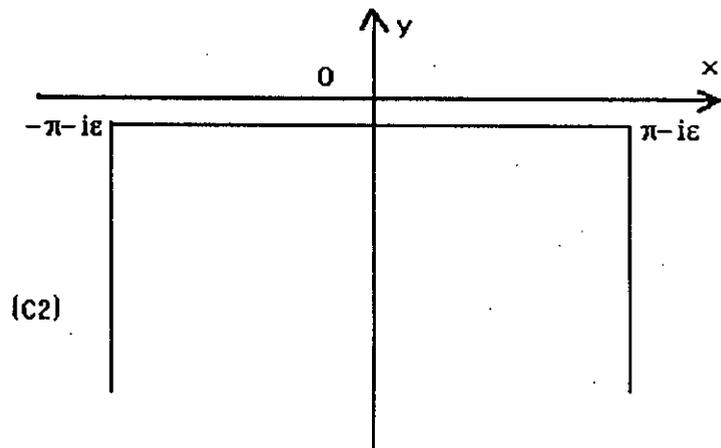


Figure. 3: Contour d'intégration de la fonction de Bessel J_2

Finalement, la sommation s'écrit:

$$\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp[i\ell\Delta\theta] I_{2|\ell|/d}(z) = \frac{i}{4\pi} \int_{C_1 \cup C_2} dt \cot(\Delta\theta - t/d) \exp(z \cos(t)) = I_{C_1 \cup C_2}, \quad (44)$$

où $C_1 \cup C_2$ est le contour ci-dessous;

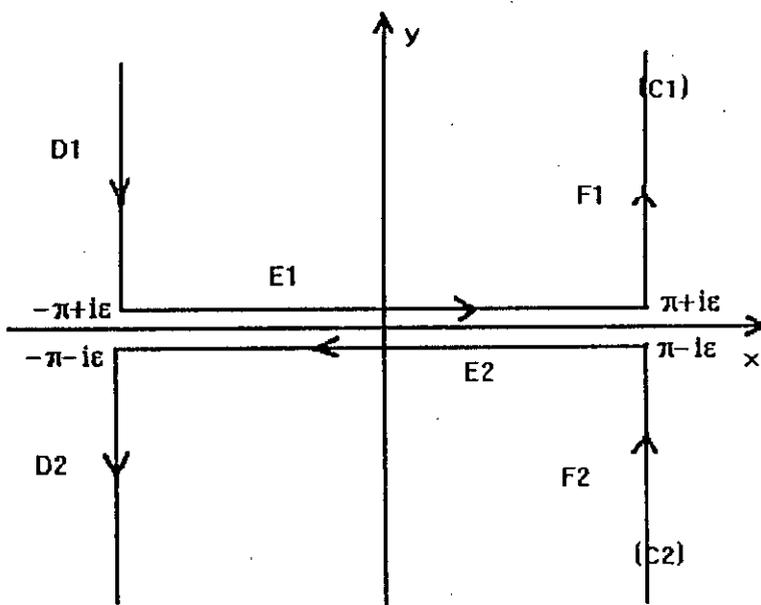


Figure 3: Contour d'intégration de la fonction de Bessel $J_{\alpha} \cup C_2$

Soit, $F(t) = \exp(z \cos(t)) \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right)$, (45)

alors, nous pouvons écrire;

$$\int_{C_1 \cup C_2} F(t) dt = \int_{D_1} F(t) dt + \int_{E_1} F(t) dt + \int_{F_1} F(t) dt + \int_{D_2} F(t) dt + \int_{E_2} F(t) dt + \int_{F_2} F(t) dt$$

$$= \int_{ABCD} F(t) dt + \int_{-\pi+i\infty}^{-\pi-i\infty} F(t) dt + \int_{\pi-i\infty}^{\pi+i\infty} F(t) dt$$
(46)

Nous calculons l'intégrale sur le contour fermé ABCD;

$$\frac{i}{4\pi} \int_{ABCD} F(t) dt = \frac{i}{4\pi} \oint dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \exp[z \cos(t)] = -\frac{1}{2} \sum_n \text{des résidus.}$$

Les pôles à l'intérieur du contour fermé sont donnés par;

$$\sin\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) = 0,$$

leurs positions sur l'axe réel sont:

$$t_n = (\Delta\theta - 2n\pi)d/2, \text{ n entier. Vérifiant la condition}$$

$$-\pi < t_n < \pi \Leftrightarrow -\pi < (\Delta\theta - 2n\pi) \frac{d}{2} < \pi.$$

Alors;

$$\lim_{t \rightarrow t_n} (t - t_n) \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \exp(z \cos(t)) = -d \exp(z \cos(t_n)),$$

nous écrivons donc;

$$\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp[i\ell\Delta\theta] I_{2|\ell|d/d}(z) = \frac{d}{2} \sum_n \exp[z \cos(t_n)] + \frac{i}{4\pi} \left\{ \int_{-\pi+i\infty}^{-\pi-i\infty} dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \exp(z \cos(t)) \right. \\ \left. + \int_{\pi-i\infty}^{\pi+i\infty} dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \exp(z \cos(t)) \right\} \quad (47)$$

Nous posons maintenant $t = -\pi + ip$

$$\int_{-\pi+i\infty}^{-\pi-i\infty} dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \exp[z \cos(t)] = - \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{\pi}{d} - \frac{ip}{d}\right) \exp(-z \cosh(p)),$$

et, $t = \pi + ip$

$$\int_{\pi-i\infty}^{\pi+i\infty} dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \exp[z \cos(t)] = i \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{\pi}{d} + \frac{ip}{d}\right) \exp[-z \cosh(p)],$$

alors;

$$\sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \exp(i\ell\Delta\theta) \cdot I_{2|\ell|/d}(z) = \frac{d}{2} \sum_n \exp(z \cos(t_n)) + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp[-z \cosh(p)] \times$$

$$\times \left\{ \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{\pi}{d} - \frac{ip}{d}\right) - \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{\pi}{d} - \frac{ip}{d}\right) \right\}. \quad (48)$$

La fonction de Green (21) s'écrit finalement;

$$G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dS \exp\left[iS \left(\frac{2}{d}\right)^2 \beta \right] \frac{2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \exp\left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{d} (r_f^d + r_i^d) \cot(2S\sqrt{2\alpha}/d) \right] \times$$

$$\times \left\{ \sum_n \left\{ \exp\left[\frac{2\sqrt{2\alpha} \cos(t_n)}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} (r_f r_i)^{d/2} \right] \right\} \right\} +$$

$$+ \frac{1}{d\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left\{ \exp\left[\frac{-2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} (r_f r_i)^{d/2} \cosh p \right] \right\} \frac{\sin(2\pi/d)}{\cos(2\pi/d) - \cos(\Delta\theta - 2ip/d)}. \quad (49)$$

Comme,

$$t_n = (\Delta\theta - 2n\pi) \frac{d}{2} = \Delta\phi = \phi_f - \phi_i, \quad \phi_i = \frac{d}{2} \theta_i \quad \text{et} \quad \phi_f^n = (\phi_f - 2n\pi) \frac{d}{2}$$

(ϕ_f^n dépend de n)

Nous pouvons toujours trouver un système d'axes tel que :

$$\bar{V} = \sqrt{\frac{2}{d}} r^{d/2} \begin{bmatrix} \cos \frac{d\theta}{2} \\ \sin \frac{d\theta}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad \bar{V}_f^n = \sqrt{\frac{2}{d}} r_f^{d/2} \begin{bmatrix} \cos \phi_f \\ \sin \phi_f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_f^n \\ v_f^n \end{bmatrix};$$

$$\bar{V}_i = \sqrt{\frac{2}{d}} r_i^{d/2} \begin{bmatrix} \cos \phi_i \\ \sin \phi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix}. \quad (50)$$

La fonction de Green s'écrit en fonction des nouvelles coordonnées (u, v)

$$G(\bar{r}_f, \bar{r}_i; 0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dS \exp[4iS\beta/d^2] \sum_n \frac{2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \times$$

$$\times \left\{ \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{2 \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \left((u_f^n)^2 + (v_f^n)^2 + u_i^2 + v_i^2 \right) \cos(2S\sqrt{2\alpha}/d) - \bar{V}_f^n \cdot \bar{V}_i^n \right\} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{d\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \exp[-z \cosh p] \frac{\sin(2\pi/d)}{\cos(2\pi/d) - \cos(\Delta\theta - 2ip)} \right\}, \quad (51)$$

avec,

$$z = \frac{2\sqrt{2\alpha} (r_f r_i)^{d/2}}{d \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)}$$

L'équation (51) constitue notre principal résultat. La fonction de Green $G(\bar{r}_f, \bar{r}_i; 0)$ se compose de deux parties:

- d'une première partie: *somme finie de fonction de Green relatives aux oscillateurs à deux dimensions.*

- et d'une deuxième partie: exprimée par *l'intégrale continue.*

Nous notons que cette deuxième partie disparaît pour $d = 1$ et $d = 2$.

Nous vérifions notre résultat (51) sur deux cas particuliers:

- Cas 1: $d = 1$: *potentiel de Coulomb*.

Dans ce cas le nombre de pôles t_n est égal à deux. En effet, nous rappelons que:

$t_n = (\Delta\theta/2 - n\pi)$ et comme $0 \leq \Delta\theta \leq 2\pi$, la condition $-\pi < t_n < \pi$ est satisfaite pour $n = 1$ et $n = 2$. Dans ce cas,

$$\phi_i = \frac{\theta_i}{2}, \quad \phi_f^0 = \frac{\theta_f}{2}, \quad \phi_f^1 = (\theta_f - 2\pi)\frac{1}{2} = \frac{\theta_f}{2} - \pi,$$

et,

$$G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0) = \sum_{n=0,1} \int dS \exp[4iS\beta] \frac{\sqrt{2\alpha}}{i\pi \sin(2S\sqrt{2\alpha})} \times \\ \times \exp \left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{2 \sin(2S\sqrt{2\alpha})} \left((u_f^n)^2 + (v_f^n)^2 + u_i^2 + v_i^2 \right) \cos(2S\sqrt{2\alpha}) - \vec{V}_f^n \cdot \vec{V}_i \right], \quad (52)$$

où bien,

$$G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0) = \int_0^\infty dS \exp \left[\langle \vec{V}_f^0 | \vec{V}_i \rangle + \langle \vec{V}_f^1 | \vec{V}_i \rangle \right], \quad (53)$$

avec, $\vec{V}_f^1 = -\vec{V}_f^0$,

Connaissant $G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0)$, on peut déduire $G(\vec{r}_f, \vec{r}_i; E)$ pour E quelconque. Il suffit de changer $\alpha \rightarrow \alpha - E$. La fonction de Green obtenue correspond à la transformation de Levi-Cevita.

- Cas 2: $d = 2$: *Oscillateur à deux dimensions*. Le nombre de pôles dans ce cas est égal à un. En effet $-\pi \leq \Delta\theta < \pi$, la condition $-\pi < t_n < \pi$ est satisfaite uniquement pour $n = 0$.

$$\phi_i = \frac{\theta_i}{2} \quad , \quad \phi_f = \frac{\theta_f}{2} \quad ,$$

et,

$$G(\bar{r}_f, \bar{r}_i; 0) = \int_0^\infty dS \exp[i\beta S] \frac{\sqrt{2\alpha}}{2 \sin(S\sqrt{2\alpha})} \times \\ \times \exp \left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{2i\pi \sin(S\sqrt{2\alpha})} \left((u_f^0)^2 + (v_f^0)^2 + u_i^2 + v_i^2 \right) \cos(S\sqrt{2\alpha}) - \bar{V}_f^0 \cdot \bar{V}_i \right] \quad (54)$$

La fonction de Green pour E quelconque se déduit en changeant $\beta \rightarrow \beta + E$.

$$G(\bar{r}_f, \bar{r}_i; E) = \int_0^\infty dS \exp[iS(\beta + E)] \langle \bar{r}_f | \bar{r}_i \rangle \quad , \quad (55)$$

où $\langle \bar{r}_f | \bar{r}_i \rangle$ est le propagateur habituel de l'oscillateur harmonique à deux dimensions[12].

Nous passons maintenant à l'étude des cas limites.

4- : Les états limites

Nous posons $E = 0$ avec $E = E + i\epsilon$ ($\epsilon \rightarrow 0$). Nous écrivons (17b) en tenant compte de (12b) sous la forme:

$$\langle q_f | q_i \rangle = \frac{2}{d} \int_0^\infty dS \int Dq Dp \exp \left\{ i \left[p\dot{q} - \frac{p^2}{2} - \alpha e^{2dq} + \beta e^{dq} + (0 + i\epsilon) e^{2q} - \frac{\ell^2}{2} \right] \right\} \quad (56)$$

Sous la transformation $w = r^{d/2} = e^{dq/2}$, nous obtenons l'amplitude $\langle q_f | q_i \rangle$ comme suit;

$$\begin{aligned}
\langle r_f | r_i \rangle_{E=0, \ell} &= \frac{2}{d} \int_0^{\infty} dS \exp \left[iS \left(\frac{2}{d} \right)^2 \beta \right] \frac{2\sqrt{2\alpha}}{i d \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \times \\
&\times \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{d} (r_f^d + r_i^d) \cot(2S\sqrt{2\alpha}/d) \right\} I_{2|\ell|/d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha} (r_f r_i)^{d/2}}{i d \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \right) .
\end{aligned} \tag{57}$$

Pour évaluer cette intégrale, nous utilisons la formule standard[67].

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} dx \left[\cot \left(\frac{x}{2} \right) \right]^{v/2} e^{-\beta \cosh x} J_{\mu}(\alpha \sinh x) &= \frac{\Gamma((1+\mu)/2 - v)}{\alpha \Gamma(\mu + 1)} \times \\
&\times W_{\gamma, \mu/2}(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} + \beta) M_{-\gamma, \mu/2}(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \beta)
\end{aligned}$$

où $W_{\nu, \mu/2}(z)$, $M_{-\nu, \mu/2}(z)$ sont les fonctions de Whittaker. la formule est valable pour $\text{Re}[\beta] > |\text{Re}[\alpha]|$, $\text{Re}[\mu/2 - v] > -1/2$. Par un changement de variables:

$$\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \pm \beta = t\gamma_{f,i} \quad , \quad \sinh x = (\sinh y)^{-1} \quad , \quad \cosh x = \coth y \quad ,$$

$$\coth(x/2) = e^y \quad , \quad \coth x = \cosh y \quad ,$$

nous obtenons,

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} \frac{dy}{\sinh y} e^{2\lambda y} \exp \left\{ -\frac{t}{2} (\gamma_f + \gamma_i) \coth y \right\} I_{\mu} \left(\frac{t\sqrt{\gamma_f \gamma_i}}{\sinh y} \right) &= \\
&= \frac{\Gamma((1+\mu)/2 - \lambda)}{t(\gamma_f \gamma_i)^{1/2} \Gamma(1+\mu)} W_{\lambda, \mu/2}(t\gamma_f) M_{\lambda, \mu/2}(t\gamma_i) \quad ,
\end{aligned} \tag{58}$$

$W_{\lambda, \mu/2}(t\gamma_f)$ et $M_{\lambda, \mu/2}(t\gamma_i)$ sont les fonctions de Whittaker avec $\gamma_f > \gamma_i > 0$; $\text{Re}(t) > |\arg(t)| < \pi$ et $\text{Re}[(1+\mu)/2 - \lambda] > 0$.

Nous posons :

$$y = \frac{2iS\sqrt{2\alpha}}{d}, \quad \lambda = \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \quad t\gamma = \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}r^d,$$

$$\text{et,} \quad \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}(r_f r_i)^{d/2} = t\sqrt{\gamma_f \gamma_i}, \quad \mu = 2|\ell|/d,$$

alors,

$$\begin{aligned} \langle r_f | r_i \rangle_{E=0, \ell} &= \frac{-2i\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{d\sqrt{2\alpha}(r_f r_i)^{d/2} \Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d} + 1\right)} \times \\ &\times W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}r_f^d\right) M_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}r_i^d\right), \end{aligned} \quad (59)$$

5- Les états continus :

Comme il a été noté auparavant le terme $i\epsilon e^{2q} - \ell^2/2$ s'écrit $-\frac{(\ell + i\epsilon)^2}{2}$ ($\epsilon \rightarrow 0$), c'est à dire que $i\epsilon$ se combine avec ℓ .

Or, $\sqrt{(\ell + i\epsilon)^2} \Big|_{\epsilon \rightarrow 0} = |\ell|$ et $\sqrt{(\ell - i\epsilon)^2} \Big|_{\epsilon \rightarrow 0} = -|\ell|$. Alors, nous déterminons la fonction d'onde en écrivant;

$$\begin{aligned} \Psi(\bar{r}_f)\Psi^*(\bar{r}_i) &= \frac{1}{2\pi} \left[G(\bar{r}_f, \bar{r}_i; E + i\epsilon)_{E=0} - G(\bar{r}_f, \bar{r}_i; E - i\epsilon)_{E=0} \right] \\ &= \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{(2\pi)^2} \left\{ \langle r_f | r_i \rangle_{0+i\epsilon} - \langle r_f | r_i \rangle_{0-i\epsilon} \right\}, \end{aligned}$$

Nous utilisons les relations données par [68].

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

Alors,

$$\Psi(\vec{r}_f) \Psi^*(\vec{r}_i) \Big|_{E=0,\ell} = \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{(2\pi)^2 \ell \sqrt{2\alpha} (r_f r_i)^{d/2}} \left| \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{\Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d}\right) \Gamma\left(1 - \frac{2|\ell|}{d}\right)} \right|$$

$$W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r_f^d\right) W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r_i^d\right) \quad (60)$$

Nous obtenons ainsi, la fonction d'onde pour $E = 0$

$$\Psi(\vec{r})_{E=0,\ell} = \frac{e^{i\ell\theta}}{2\pi\sqrt{2\alpha}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{|\ell| \Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d}\right) \Gamma\left(-2\frac{|\ell|}{d}\right)} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \frac{1}{r^{d/2}} W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d\right) \quad (61)$$

Nous constatons que $\Psi(\vec{r})_{E=0,\ell}$ est une superposition de deux ondes.

$$\Psi(\vec{r})_{E=0,\ell} = C_1 \Psi^{(+)}(\vec{r}) + C_2 \Psi^{(-)}(\vec{r}),$$

où,

$$\Psi^{(+)}(\vec{r})_{E=0,\ell} = e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} \exp\left(-\sqrt{2\alpha} r^d / d\right) {}_1F_1\left(-\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}} + \frac{|\ell|}{d} + \frac{1}{2}, 2\frac{|\ell|}{d} + 1, \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d\right), \quad (62)$$

$$\Psi^{(-)}(\vec{r})_{E=0,\ell} = e^{i\ell\theta} r^{-|\ell|} \exp\left(-\sqrt{2\alpha} r^d / d\right) {}_1F_1\left(-\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}} - \frac{|\ell|}{d} + \frac{1}{2}, -2\frac{|\ell|}{d} + 1, \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d\right), \quad (63)$$

avec,

$$C_1 = \left\{ \frac{1}{2\pi\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{\Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d}\right) \Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d} - 1\right)} \right\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \frac{\Gamma\left(-2\frac{|\ell|}{d}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)} \left[\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}\right]^{\frac{|\ell|}{d} + \frac{1}{2}},$$

$$C_2 = \left\{ \frac{1}{2\pi\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{\Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d}\right) \Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d} - 1\right)} \right\}^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\times \frac{\Gamma\left(-2\frac{|\ell|}{d}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)} \left[\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}\right]^{-\frac{|\ell|}{d} + \frac{1}{2}},$$

où, ${}_1F_1(\alpha, \beta, \gamma)$ est la fonction hypergéométrique standard.

Il existe aussi deux états continus pour $E = 0$. Nous utilisons les relations suivantes [70]

$${}_1F_1(\alpha, \beta, \gamma) = e^z {}_1F_1(\gamma - \alpha, \gamma; -z) ,$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow -n} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} {}_1F_1(\alpha, \gamma; z) = z^{n+1} \binom{\alpha + n}{n+1} {}_1F_1(\alpha + n + 1, n + 2; -z) ,$$

Les deux états ne sont alors plus linéairement indépendants si:

$2|\ell|/d \rightarrow n$ où $n \in \mathbb{N}^+$. Dans ce cas,

$$\left(\frac{-2\sqrt{2\alpha}}{d} \right)^{-2|\ell|/d} \frac{1}{\Gamma(1-2|\ell|/d)} \Psi^{(-)} = \frac{\Gamma\left(\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}} - \frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} + 1\right)}{\Gamma\left(\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}} - \frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} + 1\right) \Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d} + 1\right)} \Psi^{(+)} ,$$

Cependant, si $\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}} - \frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} = n$, où n est un entier positif, et grâce à la formule [71]

$$\begin{aligned} W_{n+\mu+1/2, \mu}(z) &= (-)^n z^{\mu+1/2} e^{-z/2} (2\mu+1)(2\mu+2) \dots (2\mu+n) {}_1F_1(-n, 2\mu+1; z) \\ &= (-)^n z^{\mu+n/2} \exp(-z/2) L_n^{2\mu}(z) , \end{aligned} \quad (64)$$

où $(n+1)$ étant un entier naturel et $L_n^{2\mu}(z)$ les polynômes de Laguerre. Le produit (éq.60) dans ce cas diverge:

$$\Psi(\bar{r}_f) \Psi(\bar{r}_f) \Big|_{E=0} \rightarrow \infty ,$$

(le facteur $\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) = \Gamma(-n) = \infty$ cf.éq.(60)). Dans ce cas l'état ψ ne peut être un état continue (non normalisable). Il décrit un état discret. Cet état ψ est proportionnel à $L_n^{2|\ell|/d}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d}r\right)$. Pour $d = 1$ et 2 , on peut donner cet état.

- Cas particuliers :

- Cas 1 :

Pour $d = 1$ (le potentiel de Coulomb), $\frac{2|\ell|}{d} = 2|\ell| = \text{entier}$. Alors $\psi^{(+)}$ et $\psi^{(-)}$ ne sont plus linéairement indépendants dans ce cas et l'équation prend la forme suivante:

$$G_{\text{Coul.}}(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(i\ell\theta)}{\pi} \langle \vec{r}_f | \vec{r}_i \rangle, \quad (65a)$$

où,

$$\langle \vec{r}_f | \vec{r}_i \rangle = \int_0^{\infty} dS e^{i4\beta S} \frac{2\sqrt{2\alpha}}{i \sin(2S\sqrt{2\alpha})} \exp\left\{ i\sqrt{2\alpha}(r_f + r_i) \times \right. \\ \left. \times \cot(2S\sqrt{2\alpha}) I_{2|\ell|}\left(\frac{8\alpha(r_f r_i)^{1/2}}{i \sin(2S\sqrt{2\alpha})}\right) \right\}. \quad (65b)$$

Nous utilisons la formule standard [67] dans l'équation (58), et les changement de variables suivants:

$$y = 2iS\sqrt{2\alpha}, \quad \lambda = \frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, \quad 2\sqrt{2\alpha}r = t\gamma, \quad 2\sqrt{2\alpha}(r_f r_i)^{1/2} = t\sqrt{\gamma_f \gamma_i}, \quad \mu = 2|\ell|,$$

Nous obtenons alors;

$$\langle r_f | r_i \rangle = \frac{-2i}{\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(-\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}} + |\ell| + \frac{1}{2}\right)}{(r_f r_i)^{1/2} \Gamma(2|\ell| + 1)} W_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|} \left(2\sqrt{2\alpha} r_f\right) W_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|} \left(2\sqrt{2\alpha} r_i\right). \quad (66)$$

Les pôles de la fonction gamma sont donnés par;

$$\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}} = \left(\frac{1}{2} + |\ell| + n\right), \quad \text{ou bien,} \quad \alpha = \frac{\beta^2}{2(n + |\ell| + 1/2)^2},$$

où, α est l'énergie.

Pour extraire les états discrets, nous utilisons la formule donnée par Kleinert [63]

$$\lim_{E \rightarrow E_n} (E - E_n) \Gamma(f(E)) = \frac{1}{f'(E_n)} \frac{(-)^n}{n!}, \quad \text{valable pour } f(E_n) = -n.$$

Nous obtenons ainsi,

$$\Psi(\bar{r}_f) \Psi(\bar{r}_i) = \frac{(-)^n e^{i(\theta_f - \theta_i)} 4\alpha}{n! \pi \beta (r_f r_i)^{1/2} \Gamma(2|\ell| + 1)} W_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|} \left(2\sqrt{2\alpha} r_f\right) M_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|} \left(2\sqrt{2\alpha} r_i\right). \quad (67)$$

Nous utilisons de nouveau la formule de la référence [12].

$$W_{(1+\mu)/2+n, \mu/2}(z_f) M_{(1+\mu)/2+n, \mu/2}(z_i) = \frac{\Gamma(-\mu)}{\Gamma(-n-\mu)} \exp\left[-\frac{z_f + z_i}{2}\right] \times \\ \times (z_f + z_i)^{(1+\mu)/2} M(-n, 1+\mu, z_f) M(-n, 1+\mu, z_i), \quad (68)$$

et nous insérons l'identité;

$$\frac{(-)^n \Gamma(-\mu)}{\Gamma(-n-\mu)} = \frac{\Gamma(n+1+\mu)}{\Gamma(1+\mu)}, \quad (69)$$

dans l'équation (68), nous obtenons la fonction d'onde,

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{(2\sqrt{2\alpha})^{|\ell|+1}}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\Gamma(n+1)}{(2n+2|\ell|+1)\Gamma(n+2|\ell|+1)} \right]^{1/2} e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} e^{-\sqrt{2\alpha}r} L_n^{2|\ell|}(2\sqrt{2\alpha}r), \quad (70)$$

où les fonctions $L_n^\mu(z)$ sont les polynômes de Laguerre habituels [72]

$$L_n^\mu(z) \equiv \frac{(n+\mu)!}{n!\mu!} M(-n, \mu+1; z) \quad (71)$$

Cas 2 : pour $d = 2$: *potentiel de l'oscillateur harmonique*. Dans ce cas le potentiel (21) devient:

$$G_{o.H}(\vec{r}_f, \vec{r}_i; 0) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(i\ell(\theta_f - \theta_i))}{2\pi} \langle r_f | r_i \rangle, \quad (72a)$$

où,

$$\begin{aligned} \langle r_f | r_i \rangle = & \int_0^\infty dS \exp(iS\beta) \frac{\sqrt{2\alpha}}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \times \\ & \times \exp\left\{ i\sqrt{2\alpha}(r_f^2 + r_i^2) \cot(S\sqrt{2\alpha}) \right\} I_{|\ell|} \left(\frac{\sqrt{2\alpha} r_f r_i}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \right). \end{aligned} \quad (72b)$$

Si nous utilisons la formule standard [67] dans l'équation (58) avec les notations suivantes

$$y = iS\sqrt{2\alpha} \quad , \quad \lambda = \frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}} \quad , \quad \sqrt{2\alpha}r = t\gamma \quad , \quad \sqrt{2\alpha}r_f = t(\gamma_f\gamma_i)^{1/2}$$

nous obtenons

$$\langle r_f | r_i \rangle = \frac{-i}{\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(-\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}} + \left|\frac{\ell}{2}\right| + \frac{1}{2}\right)}{(r_f r_i) \Gamma(|\ell| + 1)} W_{\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}}, |\ell|}(\sqrt{2\alpha}r_f) M_{\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}}, |\ell|}(\sqrt{2\alpha}r_i) \quad (73)$$

La fonction Γ a les pôles données par

$$\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}} = \left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2} + n\right) \quad , \quad \text{ou bien} \quad \beta = \sqrt{2\alpha}(1 + |\ell| + 2n).$$

Nous procédons comme dans le *cas I*, nous obtenons les fonctions d'ondes correspondantes à $E = 0$.

$$\Psi_{n,\ell}(\vec{r}) = (-)^n (2\alpha)^{\frac{|\ell|+1}{4}} \left[\frac{n!}{\pi(n+|\ell|)!} \right]^{1/2} e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} \exp\left(-\frac{\sqrt{2\alpha}r^2}{2}\right) L_n^{|\ell|}(2\sqrt{2\alpha}r^2). \quad (74)$$

Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde associés à E quelconque, sont déduits en changeant β en $\beta + E$;

$$E = \sqrt{2\alpha}(2n + |\ell| + 1) - \beta, \quad (75)$$

et,

$$\Psi_{n,\ell}(\vec{r}) = (-)^n (2\alpha)^{\frac{|\ell|+1}{4}} \left[\frac{n!}{\pi(n+|\ell|)!} \right]^{1/2} e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} \exp\left(-\frac{\sqrt{2\alpha}r^2}{2}\right) L_n^{|\ell|}(2\sqrt{2\alpha}r^2). \quad (76)$$

La dégénérescence de l'état correspondant à $E = 0$, en fonction de d , a été discutée dans [12,60,62].

6. Conclusion .

Pour $E = 0$, nous avons déterminé la fonction de Green en coordonnées polaires et en coordonnées généralisées de Levi-Cevita. Comme il n'est pas possible de déterminer la fonction de Green comme une fonction de (u, v) , puisque (u, v) ne génèrent pas tout le plan, sauf pour $d = 1$ et $d = 2$, nous les avons déterminé en sommant les séries, qui constituent notre principal résultat. Notre fonction de Green a été écrite en deux parties:

- une somme discrète et finie de fonctions de Green dépendant du paramètre d et de l'angle θ .
- et d'une somme continue.

D'autres cas limites ont aussi été étudiés.



Conclusion.

Notre travail s'est articulé essentiellement autour de deux parties, où nous avons appliqué le formalisme des intégrales fonctionnelles de parcours de Feynman.

Dans une première partie, nous avons traité au chapitre 3 deux classes de potentiels à l'aide de la méthode variationnelle de Feynman-Kleinert[9]. Cette méthode convergente étendue récemment par des corrections systématiques par Kleinert [13] est appliquée particulièrement à des températures finies ne pouvant être résolues à l'aide d'un calcul analytique exact.

1°- La classe de potentiels relative aux potentiels des oscillateurs harmoniques obtenue à l'aide de la méthode de factorisation. L'approximation semi-classique proposée par Feynman-Kleinert appliquée à cette classe nous permet d'obtenir de bons résultats[15], en particulier l'accord avec l'énergie libre exacte, pour toutes les températures. Cependant, la différence maximale, est observée pour $|\gamma| = 0.9$, ne dépasse pas les 4%. Par contre, aux basses températures ($\beta > 5$) l'énergie semi-classique tend vers l'énergie de l'état fondamental E_0 .

2°- La classe de potentiels relative au potentiel de Morse obtenue à l'aide de la supersymétrie de la mécanique quantique[54]. En plus de l'approximation semi-classique de Feynman-Kleinert nous avons appliqué des corrections systématiques[13] à cette approximation.

Nous obtenons des résultats plutôt raisonnables[17]. Ces résultats deviennent extrêmement précis lorsque les corrections systématiques sont apportées à l'approximation de Feynman-

Kleinert. Il est à noter que la méthode Feynman-Kleinert permet des différences entre les énergies E_1^0 et E_{ex}^0 de l'ordre de 32% pour $\Gamma = 0.1$ et de 31% pour $\Gamma = 10$. Les corrections systématiques proposées par Kleinert à l'approximation semi-classique réduisent la différence et devient de l'ordre de 23% pour $\Gamma = 0.1$ et de 0.1% pour $\Gamma = 10$.

Nous pensons qu'il est très utile de développer une méthode d'approche relative à des potentiels dépendants du temps.

La deuxième partie de ce travail, concerne l'étude par les intégrales de parcours via la transformation spatio-temporelle de Duru-Kleinert[8,18] du potentiel $V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}$ [60]. Nous avons montré, que la fonction de Green est calculable pour d quelconque et $E = 0$, en utilisant d'abord les coordonnées polaires. Comme il est connu, par exemple pour le potentiel de coulomb que la fonction de Green s'écrit sous forme compacte via la transformation Levi-Cevita. Nous avons donc généralisé cette transformation pour d quelconque. Nous avons calculé cette même fonction de Green. En sommant la série obtenue en coordonnées polaires, nous avons montré qu'elle se compose de deux parties.

- Une somme finie de fonctions de Green relatives à des oscillateurs à deux dimensions.
- Une intégrale continue, qui disparaît pour $d = 1$ et $d = 2$.

Nous avons étudié aussi quelques cas limites pour $E = 0$ et déduit le spectre et la fonction d'onde pour E quelconque et $d = 1, 2$.



Références .

- [1] W. Heisenberg, and P. Jordan, *Zeitschrift für Physik*, 37 (1926) 263.
- [2] C. Cohen Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. 1. Wiley, New York (1977).
- [3] E. Schrödinger, *Ann. Phys.* 79 (1926) 361 ; *Wave Mechanics* (Blackie and Son, London, 1928).
- [4] P.A.M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* 3 (1933) 1. For a detailed discussion of the contents of this paper and other associated topics see the book: *The Principles of Quantum* by the same author (Oxford Univ. Press, Oxford, 1958).
- [5] R.P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* 20 (1948) 367.
- [6] R.P. Feynman and A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York, 1965).
- [7] D.C.Khandekar and S.V.Lawande, *Phys.Rep.*137 (1986) 115.
- [8] I.H. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett. B* 84 (1979) 185.
- [9] R.P. Feynman and H. Kleinert, *Phys. Rev. A* 34 (1986) 5080.
- [10] H. Kleinert, *Phys. Lett. B* 181 (1986) 324.
- [11] H. Kleinert, *Phys. Lett. A* 18 (1986) 267.
- [12] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [13] H. Kleinert, *Phys. Lett. A* 173 (1993) 332.
- [14] B. Mielnik, *J. Math. Phys.* 25, (1984) 3387.
- [15] M. Bentaiba, L. Chetouani and T.F. Hammann, *Z. Naturforsch.* 47 a (1992) 1013.
- [16] E.D. Filho, *J. Phys. A* 21 (1988) L1025.

- [17] M. Bentaiba, L. Chetouani and T.F. Hammann, *Phys. Lett. A* **189** (1994) 433.
- [18] I.H. Duru and H. Kleinert, *Fortsch. Phys.* **30** (1982) 401.
- [19] M. Bentaiba, M. Benkaddour, L. Chetouani and T.F. Hammann, *J. Phys. I* **4** (1994) 7.
- [20] M. Mayrand and L. Vinet, *J. Math. Phys.* **33** (1992) 203.
- [21] V. Volterra, *Theory of Functionals and of integral and Integro-Differential Equations* (Mc Graw, New York, 1965).
- [22] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, (Oxford, London 1965). (fourth edition).
- [23] R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **84** (1951) 108.
- [24] W. Tobocman, *Nuovo Cim.* **3** (1956) 1213.
- [25] C. Garrod, *Rev. Mod. Phys.* **38** (1966) 438.
- [26] C. DeWitt-Morette, A. Maheshwari and B. Nelson, *Gen. Rel. and Grav.* **8** (1977) 581.
- [27] M.M. Mizrahi, *J. Math. Phys.* **19** (1978) 298.
- [28] L. Schulman, *Technique and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- [29] E. Nelson, *J. Math. Phys.* **5** (1964) 332.
- [30] R. Fanelli, *J. Math. Phys.* **17** (1976) 490.
- [31] A.A. Andrianov, N.V. Borisov and M.V. Ioffe, *Phys. Lett.* **105 A** (1984) 19.
- [32] C.V. Sukumar, *J. Phys. A* **18** (1985) 2917.
- [33] E. Schrödinger, *Proc. R. Irish. Acad.* **46** (1940) 9.
- [34] E. Schrödinger, *Proc. R. Irish. Acad.* **A 46** (1946) 183.
- [35] L. Infeld and T.D. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951) 21.
- [36] E. Witten, *Nucl. Phys. B* **188** (1981) 513.

- [37] E.P. Wigner, *Phys. Rev.* **40** (1932) 749.
- [38] H. Weyl, *The Theory of Groups and Quantum Mechanics* (Dover Publ., New York, N.Y., 1950).
- [39] R.J. Glauber, *Phys. Rev.* **131** (1963) 2766.
- [40] F.T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore and H. Thomas, *Phys. Rev. A* **6** (1972) 2212.
- [41] M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully and E.P. Wigner, *Phys. Rep.* **106** (1984) 122.
- [42] Y. Fujiwara, T.A. Osborn and S.F.J. Wilk, *Phys. Rev. A* **24** (1981) 2187; *Phys. Rev. A* **25** (1986) 14.
- [43] T. Tsuzuki, *Progr. Theor. Phys.* **73** (1985) 1352.
- [44] M. Moraldi, M.G. Pini and A. Rettori, *Phys. Rev. A* **31** (1984) 1971.
- [45] R. Dickmann and R.F. O'Connell, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 1703.
- [46] H. De Raedt and A. Lagendijk, *Phys. Rep.* **127** (1985) 235.
- [47] H. Betsuyaki and T. Yokota, *Progr. Theor. Phys.* **75** (1986) 808.
- [48] G.M. Wysin and A.R. Bishop, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 3377.
- [49] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics* (Benjamin, Reading, Mass., 1972).
- [50] S. Golden, *Phys. Rev.* **137** (1965) B1127; K. Symanzik, *J. Math. Phys.* **6** (1965) 1155.
- [51] B. Mielnik, *J. Math. Phys.* **25**, 3387 (1984).
- [52] W. Janke and H. Kleinert, *Phys. Lett. A* **118**, 371 (1986).
- [53] W. Janke and B. K. Cheng, *Phys. Lett. A* **129**, 140 (1988)
- [54] E. D. Filho, *J. Phys. A* **21** (1988) L1025.
- [55] H. Kleinert, *Fortschr. Phys.* **30** (1982) 187.
- [56] Y. Fujimoto, L. O'Riada and G. Parravicini, *Nucl. Phys. B* **212** (1983) 268.
- [57] P. M. Morse, J. B. Fisk and L. I. Schiff, *Phys. Rev.* **50** (1936) 748.

- [58] M. M. Nieto and L. M. Simmons, *Phys. Rev. A* **19** (1979) 438.
- [59] P.A.M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics*, Belter Graduate School of Science, Yeshiva Univ., New York, 1964.
- [60] Mayrand M. and Vinet L., *J. Math. Phys.* **33** (1992) 203.
- [61] Khare A., *Lett. Math. Phys.* **5** (1981) 539.
- [62] Khare A., *J. Math. Phys.* **24** (1983) 867.
- [63] Kleinert H. and Mustapic I., *J. Math. Phys.* **33** (1992) 663.
- [64] Chetouani L., Chouchaoui A. and Hammann T.F., *Phys. Lett. A* **161** (1991) 89.
- [65] Anderson A. and Anderson S.B., *Ann. Phys.* **199** (1990) 155.
- [66] Gradshteyn L.S. and Ryzhik I.M., *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965), p.958, eq. (8.431.5).
- [67] Ref, [66], p729, eq.(6.669.1).
- [68] Ref, [66], p1062, eq.(9.232.1).and p. 1059, eq. (9.220.4).
- [69] Ref, [66], p1059, eq.(9.220.2 and 3).
- [70] Ref, [66], p1058, eq.(9.912.1).and p.1059, eq. (9.214).
- [71] Ref, [66], p1063, eq.(9.237.2).
- [72] Ref, [66], p1037, eq.(8.970).



Annexes

Feynman-Kleinert's Treatment of a Class of Harmonic-Oscillators

M. Bentaiba and L. Chetouani

Laboratoire de Physique Théorique, Institut de Physique, Université de Blida, Blida, Algérie

T. F. Hammann

Laboratoire de Mathématiques, Physique Mathématique et Informatique, Faculté des Sciences et Techniques, Université de Haute Alsace, Mulhouse, France

Z. Naturforsch. 47a, 1013-1016 (1992); received June 26, 1992

The Feynman-Kleinert method is applied to the harmonic oscillator class of potentials obtained through the factorization method. It is found that the free energy is in good agreement with the exact energy of the harmonic oscillator

The purpose of this paper is to apply the Feynman-Kleinert method [1, 2] to a class of potentials related to the harmonic oscillator and obtained through the so-called factorization method [3]. The exact analytic calculation of the propagator via path integral approach is not quite up to scratch yet, despite considerable progress in this field thanks to the introduction of the time parameter [4] and to the reparametrization of paths.

Let us keep in mind that the very principle of the Feynman-Kleinert method consists in using the path-integral representation of the partition function [5] in quantum mechanics, namely in standard notations,

$$Z = \exp(-\beta F)$$

$$= \int \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left(\frac{\dot{x}^2(\tau)}{2} + V(x(\tau)) \right) \right\}$$

$$= \int \frac{dx_0}{(2\pi\beta)^{1/2}} \left[\prod_{n=1}^{\infty} \int \frac{dx_n^{\text{real}} dx_n^{\text{im}}}{\pi/(\beta\omega_n^2)} \right. \quad (1)$$

$$\left. \exp \left\{ -\beta \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^2 |x_n|^2 - \int_0^\beta d\tau V(X(\tau)) \right\} \right],$$

with $\omega_n = 2\pi n/\beta$.

Integrations over x_n^{real} and x_n^{im} , for $n > 0$, converge fast, leaving only the integration over x_0 ,

$$Z = \int \frac{dx_0}{(2\pi\beta)^{1/2}} \exp\{-\beta w(x_0)\}, \quad (2)$$

Reprint requests to Prof. T. F. Hammann, Laboratoire de Mathématiques, Physique Mathématique et Informatique, Faculté des Sciences et Techniques, Université de Haute Alsace, 4, rue des Frères Lumière, F-68093 Mulhouse, France.

where

$$w(x_0) \approx w_1(x_0) = \min[\tilde{w}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))], \quad (3)$$

$a^2(x_0)$ and $\Omega(x_0)$ being functions of x_0 , and

$$\tilde{w}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$$

$$= \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{\sinh(\beta\Omega/2)}{\beta\Omega/2} \right] - \frac{\Omega^2 a^2}{2} + V_{a^2}(x_0), \quad (4)$$

where Ω is a parameter allowing to define the auxiliary potential $\tilde{w}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ and $V_{a^2}(x_0)$ is the smeared out version of the $V(x)$ potential, defined as

$$V_{a^2}(x_0) = \int \frac{dx'}{(2\pi a^2)^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{(x_0 - x')^2}{2a^2} \right\} V(x') \quad (5)$$

with a^2 as an unknown parameter.

The classical limit of the partition function is reached for high temperatures ($T \rightarrow \infty$), for which $w(x_0) \rightarrow V(x_0)$ and therefore

$$Z \rightarrow Z_{\text{cl}} = \int \frac{dx_0}{(2\pi\beta)^{1/2}} \exp[-\beta V(x_0)]. \quad (6)$$

One may thus say that, because of the analogy with the classical limit $w(x_0) \rightarrow V(x_0)$, $w(x_0)$ is the classical effective potential, and that the integral (2) is the classical effective partition function.

A relation between the parameters a^2 and Ω can be established through the minimization of $\tilde{w}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ with respect to Ω . So, for each x_0 we shall obtain the relation

$$a^2 = \frac{1}{\beta\Omega^2} \left[\frac{\beta\Omega}{2} \coth \frac{\beta\Omega}{2} - 1 \right]. \quad (7)$$

Similarly, the minimization of $\tilde{w}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ with respect to $a^2(x_0)$ allows us to work out $\Omega^2(x_0)$,

$$\Omega^2(x_0) = 2 \frac{\partial V_{a^2}(x_0)}{\partial a^2} = \frac{\partial^2 V_{a^2}(x_0)}{\partial x_0^2} \tag{8}$$

Equations (3)–(5) have been obtained from the trial partition function Z , the effect of its potential energy on the x_n ($n \neq 0$) components having been approximated by a Gaussian-potential according to the equation

$$Z_1 \equiv e^{-\beta F_1} = \int \mathcal{D} x(\tau) \tag{9}$$

$$\cdot \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left\{ \frac{\dot{x}^2(\tau)}{2} + \frac{\Omega^2(x_0)}{2} (x(\tau) - x_0)^2 \right\} - \beta L_1(x_0) \right\},$$

where $\Omega^2(x_0)$ is a local arbitrary curvature of the potential, and where $L_1(x_0)$ is the trial potential depending only on the x_0 mean coordinate. The $\Omega(x_0)$ and $L_1(x_0)$ functions are determined by the extremal principle. Thus, (9) can be reduced to a simple integral over x_0 ,

$$Z_1 = \int \frac{dx_0}{(2\pi\beta)^{1/2}} \frac{\beta\Omega(x_0)/2}{\sinh\left(\frac{\beta\Omega(x_0)}{2}\right)} \exp\{-\beta L_1(x_0)\}, \tag{10}$$

where L_1 is given by the relation

$$L_1(x_0) = V_{a^2(x)}(x_0) - \Omega^2(x_0) a^2(x_0)/2. \tag{11}$$

We can see that (10) and (2) are similar. The example that we wish to work on in this paper is the harmonic oscillator, the family of potentials of which can be obtained through factorization [3].

The following potentials have already been dealt with: the Coulomb potential [6], the anharmonic oscillator [1, 2], the Yukawa potential [1, 2], and the harmonic oscillator plus the Dirac distribution [7].

We shall now apply the Feynman-Kleinert method to a class of harmonic oscillators. These harmonic potentials may be obtained through the following method.

Let us consider the factorized expression

$$H + \frac{1}{2} = a a^\dagger, \tag{12}$$

where H is the Hamiltonian and where a^\dagger and a are respectively the creation and annihilation operators, defined by

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dx} + x \right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dx} + x \right).$$

Let us define two new operators

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dx} + \beta(x) \right), \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dx} + \beta(x) \right), \tag{13}$$

by imposing

$$H + \frac{1}{2} = b b^\dagger, \tag{14}$$

which leads us to

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + \beta' + \beta^2 \right), \tag{15}$$

the condition on β being Ricatti's equation

$$\beta' + \beta^2 = 1 + x^2,$$

the solution of which can be obtained by setting

$$\beta = x + \phi(x). \tag{16}$$

Hence, we have

$$\phi(x) = \frac{e^{-x^2}}{\gamma + \int_0^x e^{-x'^2} dx'}, \quad \gamma \in \mathbb{R}.$$

The relation between the hamiltonian and modified hamiltonian of the harmonic oscillator can be written

$$H' = H - \phi'(x) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{17}$$

with

$$V(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{d}{dx} \left[\frac{e^{-x^2}}{\gamma + \int_0^x e^{-x'^2} dx'} \right]. \tag{18}$$

This potential $V(x)$ can be written

$$V(x) = \frac{x^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} g_n x^n, \quad -\infty < x < \infty, \tag{19}$$

with $g_n \rightarrow 0$, when $|\gamma| \rightarrow +\infty$.

If $|\gamma| > \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$, the above potential has no singularity and behaves like $x^2/2$, for $x \rightarrow \pm\infty$, and we thus obtain here a one-parameter family of self-adjoint Hamiltonians in $L^2(\mathbb{R})$. It is to be noted that the eigenvalues of H and H' are the same, namely

$$H' \phi_n = (n + \frac{1}{2}) \phi_n, \quad (n = 1, 2, 3, \dots, \infty), \tag{20}$$

whereas the wave functions ψ_n and ϕ_n of the harmonic oscillator and the modified harmonic oscillator, re-

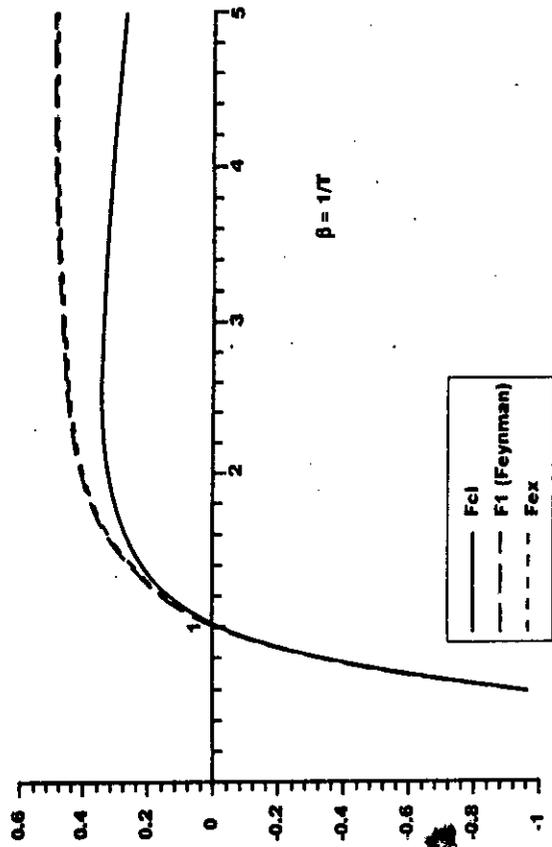


Fig. 3. F_{ex} , F_{el} , F_1 , for $\gamma=3$, versus $\beta=1/T$.

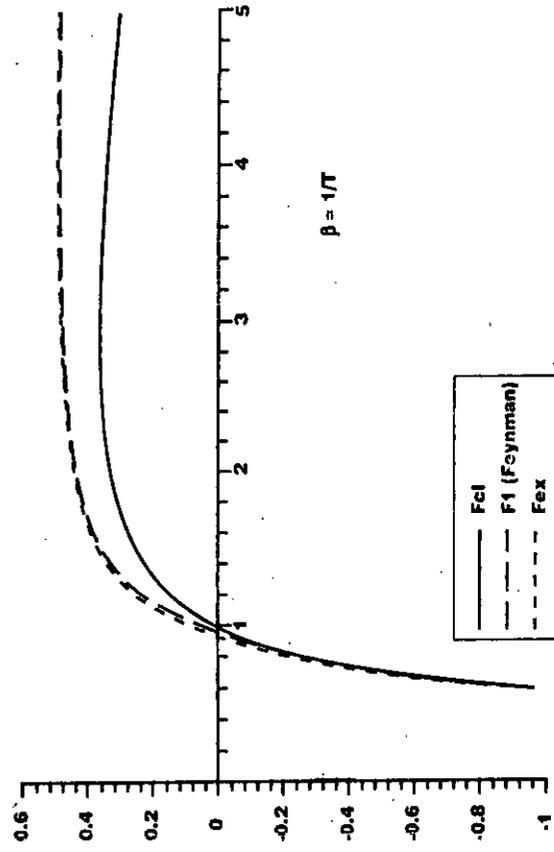


Fig. 4. F_{ex} , F_{el} , F_1 , for $\gamma=5$, versus $\beta=1/T$.

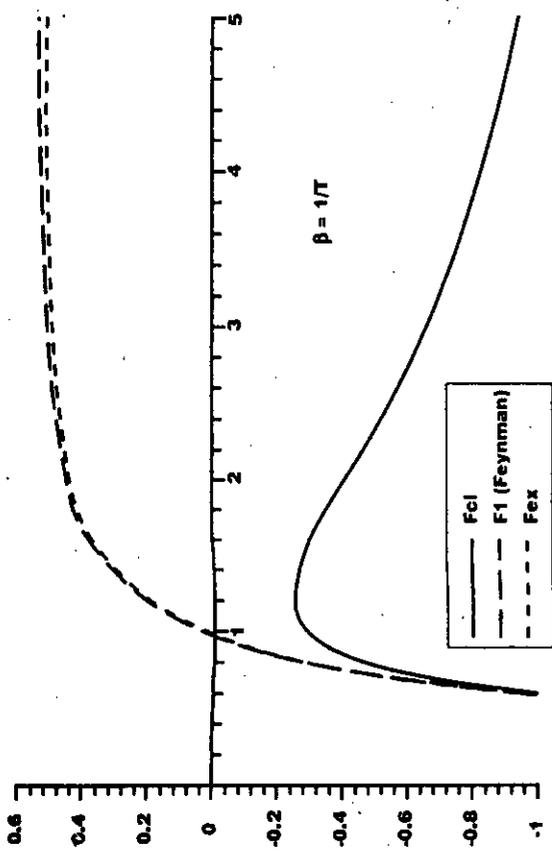


Fig. 1. F_{ex} , F_{el} , F_1 , for $\gamma=0.9$, versus $\beta=1/T$.

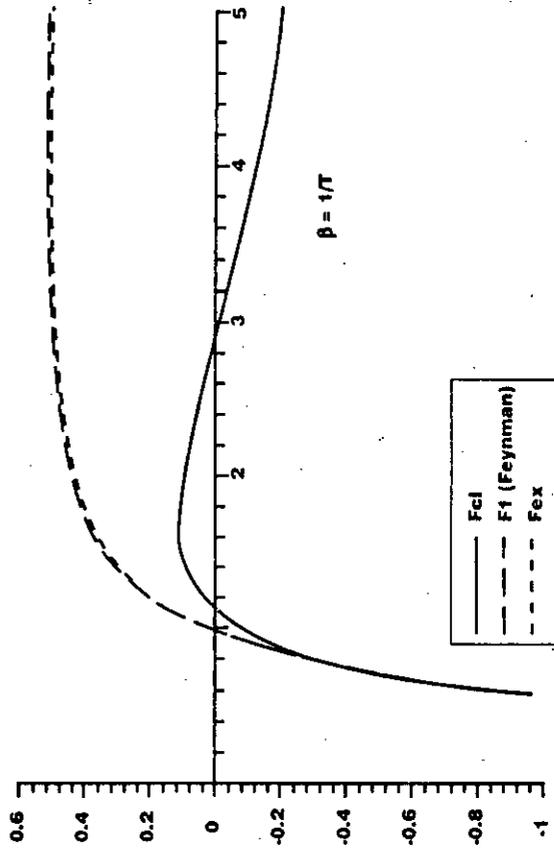


Fig. 2. F_{ex} , F_{el} , F_1 , for $\gamma=1$, versus $\beta=1/T$.

Table 1. Comparison of the variational energy $E^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_1$, obtained from a Gaussian trial wave function, with the exact energy E_{ex}^0 of the ground state. The level-splitting $\Delta E_{ex}^0 = E_{ex}^1 - E_{ex}^0$ of the first excited state (shown in column 5) is well approximated by the $\Omega(0)$ value.

$ \gamma $	E^0	E_{ex}^0	E_{ex}^1	ΔE_{ex}^0	$\Omega(0)$	$a^2(0)$
0.9	0.5350	0.4950	1.4962	1.0225	0.8895	0.7889
1.0	0.5211	0.4975	1.4975	1.0065	0.8952	0.6455
1.5	0.5088	0.4990	1.4991	1.0031	0.8983	0.5221
2.0	0.5035	0.4996	1.4995	1.0022	0.9350	0.4858
3.0	0.5012	0.4999	1.4999	1.0005	0.9543	0.4832
5.0	0.5006	0.4999	1.4999	1.0002	0.9860	0.4806

spectively, are related by the equation

$$\phi_n = -b^\dagger \psi_{n-1}. \quad (21)$$

In particular, for the ground state we have

$$\phi_0 = c_0 e^{-x^2/2} \exp \left\{ - \int_0^x \phi(x') dx' \right\}. \quad (22)$$

Table 1 allows us to compare the variational energy $E^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_1$, obtained for a Gaussian trial wave function, with the exact energy E_{ex}^0 of the ground state. The $\Delta E_{ex}^0 = E_{ex}^1 - E_{ex}^0$ values (fifth column) appear to be in good accordance with $\Omega(0)$, at $T=0$. Four figures give F_{ex} , F_1 (Feynman) and F_{cl} versus $\beta=1/T$, for $\gamma=0.9, 1.0, 3.0$, and 5.0 respectively.

To conclude, we may say that the semi-classical approximation proposed by Feynman-Kleinert [1, 2], when applied to the class of potentials obtained by the factorization method [3], leads to a very good accordance with the exact free energy, for all temperatures. The maximal difference, observed for $|\gamma|=0.9$, does not exceed 4 per cent. At low temperatures ($\beta > 5$), the semi-classical energy goes to the ground state energy E_0 .

- [1] R. P. Feynman and H. Kleinert, *Phys. Rev. A* **34**, 5080 (1986). – H. Kleinert, *Phys. Lett. B* **181**, 324 (1986); *Phys. Lett. A* **18**, 267 (1986).
 [2] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*, World Scientific, Singapore 1990.

- [3] B. Mielnik, *J. Math. Phys.* **25**, 3387 (1984).
 [4] I. M. Duru and H. Kleinert, *Phys. Lett. B* **84**, 30 (1979).
 [5] R. P. Feynman and H. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York 1965.
 [6] W. Janke and H. Kleinert, *Phys. Lett. A* **118**, 371 (1986).
 [7] W. Janke and B. K. Cheng, *Phys. Lett. A* **129**, 140 (1988).

Feynman-Kleinert treatment of the supersymmetric generalization of the Morse potential

M. Bentaïba^a, L. Chetouani^b, T.F. Hammann^a

^a *Laboratoire de Mathématique et Physique Mathématique, Faculté des Sciences et Techniques, Université de Haute Alsace, Mulhouse, France*

^b *Département de Physique Théorique, Institut de Physique, Université de Constantine, Constantine, Algeria*

Received 26 November 1993; revised manuscript received 31 March 1994; accepted for publication 25 April 1994
Communicated by J.P. Vigié

Abstract

The Feynman-Kleinert approximation to path-integrals, with systematic corrections to the variational calculation of the effective classical potential, is applied to the Morse oscillator generalized by supersymmetry. It is found that this systematic improvement scheme of the Feynman-Kleinert approximation to path-integrals is extremely accurate.

The purpose of this paper is to apply the Feynman-Kleinert (F-K) approximation [1-3] - which is based upon a locally harmonic variational ansatz and on the Jensen-Peierls inequality - to the treatment of the Morse oscillator generalized by supersymmetry [4], taking into account the improvements recently proposed by Kleinert [5] for the variational calculation of the effective classical potential. The exact analytic calculation of the propagator via the path-integral approach is not quite up to scratch yet, despite considerable progress in this field thanks to the introduction of the time parameter [5] and reparametrization of the paths.

The Feynman-Kleinert method [1-3] allows a very satisfactory approximation for path integrals whenever the accurate analytic calculation of the propagator cannot be achieved.

We can schematize and sum it up as follows.

In quantum mechanics, the partition function of a particle of mass M submitted to a one-dimensional potential $V(x)$, can be expressed as an integral in the classical phase-space,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\{-\beta[p^2/2M + V_{\text{eff,cl}}(x_0)]\} \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\hbar^2\beta/M}} \exp[-\beta V_{\text{eff,cl}}(x_0)], \quad (1)$$

where $\beta = 1/k_B T$, k_B being the Boltzmann constant.

In Eq. (1), the integration variable x_0 is the position, at a mean time,

$$\bar{x} = \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau x(\tau),$$

of the fluctuating path. The effective classical potential $V_{\text{eff,cl}}(x_0)$ must not be taken for the effective conventional potential $V_{\text{eff}}(x)$ of field theory [7,8].

For smooth potentials $V(x)$, a very satisfactory approximation of the integrals (1) can be obtained, which will lead to an upper limit $H_1(x_0)$ of $V_{\text{eff,cl}}(x_0)$. In fact, it is possible to

(i) calculate a smeared version of the $V(x)$ potential as follows:

$$V_{a^2}(x) = \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp[-(x'-x)^2/2a^2] V(x'). \quad (2)$$

with a so far unknown width parameter a^2 ,

(ii) introduce a second parameter, Ω , and establish the auxiliary potential

$$\begin{aligned} \tilde{W}_1(x_0, a^2, \Omega) \\ = \frac{1}{\beta} \text{Ln} \frac{\sinh(\frac{1}{2}\beta\Omega)}{\frac{1}{2}\beta\Omega} - \frac{1}{2}\Omega^2 a^2 + V_{a^2}(x_0), \end{aligned} \quad (3)$$

(iii) consider a^2 and Ω as functions of x_0 and calculate at each x_0 , the minimum $\tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0))$ with respect to the parameters a^2 and Ω . The result is then the anticipated approximate effective classical potential

$$W_1(x_0) = \text{Min}_{a^2(x_0), \Omega(x_0)} \{ \tilde{W}_1(x_0, a^2(x_0), \Omega(x_0)) \}. \quad (4)$$

More explicitly, the minimization with respect to Ω gives the following relation between Ω and a^2 , at each x_0 .

$$a^2 = \frac{1}{\beta\Omega^2} [\frac{1}{2}\beta\Omega \coth(\frac{1}{2}\beta\Omega) - 1], \quad (5)$$

whereas the minimization in a^2 determines Ω^2 as a function of the smeared potential,

$$\Omega^2(x_0) = 2 \frac{\partial}{\partial a^2} V_{a^2}(x_0) = \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} V_{a^2}(x_0). \quad (6)$$

We can briefly sum up the justification of these rules as follows: the variational ansatz makes use of the trial partition function of an harmonic oscillator centered at x_0 with the local action

$$\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}} = \int_0^\beta d\tau [\frac{1}{2}\dot{x}^2 + \frac{1}{2}\Omega^2(x_0)(x-x_0)^2], \quad (7)$$

where we set $M = \hbar = 1$.

The local harmonic partition function can then be defined by

$$\begin{aligned} Z_{\tilde{W}}^{\text{op}} &= \exp[-\beta V_{\tilde{W}}^{\text{op}}(x_0)] \\ &= \int \mathcal{D}x \tilde{\delta}(\bar{x}-x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}}) \\ &= \frac{\frac{1}{2}\beta\Omega(x_0)}{\sinh[\frac{1}{2}\beta\Omega(x_0)]}. \end{aligned} \quad (8)$$

where $\tilde{\delta}$ is the modified Dirac distribution,

$$\tilde{\delta}(\bar{x}-x_0) = \sqrt{2\pi\beta} \delta(\bar{x}-x_0). \quad (9)$$

Expectations within the local trial partition function will be denoted by $\langle \dots \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}}$, i.e.

$$\langle \dots \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}} \equiv \frac{1}{Z_{\tilde{W}}^{\text{op}}} \int \mathcal{D}x \tilde{\delta}(\bar{x}-x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}}) \dots \quad (10)$$

Thus, using Eqs. (8), (10), we can obtain

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}x \tilde{\delta}(\bar{x}-x_0) \exp(-\mathcal{A}) \\ &\equiv \int \mathcal{D}x \tilde{\delta}(\bar{x}-x_0) \exp(-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}}) \exp[-(\mathcal{A}-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}})] \\ &= \langle \exp[-(\mathcal{A}-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}})] \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}}, \end{aligned} \quad (11)$$

where \mathcal{A} is the Euclidean action given by

$$\mathcal{A} = \int_0^\beta d\tau [\frac{1}{2}\dot{x}^2 + V(x(\tau))]. \quad (12)$$

The Jensen-Peierls inequality,

$$\begin{aligned} &\langle \exp[-(\mathcal{A}-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}})] \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}} \\ &\geq \exp(-\langle \mathcal{A}-\mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}} \rangle), \end{aligned} \quad (13)$$

allows us then to infer the F-K approximation for the effective classical potential,

$$\begin{aligned} V_{\text{eff,cl}}(x_0) &\approx W_1(x_0) \\ &\equiv V_{\tilde{W}}^{\text{op}}(x_0) + V_{a^2}(x_0) - \frac{1}{2}\Omega^2(x_0)a^2(x_0), \end{aligned} \quad (14)$$

where the last two terms are given by the following probabilities,

$$\frac{1}{\beta} \langle \mathcal{A} \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}} = \langle V(x) \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}} = V_{a^2}(x_0), \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \langle \mathcal{A}_{\tilde{W}}^{\text{op}} \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}} &= \frac{1}{2}\Omega^2(x_0) \langle (x-x_0)^2 \rangle_{\tilde{W}}^{\text{op}} \\ &\equiv \frac{1}{2}\Omega^2(x_0)a^2(x_0). \end{aligned} \quad (15b)$$

The resulting approximation of the partition function can then be written as

$$Z_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp[-\beta W_1(x_0)]. \quad (16)$$

The classical limit of the partition function is reached for high temperature ($T \rightarrow \infty$), where $V_{\text{eff,cl}} \rightarrow V(x_0)$ and therefore

$$Z \rightarrow Z_d = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \exp[-\beta V(x_0)], \quad (17)$$

leading to a free energy $F_1 = -\beta^{-1} \ln Z_1$, which is a fairly good description, for all temperatures, of $F = -\beta^{-1} \ln Z$, the true free energy of the system.

The following potentials have been treated via the F-K approximation, but without systematic correction to the variational calculation of the classical effective potential, namely, the harmonic oscillator [2,3], the Coulomb potential [9], the Yukawa potential [2,3], the anharmonic oscillator plus Dirac distribution [10] and the harmonic oscillator class of potentials obtained through the factorization method [11].

The Morse potential has been used in various branches of physics, including chemical physics [12]. The factorization method has provided a way to find new solvable potentials from known ones. A class of solvable potentials, related to the Morse potential, has thus been obtained through the factorization methods.

If we define the charges

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & a \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

where a and a^\dagger are bosonic annihilation and creation operators, the supersymmetric Hamiltonian can be written

$$H_m = QQ^\dagger + Q^\dagger Q = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^\dagger a & 0 \\ 0 & aa^\dagger \end{pmatrix}, \quad (19)$$

where H_+ and H_- are the supersymmetric partners.

Except for their ground state, the spectra of H_\pm will be identical.

Let us consider the factorized Hamiltonian

$$H_+ = a^\dagger a, \quad (20)$$

where

$$a = \frac{d}{dx} + \lambda(1 - e^{-x}) - \frac{1}{2},$$

$$a^\dagger = -\frac{d}{dx} + \lambda(1 - e^{-x}) - \frac{1}{2}, \quad (21)$$

λ being the parameter characterizing the Morse oscil-

lator potential [13] defined as

$$V_M(x) = \lambda^2(1 - e^{-x})^2 - \lambda + \frac{1}{4}, \quad (22)$$

where the constant term $-\lambda + \frac{1}{4}$ is used exclusively to shift the energy spectrum, bringing thus the energy of the fundamental state down to zero.

The Hamiltonian (20) can also be written as

$$H_+ = -\frac{d^2}{dx^2} + \lambda^2(1 - e^{-x})^2 - \lambda + \frac{1}{4}. \quad (23)$$

As they correspond to the commutation relation

$$[a^\dagger, a] = -2\lambda e^{-x}, \quad (24)$$

the two operators a and a^\dagger , defined by relations (21), are obviously not the usual creation and annihilation operators.

The commutation relation (24) helps to define H_- , the supersymmetric Hamiltonian partner of Hamiltonian H_+ (23),

$$H_- = aa^\dagger = a^\dagger a + 2\lambda e^{-x}, \quad (25)$$

the corresponding potential being given by

$$V_- = \lambda^2(1 - e^{-x})^2 + 2\lambda e^{-x} - \lambda + \frac{1}{4}. \quad (26)$$

Both supersymmetric partners H_+ and H_- have the same energy spectrum, to an approximation of one global shift.

If we call $\psi_{\pm, n}$ the eigenfunctions of H_\pm , the following equation is valid,

$$\psi_{-, n} = a\psi_{+, n}. \quad (27)$$

A new Hamiltonian $\mathcal{H}_+ = A^\dagger A$ and the corresponding potential V_+ can be defined through

$$A = \frac{d}{dx} + f(x), \quad A^\dagger = -\frac{d}{dx} + f(x). \quad (28)$$

If we impose the following condition on H_- ,

$$H_- = AA^\dagger, \quad (29)$$

we are led to a Ricatti differential equation

$$\lambda^2(1 - e^{-x})^2 + 2\lambda e^{-x} - \lambda + \frac{1}{4}$$

$$= \frac{d}{dx} f(x) + f^2(x), \quad (30)$$

whose solution can easily be obtained,

$$f(x) = \lambda(1 - e^{-x}) - \frac{\exp[-x(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x}]}{\Gamma + \int_0^x \exp[-x'(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x'}] dx'} \quad (31)$$

where Γ is an integration constant which can be chosen positive so as to avoid any singularity.

The operators A and A^\dagger have the following commutator,

$$[A^\dagger, A] = -2 \frac{d}{dx} f(x) = -2\lambda e^{-x} - 2 \frac{d\phi(x)}{dx} \quad (32)$$

where

$$\phi(x) = \frac{\exp[-x(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x}]}{\Gamma + \int_0^x \exp[-x'(2\lambda - 1) - 2\lambda e^{-x'}] dx'} \quad (33)$$

It is clear that for the new Hamiltonian

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_+ &= A^\dagger A = AA^\dagger + [A^\dagger, A] \\ &= AA^\dagger - 2\lambda e^{-x} - 2 \frac{d\phi(x)}{dx} \end{aligned} \quad (34)$$

we have the corresponding potential

$$V_+ = \lambda^2(1 - e^{-x}) - \lambda + \frac{1}{2} - 2 \frac{d\phi(x)}{dx} \quad (35)$$

From supersymmetry, we know that the spectrum of \mathcal{H}_+ is the same as for H_- (except for the ground state), the eigenfunctions $\Psi_{+,n}$ of \mathcal{H}_+ being linked to the eigenfunctions $\psi_{-,n}$ of H_- by

$$\Psi_{+,n} = A^\dagger \psi_{-,n} \quad (36a)$$

with

$$A \Psi_{+,0} = 0 \quad (36b)$$

for the ground state. Then it is readily seen that

$$\begin{aligned} \Psi_{+,0} &= \text{const} \times \exp[-\gamma(\lambda - \frac{1}{2})] \exp(-\lambda e^{-x}) \\ &\times \exp\left(-\int_0^x \phi(y') dy'\right) \end{aligned} \quad (36c)$$

The new eigenfunctions $\Psi_{+,n}$ may, of course, be determined from the eigenfunctions $\psi_{+,n}$ of the original Morse oscillator (Eq. (22)),

$$\Psi_{+,n} = A^\dagger a \psi_{+,n} \quad (37)$$

Let us apply the F-K method [1-3] to the supersym-

metric generalization of the Morse potential (Eq. (35)).

This result itself may be corrected according to the Kleinert prescription [6], by expanding the Euclidean action (12) into a series of fluctuations around the time average $\bar{x}'(\tau) = x(\tau) - x_0$, namely

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}^{x_0} \quad (38a)$$

where

$$\mathcal{A}_0 = \beta V_+(x_0) \quad (38b)$$

and

$$\mathcal{A}^{x_0} = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2} \dot{x}^2 + V_+^{x_0}(x'(\tau)) \right] \quad (39a)$$

with

$$\begin{aligned} V_+^{x_0}(x') &= \frac{V_+''(x_0)}{2!} x'^2 \\ &+ \frac{V_+^{(3)}(x_0)}{3!} x'^3 + \frac{V_+^{(4)}(x_0)}{4!} x'^4 + \dots \end{aligned} \quad (39b)$$

Of course we have no $V_+^{(2)}(x_0)$ term here, as by definition

$$\bar{x}' \equiv \int_0^\beta d\tau x'(\tau) = 0.$$

The action \mathcal{A} (38), (39) can be decomposed into an interaction action $\mathcal{A}_{int}^{x_0} = \mathcal{A}^{x_0} - \mathcal{A}^{\mathcal{H}}$, increased by the local action (7), the exponential $\exp(-\mathcal{A}_{int}^{x_0})$ being replaced with its expansion in a power series up to order three.

The expectations within the trial partition function $\mathcal{Z}^{\mathcal{H}}$, can then be given by

$$\begin{aligned} \exp(-\beta W^{\mathcal{H}}) &\equiv \exp[-\beta V_+(x_0) - \beta V_+^{\mathcal{H}} - \langle \mathcal{A}_{int}^{x_0} \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}} \\ &+ \frac{1}{2} \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^2 \rangle_{\mathcal{H},c}^{\mathcal{H}} - \frac{1}{6} \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^3 \rangle_{\mathcal{H},c}^{\mathcal{H}}] \end{aligned} \quad (40)$$

where the subscript c defines the connected correlation functions via the cumulant expansion,

$$\begin{aligned} \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^2 \rangle_{\mathcal{H},c}^{\mathcal{H}} &= \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^2 \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}} - (\langle \mathcal{A}_{int}^{x_0} \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}})^2, \\ \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^3 \rangle_{\mathcal{H},c}^{\mathcal{H}} &= \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^3 \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}} \\ &- 3 \langle (\mathcal{A}_{int}^{x_0})^2 \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}} \langle \mathcal{A}_{int}^{x_0} \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}} \\ &+ 2 (\langle \mathcal{A}_{int}^{x_0} \rangle_{\mathcal{H}}^{\mathcal{H}})^3, \dots \end{aligned} \quad (41)$$

We can see that the F-K approximation [1-3] consists of stopping at the first term of $\mathcal{A}_{int}^{x_0}$, and that the improvement proposed by Kleinert [6] consists of adding the last two terms in (40).

The approximate local free energy of the system is obtained by extremizing $W_3^{x_0}$ defined by (40) with respect to trial frequency. To assess the exact free energy, we can write the accurate distribution [2]

$$\rho_{ex}(x', x) = \sum_n \Psi_{+,n}(x') \Psi_{+,n}^*(x) \exp(-\beta E_n), \tag{42}$$

the eigenfunctions $\Psi_{+,n}$ being given by eqs. (36), (37) and the energies E_n being the exact energies of the system. The exact partition function of the system is given by [2]

$$Z_{ex} = \int \rho_{ex}(x, x) dx. \tag{43}$$

Table 1 allows us to compare the new approximation $E_3^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_3^0$ for the ground state energy of the Morse potential generalized by supersymmetry, for various constants Γ , as compared with the exact energy $E_{ex}^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_{ex}^0$, and with the Feynman-Kleinert approximation $E_{FK}^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_{FK}$. Here Γ represents any constant, chosen positive nevertheless, in order to avoid singularities.

Figs. 1-4 give F_{ex} , F_{FK} and F_{cl} versus $\beta = 1/T$, for $\Gamma = 0.1, 0.5, 1.0$ and 5.0 respectively.

The curve F_3 cannot be seen in the figures, since it

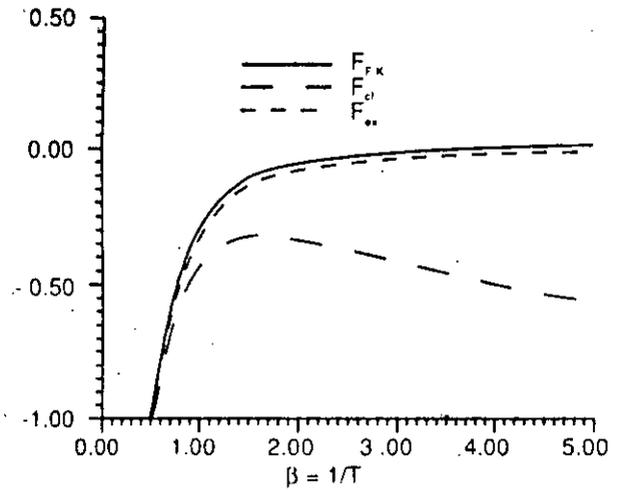


Fig. 1. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=0.1$, versus $\beta=1/T$.

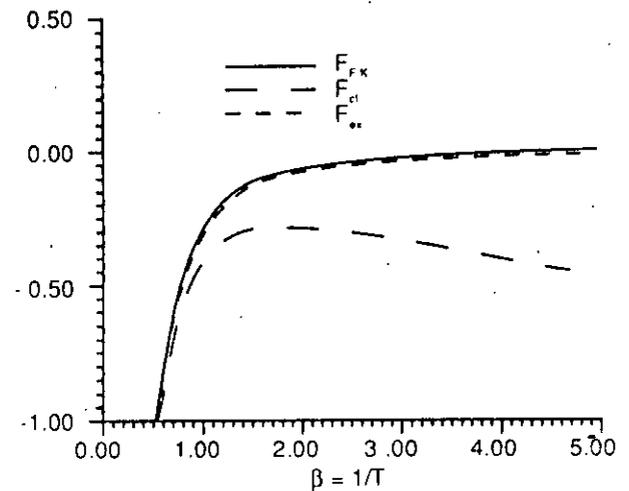


Fig. 2. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=0.5$, versus $\beta=1/T$.

Table 1
F-K ground state energies, E_1^0 , Kleinert's improved energies E_3^0 and exact energies E_{ex}^0 , for various values of the parameter Γ of the generalized Morse potential

Γ	E_1^0	E_3^0	E_{ex}^0
0.1	0.02710565	0.01759870	-0.012327
0.2	0.02294651	0.00650537	-0.012119
0.3	0.02159368	0.00159615	-0.011856
0.4	0.02090351	-0.00105377	-0.011691
0.5	0.02050745	-0.00265970	-0.011440
0.6	0.02024515	-0.00374707	-0.011183
0.7	0.02005869	-0.00453044	-0.010871
0.8	0.01991941	-0.00511917	-0.010723
0.9	0.01981127	-0.00557708	-0.010595
1.0	0.0197299	-0.00594789	-0.010468
2.0	0.01932791	-0.00764212	-0.010031
5.0	0.01911123	-0.0086444	-0.009506
10.0	0.01903456	-0.00898549	-0.009219

fully coincides with F_{ex} . Nevertheless, the numerical values of F_3 can be found in Table 1. We can notice that all graphs coincide for the low values of β and that F_{FK} and F_{ex} coincide for all values of β .

Let us plot the two-dimensional generalized Morse potential from Eq. (35), for various values of Γ , in Fig. 5: It appears that if Γ is positive, the above potential has no singularity and behaves like $V_M(x)$ of Eq. (22), for $x \rightarrow \pm\infty$. Clearly, their spectra are identical to that of the Morse potential $V_M(x)$. For finite values of Γ , the generalized Morse potential is different from the Morse potential; nevertheless, from the supersymmetry we know that the energy eigenvalues are identical to those of the Morse potential. Potentials $V_+(x)$ and $V_M(x)$ are identical only for $\Gamma = \infty$.

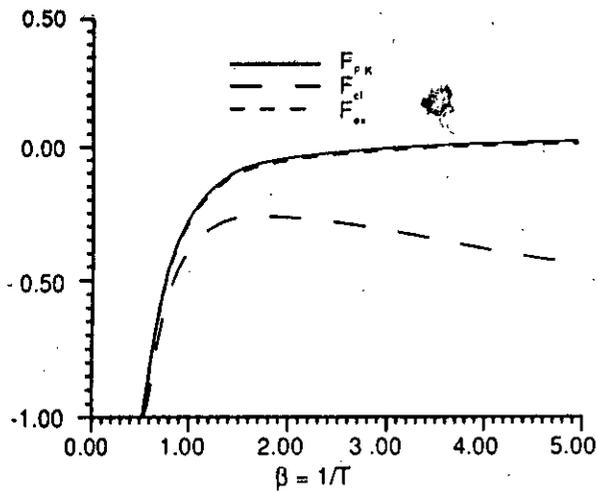


Fig. 3. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=1.0$, versus $\beta=1/T$.

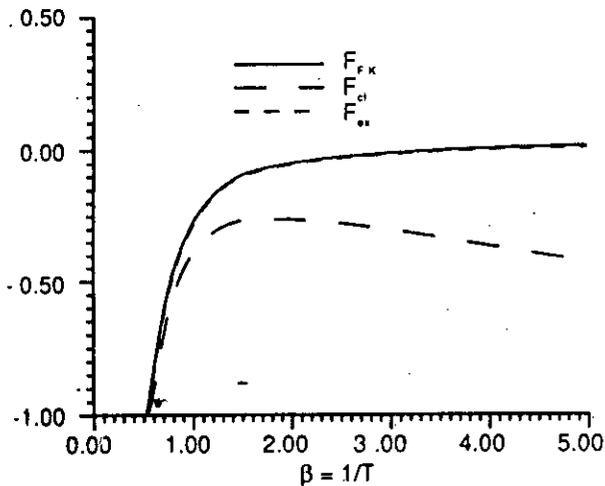


Fig. 4. F_{ex} , F_{cl} , F_{FK} , for $\Gamma=5.0$, versus $\beta=1/T$.

To conclude, we may say that the semi-classical approximation proposed by Feynman and Kleinert [1-3] is shown to yield reasonable and interesting results, when it is applied to the Morse potential generalized by supersymmetry, and that the systematic Kleinert improvement scheme [6] to the Feynman-Kleinert approximation is extremely accurate.

The Feynman-Kleinert method reveals differences between E_1^0 and E_{ex}^0 , of about 32% for $\Gamma=0.1$ and of about 31% for $\Gamma=10$, whereas if Kleinert's

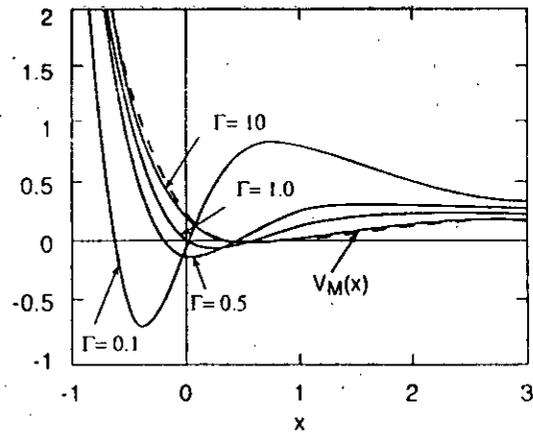


Fig. 5. One-dimensional generalized Morse potential $V_+(x)$ for various values of Γ (full lines) and Morse potential $V_M(x)$ (dotted line).

systematic corrections are taken into account, the difference comes down to 23% for $\Gamma=0.1$ and even 0.1% for $\Gamma=10$.

These results can be understood by observing that in general, the limit $E_3^0 = \lim_{T \rightarrow 0} F_3$, is equal to the minimum at $T=0$, of W'_{3^0} defined by (40).

References

- [1] R.P. Feynman and H.R. Hibbs, Quantum mechanics and path-integrals (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [2] R.P. Feynman and H. Kleinert, Phys. Rev. A 34 (1986) 5080; H. Kleinert, Phys. Lett. B 181 (1986) 324; Phys. Lett. A 18 (1986) 267.
- [3] H. Kleinert, Path-integrals in quantum mechanics, statistics and polymer physics (World-Scientific, Singapore, 1990).
- [4] E.D. Filho, J. Phys. A 21 (1988) L1025.
- [5] I.H. Duru and H. Kleinert, Phys. Lett. B 84 (1979) 30.
- [6] H. Kleinert, Phys. Lett. A 173 (1993) 332.
- [7] H. Kleinert, Fortsch. Phys. 30 (1982) 187.
- [8] Y. Fujimoto, L. O'Raiheartaigh and G. Parravicini, Nucl. Phys. B 212 (1983) 268.
- [9] W. Janke and H. Kleinert, Phys. Lett. A 118 (1986) 371.
- [10] W. Janke and B.K. Cheng, Phys. Lett. A 129 (1988) 140.
- [11] M. Bentaïba, L. Chetouani and T.F. Hamann, Z. Naturforsch. 47a (1992) 1013.
- [12] P.M. Morse, J.B. Fisk and L.I. Schiff, Phys. Rev. 50 (1936) 748.
- [13] M.M. Nieto and L.M. Simmons, Phys. Rev. A 19 (1979) 438.

Classification
Physics Abstracts
 03.65B — 03.65D — 03.65G

Path-integral solutions for a class of 2D systems with local degeneracies

M. Bentaiba ^(1, 3), M. Benkaddour ⁽¹⁾, L. Chetouani ⁽²⁾ and T. F. Hammann ^(3, *)

⁽¹⁾ Laboratoire de Physique Théorique, Institut de Physique, Université de Blida, Blida, Algeria

⁽²⁾ Département de Physique Théorique, Institut de Physique, Université de Constantine, Constantine, Algeria

⁽³⁾ Laboratoire de Mathématiques, Physique Mathématique et Informatique, Faculté des Sciences et Techniques, Université de Haute Alsace, 4 rue des Frères Lumière, F-68093 Mulhouse Cedex, France

(Received 30 April 1993, revised 19 July 1993, accepted 3 September 1993)

Résumé. — Le potentiel $V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}$ est étudié par les Intégrales de Parcours. La fonction de Green est calculée pour $E = 0$ et d quelconque, en coordonnées polaires et dans des coordonnées généralisant les coordonnées de Lévi-Civita. Il est montré que cette fonction de Green est la somme d'une partie discrète mais finie et d'une partie continue. Des cas limites et des cas particuliers sont étudiés.

Abstract. — The potential $V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}$ is studied *via* the path integral approach. The Green function is calculated for $E = 0$ and for any value of d in polar coordinates as well as in coordinates generalizing the Levi-Civita transformation. It is shown that this Green function is the sum of a discrete but finite part and of a continuous part. Limiting cases will be investigated.

1. Introduction.

The aim of this paper is to use the formalism of path integrals to calculate the Green function relative to the potential class defined by

$$V(r) = \alpha r^{2d-2} - \beta r^{d-2}, \quad (1)$$

where α and β are positive parameters and d is a positive or nil rational number. So, for $d = 1$, $V(r) = \alpha - \beta/r$ is the Coulomb potential, and for $d = 2$, $V(r) = \alpha r^2 - \beta$ is the harmonic oscillator.

This two dimensional potential class has been recently studied [1-3], and it was proved that the state corresponding to $E = 0$ featured a multiple order degeneracy because of certain hidden symmetry properties.

(*) To whom requests for reprints should be addressed.

It is shown that the Green function can be calculated for any d and for $E = 0$ by-first-using the polar coordinates.

It is well known that, say, for the Coulomb potential, the Green function can be written in compact form *via* the Levi-Civita transformation. Thus we generalize this transformation for any d in order to calculate the Green function. We sum up the series obtained in polar coordinates by showing that it is composed of two parts, namely a discrete and finite sum of Green functions as well as a continuous one. We shall also consider a few limiting cases for $E = 0$ and deduce the energy spectrum and the wave functions for any E and for $d = 1$ and 2 .

2. Green functions in polar coordinates.

In the canonical formulation of the path integrals, the propagator is written formally as follows, in standard notation,

$$K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) = \int \mathcal{D}x \mathcal{D}p_x \mathcal{D}y \mathcal{D}p_y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[P_x \dot{x} + P_y \dot{y} - \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} - V(x, y) \right] dt \right\}. \quad (2)$$

The radial potential class (1) presents singularities for all values of the rational number $d \in [0, 2[$.

Thus let us use the Duru-Kleinert transformation [4-6], which consists in choosing an adequate regulating function $f(\mathbf{r}) > 0$, in order to avoid a path collapsing.

Let us use a $t \rightarrow s$ time transformation defined by

$$dt = ds f(\mathbf{r}) = ds f_\ell(\mathbf{r}) f_r(\mathbf{r}), \quad (3)$$

or in the discrete version,

$$\varepsilon = \varepsilon_S f_\ell(\mathbf{r}_n) f_r(\mathbf{r}_{n-1}), \quad T = (N+1)\varepsilon, \quad S = (N+1)\varepsilon_S,$$

where f_ℓ and f_r are two regulating functions chosen adequately so as to stabilize the path integral.

Using the Green function, we now introduce the energy E , setting $m = \hbar = 1$ for all that follows,

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^\infty dT K(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; T) \exp(iET) = \int_0^\infty dS P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S), \quad (4)$$

the new form of the P_E Kernel being

$$P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) = \frac{f_r(\mathbf{r}_f) f_\ell(\mathbf{r}_i)}{2\pi i \varepsilon_S f_\ell(\mathbf{r}_f) f_r(\mathbf{r}_i)} \prod_{n=1}^N \int \frac{d^2 r_n}{2\pi i \varepsilon_S f(\mathbf{r})} \exp(iA_E^N), \quad (5a)$$

where

$$A_E^N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1})^2}{2\varepsilon_S f_\ell(\mathbf{r}_n) f_r(\mathbf{r}_{n-1})} - \varepsilon_S f_\ell(\mathbf{r}_n) [V(\mathbf{r}_n) - E] f_r(\mathbf{r}_{n-1}) \right\}, \quad (5b)$$

is the new action.

An appropriate family of regulating functions is given by

$$f_\ell(\mathbf{r}) = |f(\mathbf{r})|^{1-\lambda} \quad \text{and} \quad f_r(\mathbf{r}) = |f(\mathbf{r})|^\lambda.$$

Set $\lambda = 0$ to simplify the post-point prescription calculation. The stabilizing functions are now

$$f_t \equiv f \quad \text{and} \quad f_r \equiv 1;$$

Having a central two-dimensional potential, it may seem convenient to go over to the usual polar coordinate system, $x = r \cos \theta$ and $y = r \sin \theta$; yet, these coordinates cannot prevent path collapsing. We therefore shift the singularities to infinity with the transformation $(x, y) \rightarrow (q, \theta)$ defined by the following equations:

$$r = e^q, \quad -\infty < q < +\infty \quad \text{and} \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi. \quad (6)$$

With these new variables, the action can be written in terms of the following expressions

$$\begin{aligned} \Delta x_n &= x_n - x_{n-1} = r_n \cos \theta_n - r_{n-1} \cos \theta_{n-1}, \\ \Delta y_n &= y_n - y_{n-1} = r_n \sin \theta_n - r_{n-1} \sin \theta_{n-1}, \\ \Delta r_n &= e^{q_n} - e^{q_{n-1}}, \quad \Delta q_n = q_n - q_{n-1}, \quad \Delta \theta_n = \theta_n - \theta_{n-1}. \end{aligned}$$

The regulating function being now defined as

$$f = e^{2q},$$

the action is then

$$A_E^N = \sum_{n=1}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2 \epsilon_S} [(\Delta q_n)^2 + (\Delta \theta_n)^2] - \epsilon_S [\alpha e^{2q_n} - \beta e^{dq_n} - E e^{2q_n}] + \Delta A_n \right\}, \quad (7a)$$

where the correction ΔA_n is explicitly given by

$$\Delta A_n = \frac{1}{2 \epsilon_S} \left\{ -(\Delta q_n)^3 + \frac{7}{12} (\Delta q_n)^4 - (\Delta q_n) (\Delta \theta_n)^2 + \frac{(\Delta q_n)^2 (\Delta \theta_n)^2}{2} - \frac{1}{12} (\Delta \theta_n)^4 \right\}. \quad (7b)$$

Let us now integrate with respect to the intervals, instead of the x_n and y_n positions,

$$\prod_{n=1}^N \int dx_n dy_n = \prod_{n=2}^{N+1} d(\Delta x_n) d(\Delta y_n).$$

The Jacobian of this transformation being equal to

$$J_{n-1} = \frac{\partial(\Delta x_n, \Delta y_n)}{\partial(\Delta q_n, \Delta \theta_n)} = e^{2q_{n-1}},$$

the measure of equation (5a) is given by

$$\frac{1}{2 \pi i \epsilon_S} \prod_{n=2}^{N+1} \frac{d(\Delta q_n) d(\Delta \theta_n)}{2 \pi i \epsilon_S} \prod_{n=1}^{N-1} e^{-2\Delta q_n} = \frac{1}{2 \pi i \epsilon_S} \prod_{n=2}^{N+1} \int \frac{d(\Delta q_n) d(\Delta \theta_n)}{2 \pi i \epsilon_S} \prod_{n=1}^{N-1} (1 + C_{\text{meas}}), \quad (8)$$

wherein

$$C_{\text{meas}} = -2 \Delta q_n + \dot{2}(\Delta q_n)^2,$$

is the correction relative to the measure.

Taking into account the two corrections originating in the action and in the measure, we now come to the total correction C_T ,

$$C_T = i \Delta A_N - \frac{(\Delta A_N)^2}{2} + C_{\text{meas}}(1 + i \Delta A_N). \quad (9)$$

If we miss out the terms $\Delta q_n \Delta \theta_n$ which do not contribute within the $\varepsilon_S \rightarrow 0$ limit, we obtain

$$(\Delta A_N)^2 = \frac{1}{4 \varepsilon_S^2} [(\Delta q_n)^6 + 2(\Delta q_n)^4 (\Delta \theta_n)^2 + (\Delta q_n)^2 (\Delta \theta_n)^4],$$

$$C_{\text{meas}} \Delta A_N \cong \frac{1}{2 \varepsilon_S} [2(\Delta q_n)^4 + 2(\Delta q_n)^2 (\Delta \theta_n)^2].$$

By taking into account the relations,

$$\begin{aligned} \langle (\Delta q)^2 \rangle &= i \varepsilon_S, & \langle (\Delta \theta)^2 \rangle &= i \varepsilon_S, & \langle (\Delta q)^2 (\Delta \theta)^2 \rangle &= (i \varepsilon_S)^2, & \langle (\Delta q)^4 \rangle &= 3(i \varepsilon_S)^2, \\ \langle (\Delta \theta)^4 \rangle &= 3(i \varepsilon_S)^2, & \langle (\Delta q)^6 \rangle &= 15(i \varepsilon_S)^3, & \langle (\Delta q)^2 (\Delta \theta)^4 \rangle &= 3(i \varepsilon_S)^3, \\ & & & & \langle (\Delta q)^4 (\Delta \theta)^2 \rangle &= 3(i \varepsilon_S)^3, \end{aligned}$$

correction (9) thus leads to an effective nil potential, $V_{\text{eff}} = 0$.

Thus, from the above results we can readily obtain

$$\begin{aligned} P_E^N(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; (N+1) \varepsilon_S) &= \frac{1}{2 \pi i \varepsilon_S} \int \prod_{n=2}^{N+1} \frac{d(\Delta q_n) d(\Delta \theta_n)}{2 \pi i \varepsilon_S} \times \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \left[\frac{1}{2 \varepsilon_S} [(\Delta q_n)^2 + (\Delta \theta_n)^2] - \varepsilon_S [\alpha e^{2dq_n} - \beta e^{dq_n} - E e^{2q_n}] \right] \right\}, \quad (10) \end{aligned}$$

and it follows that

$$\begin{aligned} P_E(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; S) &= \\ &= \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \mathcal{D}\theta \mathcal{D}p_\theta \exp \left\{ i \int_0^S dS \left[p\dot{q} + p_\theta \dot{\theta} - \frac{p^2}{2} - \frac{p_\theta^2}{2} - \alpha e^{2dq} + \beta e^{dq} + E e^{2q} \right] \right\}. \quad (11) \end{aligned}$$

Integrating over the angular variable we are led to

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{il(\theta_f - \theta_i)}}{2 \pi} \int_0^\pi dS e^{-if^2 S^2} \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left[i \int_0^S (p\dot{q} - H) dS \right], \quad (12a)$$

where the Hamiltonian H is a function of the (q, p) coordinates,

$$H = \frac{p^2}{2} + \alpha e^{2dq} - \beta e^{dq} - E e^{2q}. \quad (12b)$$

Thus, we have reduced the motion of the particle subjected to the action of potential (1), to a motion governed by the sum of three exponential potentials. It is obvious that the Green function can be analytically calculated only for a combination of two exponentials, i.e. a Morse like potential. One can see that there are four cases admitting an exact solution:

i) First case: the centrifugal barrier, $d = 0$.

In the (q, s) coordinate system, the problem of the barrier is described by

$$H = \frac{p^2}{2} - E e^{2q} + (\alpha - \beta). \quad (13)$$

ii) Second case : the Coulomb problem, $d = 1$.

In the (q, s) coordinate system, the Coulomb problem is described by the Hamiltonian related to the Morse potential [7],

$$H = \frac{p^2}{2} + (\alpha - E) e^{2q} - \beta e^q. \quad (14)$$

iii) Third case : the harmonic oscillator, $d = 2$.

The Hamiltonian describing the H.O. in the (q, s) coordinate system is also related to the Morse Potential [7],

$$H = \frac{p^2}{2} + \alpha e^{4q} - (\beta + E) e^{2q}. \quad (15)$$

iv) Fourth case : any d and $E = 0$.

In this case, the Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2} + \alpha e^{2dq} - \beta e^{dq}, \quad (16)$$

is also related to the Morse potential.

Let us analyse this important 4th case : the Green function can be written

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \sum_i^z \frac{1}{2\pi} \exp[i\ell(\theta_f - \theta_i)] \langle q_f | q_i \rangle, \quad (17a)$$

with

$$\langle q_f | q_i \rangle = \int_0^x dS \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left\{ i \int_0^x dS \left[p\dot{q} - \frac{p^2}{2} - \alpha e^{2dq} + \beta e^{dq} - \frac{\ell^2}{2} \right] \right\}. \quad (17b)$$

With the help of $w = r^{d/2} = \exp[dq/2]$ transformation, we see that there is a simple relation between $\langle q_f | q_i \rangle$ and $\langle w_f | w_i \rangle$ given by [4], namely,

$$\frac{d}{2} \exp \left[\frac{d}{4} (q_f + q_i) \right] \langle q_f | q_i \rangle = \langle w_f | w_i \rangle, \quad (18)$$

where

$$\langle w_f | w_i \rangle = \int_0^x dS \exp \left[iS \left(\frac{2}{d} \right)^2 \beta \right] \left\{ \int \mathcal{D}w \mathcal{D}P_w \exp[iA_{\text{osc}}] \right\}, \quad (19)$$

with

$$A_{\text{osc}} = \int_0^x dS \left[P_w \dot{w} - \frac{P_w^2}{2} - \left(\frac{2}{d} \right)^2 \alpha w^2 - \frac{1}{2} \frac{(2\ell/d)^2 - 1/4}{w^2} \right], \quad (20)$$

being the amplitude related to the radial harmonic oscillator.

As we know the expression of $\langle w_f | w_i \rangle$ [4], the Green function can finally be given by

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{d\pi} \int_0^\infty dS \exp \left[iS \left(\frac{2}{d} \right)^2 \beta \right] \left[\frac{2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha/d})} \right] \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{d} [r_f^d + r_i^d] \cot(2S\sqrt{2\alpha/d}) \right\} I_{2|\ell|} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha} r_f^{d/2} r_i^{d/2}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha/d})} \right). \quad (21)$$

We shall notice that, at this stage, equation (21) allows us to deduce, for any E , the Green functions relative to

i) the Coulomb potential: we just have to set $d = 1$ and replace α with $(\alpha - E)$:

$$G_{\text{Coul}}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)} \int_0^\infty dS \exp(4i\beta S) \frac{2\sqrt{2(\alpha - E)}}{i \sin(2S\sqrt{2(\alpha - E)})} \times \\ \times \exp \left[i\sqrt{2(\alpha - E)} (r_f + r_i) \cot(2S\sqrt{2(\alpha - E)}) \right] I_{2|\ell|} \left(\frac{2\sqrt{2(\alpha - E)} (r_f r_i)^{1/2}}{i \sin(2S\sqrt{2(\alpha - E)})} \right). \quad (22)$$

ii) The two-dimensional harmonic oscillator: we just have to set $d = 2$ and to replace β with $\beta + E$:

$$G_{\text{OH}}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \sum_{\ell=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)} \int_0^\infty dS e^{iS(\beta + E)} \left[\frac{\sqrt{2\alpha}}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \right] \times \\ \times \exp \left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{2} (r_f^2 + r_i^2) \right] \cot(S\sqrt{2\alpha}) I_{|\ell|} \left[\frac{\sqrt{2\alpha} r_f r_i}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \right]. \quad (23)$$

Now it is well known that there is a compact form for the green function of the two-dimensional Coulomb potential [4]. This compact form can be obtained via a Levi-Civita type transformation generalized for any d .

3. The Green function via the Levi-Civita type transformation.

3.1 GREEN FUNCTION IN (u, v) COORDINATES. — Let us consider the well known transformation $(r, \theta) \rightarrow (z, z^*)$,

$$z = r e^{i\theta} \quad \text{and} \quad z^* = r e^{-i\theta},$$

as well as a $(z, z^*) \rightarrow (w, w^*)$ transformation, defined by

$$w = \sqrt{2d} z^{d/2} = u + iv, \quad w^* = \sqrt{2id} z^{*d/2} = u - iv. \quad (24)$$

The passage from (x, y) coordinates to the new (u, v) coordinates is given by the following relations

$$\left. \begin{aligned} x &= \left(\frac{d}{2} \right)^{1/d} \frac{(u + iv)^{2/d} + (u - iv)^{2/d}}{2} \\ y &= \left(\frac{d}{2} \right)^{1/d} \frac{(u + iv)^{2/d} - (u - iv)^{2/d}}{2i} \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Thus,

$$\left. \begin{aligned} u &= \sqrt{\frac{2}{d}} r^{d/2} \cos \frac{d\theta}{2}, \\ v &= \sqrt{\frac{2}{d}} r^{d/2} \sin \frac{d\theta}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

The areas of variation for (u, v) depend upon d and θ . In matrix notation the system of linear equations (25) may be written as

$$\mathbf{r} = B\mathbf{V}, \quad \mathbf{r} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad (27)$$

where

$$B = \left(\frac{d}{2}\right)^{1/d} \begin{bmatrix} \frac{(u+iv)^{\frac{2}{d}-1} + (u-iv)^{\frac{2}{d}-1}}{2} & -\frac{(u+iv)^{\frac{2}{d}-1} - (u-iv)^{\frac{2}{d}-1}}{2i} \\ \frac{(u+iv)^{\frac{2}{d}-1} - (u-iv)^{\frac{2}{d}-1}}{2i} & \frac{(u+iv)^{\frac{2}{d}-1} + (u-iv)^{\frac{2}{d}-1}}{2} \end{bmatrix}$$

For $d = 1$, the Levi-Civita transformation

$$x = \frac{u^2 - v^2}{2}, \quad y = uv,$$

can be recognized.

With these new (u, v) coordinates, the Kernel $P_E(\mathbf{V}_f, \mathbf{V}_i; S)$ of the Green function (4) can now be written,

$$\begin{aligned} P_E(\mathbf{V}_f, \mathbf{V}_i; S) &= \frac{g_r(\mathbf{V}_f) g_t(\mathbf{V}_i)}{2 \pi i \epsilon_S g_t(\mathbf{V}_f) g_r(\mathbf{V}_i)} \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^N \frac{1}{2 \pi i \epsilon_S g(\mathbf{V}_N)} \sum_{n=2}^{N+1} d(\Delta u_n) d(\Delta v_n) J_{n-1} \times \\ &\times \exp \left\{ i \sum_{n=1}^{N+1} \frac{1}{2 \epsilon_S g_t(\mathbf{V}_N) g_r(\mathbf{V}_{n-1})} \left[\left(\frac{d}{2}\right)^{2d} |(u_n + iv_n)^{2d} - (u_{n-1} + iv_{n-1})^{2d}| \right] - \right. \\ &\quad \left. - \epsilon_S \left(\frac{d}{2}\right)^{2 \cdot 2d} (u_n^2 + v_n^2)^{1-1/d} g_t(\mathbf{V}_n) \right\} \times \\ &\times \left\{ \left[\alpha (u_n^2 + v_n^2) - 2 \beta / d - E \left(\frac{d}{2}\right)^{2d-2} (u_n^2 + v_n^2)^{2d-1} \right] g_r(\mathbf{V}_{n-1}) \right\}, \quad (28) \end{aligned}$$

where

$$J_{n-1} = \left| \frac{\partial(\Delta x_n, \Delta y_n)}{\partial(\Delta u_n, \Delta v_n)} \right| = \left(\frac{d}{2}\right)^{2d-2} (u_{n-1}^2 + v_{n-1}^2)^{2d-1},$$

is the Jacobian of the $(x, y) \rightarrow (u, v)$ transformation and $g = g_t g_r$ is a product of stabilizing functions.

Let us eliminate the term $g_r(\mathbf{V}_f) g_t(\mathbf{V}_i) [g_t(\mathbf{V}_f) g_r(\mathbf{V}_i)]^{-1}$ within the mid-point prescription,

$$g = g_t^2 = g_r^2 = J_n. \quad (29)$$

Thus,

$$|(u_n + iv_n)^2 - (u_{n-1} + iv_{n-1})^2| = \left(\frac{d}{2}\right)^2 (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2)^{2d-1} (\Delta u_n^2 + \Delta v_n^2) \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{(2-d)(2-3d)}{24d^2} \left[\left(\frac{\Delta u_n + i\Delta v_n}{\tilde{u}_n + i\tilde{v}_n} \right)^2 + \left(\frac{\Delta u_n - i\Delta v_n}{\tilde{u}_n - i\tilde{v}_n} \right)^2 \right] \right\} + \dots \quad (30)$$

and

$$g_l(\mathbf{V}_n) g_r(\mathbf{V}_{n-1}) \equiv g_l(\mathbf{V}_n) g_r(\mathbf{V}_{n-1}) = \left(\frac{d}{2}\right)^{2d-2} (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2)^{2d-1} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{d-2}{8d} \left[\left(\frac{\Delta u_n + \Delta v_n}{\tilde{u}_n + i\tilde{v}_n} \right)^2 + \left(\frac{\Delta u_n - i\Delta v_n}{\tilde{u}_n - i\tilde{v}_n} \right)^2 \right] \right\} + \dots, \quad (31)$$

wherein

$$\tilde{u}_n = \frac{u_n + u_{n-1}}{2} \quad \text{and} \quad \tilde{v}_n = \frac{v_n + v_{n-1}}{2}.$$

Thus, using (28) and (29), we obtain the two following quantities in the exponent of exponential from equation (28):

i) the action

$$A_N = \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ \frac{1}{2\epsilon_S} (\Delta u_n^2 + \Delta v_n^2) + \epsilon_S \left[\left(\frac{d}{2}\right)^{2d-2} E (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2)^{2d-1} + \frac{2\beta}{d} - \alpha (\tilde{u}_n^2 + \tilde{v}_n^2) \right] \right\}. \quad (32a)$$

Let us notice that this action is related, for $E = 0$, to a two dimensional harmonic oscillator whose motion is spatially constrained.

ii) a term grouping together all the fourth order terms in Δu_n and Δv_n ,

$$\Delta A_N = \frac{1}{2\epsilon_S} \sum_{n=1}^{N+1} \left\{ (\Delta u_n^2 + \Delta v_n^2) + \frac{(4-d^2)}{32d^2} \left[\left(\frac{\Delta u_n + i\Delta v_n}{\tilde{u}_n + i\tilde{v}_n} \right)^2 + \text{c.c.} \right] \right\}, \quad (32b)$$

namely the correction to the action A_N .

At the limit $\epsilon_S \rightarrow 0$, it is easy to make sure, thanks to

$$\langle \Delta u_n^4 \rangle = \langle \Delta v_n^4 \rangle; \quad \langle \Delta u_n^3 \Delta v_n \rangle \doteq \langle \Delta u_n \Delta v_n^3 \rangle = 0,$$

that $\langle \Delta A_N \rangle = 0$, which means that no effective potential is induced by these changes. So finally, the new kernel is the following:

$$P_E(\mathbf{V}_f, \mathbf{V}_i; S) = \int \mathcal{D}u \mathcal{D}p_u \mathcal{D}v \mathcal{D}p_v e^{iA_E}, \quad (33a)$$

where

$$A_E = \int_0^S dS' \left[p_u \dot{u} + p_v \dot{v} - \frac{p_u^2 + p_v^2}{2} + \alpha(u^2 + v^2) + \frac{2\beta}{d} + E \right]. \quad (33b)$$

Let us now briefly tackle two particular cases:

i) For $d = 1$, the action is relative to the Coulomb potential,

$$A_E^{\text{Coul}} = \int_0^S dS' \left[p_u \dot{u} + p_v \dot{v} - \frac{p_u^2 + p_v^2}{2} - (\alpha - E)(u^2 + v^2) + 2\beta \right], \quad (34)$$

obtained *via* the well-known Levi-Civita transformation

$$\begin{aligned}x &= \frac{u^2 - v^2}{2}, \\y &= uv.\end{aligned}$$

The Green function is then given by

$$G^{\text{Coul}}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^{\infty} dS' e^{2i\beta S'} \{ \langle \mathbf{V}_f | \mathbf{V}_i \rangle + \langle -\mathbf{V}_f | \mathbf{V}_i \rangle \}, \quad (35a)$$

where

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{V}_f | \mathbf{V}_i \rangle &= \frac{\sqrt{2(\alpha - E)}}{2\pi i \sin(S \sqrt{2(\alpha - E)})} \times \\&\times \exp \left\{ \frac{i \sqrt{2(\alpha - E)}}{\sin(S \sqrt{2(\alpha - E)})} [(V_f^2 + V_i^2) \cos(S \sqrt{2(\alpha - E)}) - 2 \mathbf{V}_f \cdot \mathbf{V}_i] \right\}, \quad (35b)\end{aligned}$$

is the well known [4] amplitude relative to the harmonic oscillator.

ii) For $d = 2$, the action is relative to the harmonic oscillator potential.

$$A_k^{\text{HO}} = \int_0^{S'} dS' \left[p_u \dot{u} + p_r \dot{r} - \frac{p_u^2 + p_r^2}{2} - \alpha(u^2 + r^2) + (E + \beta) \right], \quad (36a)$$

obtained *via* relations

$$\begin{aligned}x &= u, \\y &= r.\end{aligned}$$

The corresponding Green function takes the form

$$G^{\text{HO}}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^{\infty} dS' e^{i\beta S' - E S'} \langle \mathbf{r}_f | \mathbf{r}_i \rangle, \quad (36b)$$

where $\langle \mathbf{r}_f | \mathbf{r}_i \rangle$ is the usual propagator relative to the bi-dimensional harmonic oscillator, (Eq. (35b)).

In these two cases ($d = 1$ and 2), the Green functions can be easily calculated. In the general case, for any d , the Green functions can be analytically calculated for $E = 0$ (Sect. 2).

When going from the (x, y) coordinate system over to the (u, r) system, we can see that

— transformation (25) is not univocal.

— the area of variation of u and r is not the whole plane : it depends upon parameter d and angle θ .

It is thus not easy to find $G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0)$ for any d , according to equations (31, 33a, 33b).

To bypass this difficulty, let us go back to equation (21) and sum up the series to obtain $G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0)$ as a function of the new (u, r) coordinates.

3.2 SUMMATION OF THE GREEN FUNCTION for $E = 0$. — Let us first notice that, here, E is understood as $E + i0$. According to the expression of the action (12c), for $E = 0$, the imaginary term $-i0 e^{2\theta} \approx -i0$ can be combined with $-\ell^2/2$ to give $-\ell^2/2 - i0 \approx -(\ell + i0)^2/2 \approx -\ell^2/2 - i0 |\ell|$.

Let us now take the integral representation of the modified Bessel function [8],

$$I_{\mu}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{z \cos \theta} \cos(\mu \theta) d\theta - \frac{\sin(\mu \pi)}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-z \cosh t - \mu t} dt,$$

with $|\arg(z)| \leq \frac{\pi}{2}$ and $\text{Re}(\mu) > 0$.

We can easily prove that it can be written

$$I_{\mu}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_C dt e^{z \cosh t + i t \mu}, \quad (37)$$

where C represents the following integration contour (Fig. 1).

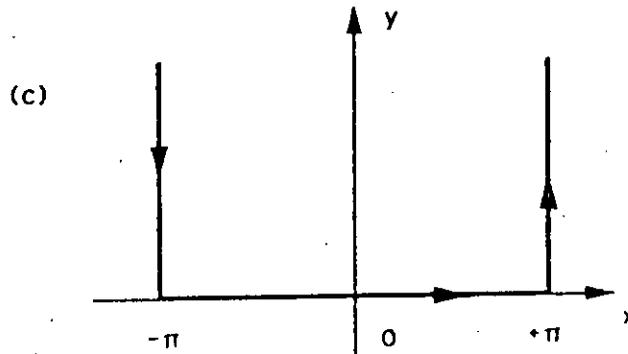


Fig. 1. — Integration contour for Bessel functions.

Let us consider the sum

$$\sum_{\ell} e^{i\ell \Delta \theta} I_2 |\ell|_d(z) = \sum_{\ell} \frac{1}{2\pi} \int_C dt e^{z \cosh t + 2i\ell |d| + i\ell \Delta \theta}, \quad (38)$$

where

$$z = \frac{2 \sqrt{2\alpha} r_1^{d^2} r_2^{d^2}}{id \sin(2S \sqrt{2\alpha/d})}, \quad \Delta \theta = \theta_1 - \theta_2.$$

One has

$$\sum_{\ell} e^{i\ell \Delta \theta + 2i\ell |d|} = \sum_{\ell} e^{i\ell(\Delta \theta + 2|d|) - \ell 0} + \sum_{\ell} e^{i\ell(\Delta \theta + 2|d|) - \ell 0 + 1}, \quad (39)$$

where the terms $\pm \ell 0$, introduced beforehand, have been added in order to regularize the summations, and therefore

$$\sum_{\ell} \exp[i\ell(\Delta \theta + 2|d|) - \ell 0] = \frac{i}{2} \left\{ \cot \left(\frac{\Delta \theta}{2} - \frac{|d|}{d} + i0 \right) + \cot \left(\frac{\Delta \theta}{2} + \frac{|d|}{d} - i0 \right) \right\}. \quad (40)$$

Thus

$$\sum_{\ell} e^{i\ell \Delta \theta} I_2 |\ell|_d(z) = \frac{i}{4\pi} \int_C dt e^{z \cosh t} \left\{ \cot \left(\frac{\Delta \theta}{2} - \frac{|d|}{d} + i0 \right) + \cot \left(\frac{\Delta \theta}{2} + \frac{|d|}{d} - i0 \right) \right\}. \quad (41)$$

Let us define

$$J_{\pm} = \frac{i}{4\pi} \int_C dt e^{z \cos t} \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{t}{d} \pm i0 \right). \quad (42)$$

If we change $t \rightarrow t + i0$ within J_{\pm} , we shall obtain

$$J_{\pm} = \frac{i}{4\pi} \int_{C_1} dt e^{z \cos t} \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} \right). \quad (43a)$$

where C_1 is the following contour (Fig. 2).

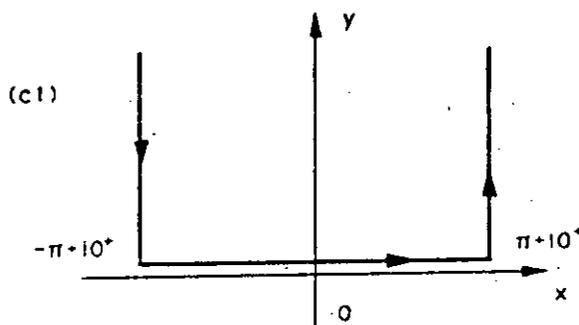


Fig. 2. — Integration contour for Bessel function J_{\pm} .

If now we change $t \rightarrow -t + i0$ within J_{\pm} , we shall obtain

$$J_{\pm} = \frac{i}{4\pi} \int_{C_2} dt e^{z \cos t} \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} \right). \quad (43b)$$

where C_2 is the following contour (Fig. 3).

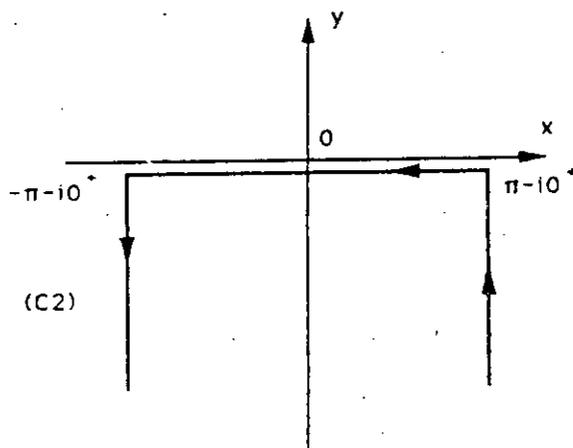


Fig. 3. — Integration contour for Bessel function J_{\pm} .

Eventually, we have

$$\sum_t e^{it\Delta\theta} I_2 |f|_d(z) = \frac{i}{4\pi} \int_{C_1 \cup C_2} dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) e^{z \cos t} = I_{C_1 \cup C_2} \quad (44)$$

where $C_1 \cup C_2$ is following contour (Fig. 4).

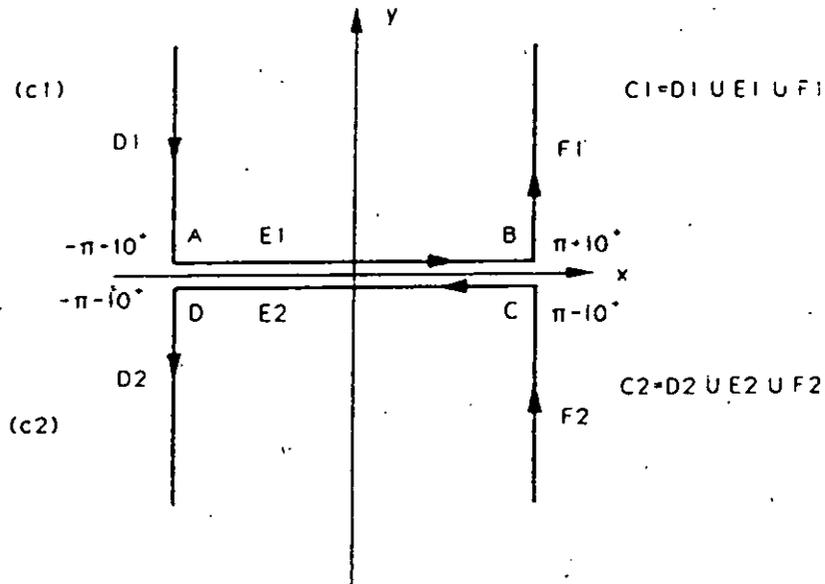


Fig. 4. — Integration contour for Bessel function $I_{C_1 \cup C_2}$.

Given

$$F(t) = e^{z \cos t} \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) \quad (45)$$

we can write

$$\begin{aligned} \int_{C_1 \cup C_2} F(t) dt &= \int_{D_1 \cdot E_1 \cdot F_1 \cdot D_2 \cdot E_2 \cdot F_2} F(t) dt = \\ &= \int_{ABCD} F(t) dt + \int_{\pi-i\infty}^{\pi+i\infty} F(t) dt + \int_{\pi-i\infty}^{\pi+i\infty} F(t) dt \quad (46) \end{aligned}$$

where

$$\frac{i}{4\pi} \int_{ABCD} F(t) dt = \frac{i}{4\pi} \int dt \cot\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) e^{z \cos t} = -\frac{1}{2} \sum_n \text{Residues}.$$

The poles t_n within the closed contour are given by the equation

$$\sin\left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d}\right) = 0,$$

their positions on the real axis being $t_n = (\Delta\theta - 2n\pi)d/2$, n integer.

The poles fulfill the condition

$$-\pi < t_n < \pi \leftrightarrow -\pi < (\Delta\theta - 2n\pi) \frac{d}{2} < \pi.$$

Thus

$$\lim_{t \rightarrow t_n} (t - t_n) \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} \right) e^{z \cos t} = -d e^{z \cos t_n}.$$

From this formulation it becomes clear that

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\ell \Delta\theta} I_{2|\ell|/d}(z) = \frac{d}{2} \sum_n e^{z \cos t_n} + \frac{i}{4\pi} \left\{ \int_{\pi - i\infty}^{\pi + i\infty} dt \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} \right) e^{z \cos t} + \int_{\pi + i\infty}^{\pi - i\infty} dt \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} \right) e^{z \cos t} \right\}. \quad (47)$$

Set $t = \mp \pi + ip$, then

$$\int_{\pi \pm i\infty}^{\pi \mp i\infty} dt \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{t}{d} \right) e^{z \cos t} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dp \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} \pm \frac{\pi}{d} + \frac{ip}{d} \right) e^{-z \cosh p}.$$

This gives

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\ell \Delta\theta} I_{2|\ell|/d}(z) = \frac{d}{2} \sum_n e^{z \cos t_n} + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-z \cosh p} \left[\cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} - \frac{\pi}{d} - \frac{ip}{d} \right) - \cot \left(\frac{\Delta\theta}{2} + \frac{\pi}{d} - \frac{ip}{d} \right) \right]. \quad (48)$$

It can readily be seen that the Green function (21) can be brought into the form

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dS \exp \left[iS \left(\frac{2}{d} \right)^2 \beta \right] \frac{2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{d} (r_f^d + r_i^d) \cot(2S\sqrt{2\alpha}/d) \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \sum_n \left[\exp \left[\frac{2\sqrt{2\alpha} \cos t_n}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} (r_f r_i)^{d/2} \right] \right\} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{d\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \left\{ \exp \left[\frac{-2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \cosh p (r_f r_i)^{d/2} \right] \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\sin(2\pi/d)}{\cos(2\pi/d) - \cos(\Delta\theta - 2ip/d)} \right\}. \quad (49) \end{aligned}$$

This set of equations (48, 49) becomes more transparent if we introduce the new variables ϕ_i, ϕ_f defined by

$$t_n = (\Delta\theta - 2n\pi) \frac{d}{2} = \Delta\phi = \phi_f - \phi_i, \quad \phi_i = \frac{d}{2} \theta_i \quad \text{and} \quad \phi_f = (\theta_f - 2n\pi) \frac{d}{2}.$$

(ϕ_i^n depends upon n) and if we note that we can always find an axis system such that

$$\mathbf{v} = \sqrt{\frac{2}{d}} r_i^{d/2} \begin{bmatrix} \cos \frac{d\theta}{2} \\ \sin \frac{d\theta}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_i^n = \sqrt{\frac{2}{d}} r_i^{d/2} \begin{bmatrix} \cos \phi_i \\ \sin \phi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_i^n \\ v_i^n \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{v}_i = \sqrt{\frac{2}{d}} r_i^{d/2} \begin{bmatrix} \cos \phi_i \\ \sin \phi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix}. \quad (50)$$

Eventually, the Green function can be written as a function of these new (u, v) coordinates :

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dS e^{i4\beta S/d^2} \sum_n \frac{2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} \times$$

$$\times \left\{ \exp \left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{2 \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)} ((u_i^n)^2 + (v_i^n)^2 + u_i^2 + v_i^2) \cos(2S\sqrt{2\alpha}/d) - \mathbf{v}_i^n \cdot \mathbf{v}_i \right] + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{d\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-i \cosh p} \frac{\sin(2\pi/d)}{\cos(2\pi/d) - \cos(\Delta\theta - 2ip/d)} \right\}, \quad (51)$$

with

$$z = \frac{2\sqrt{2\alpha} (r_f r_i)^{d/2}}{d \sin(2S\sqrt{2\alpha}/d)}$$

This equation (51) is our main result.

The $G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0)$ Green function consists of two parts : a finite sum of Green functions relative to the bidimensional oscillators, and a second part as given by the continuous integral : let us notice that this second part disappears, of course, for $d = 1$ and $d = 2$.

Let us check briefly our result (51) on two particular cases :

Case 1 : $d = 1$: Coulomb potential.

In this case, the number of t_n poles is two. Let us repeat here that $t_n = \frac{\Delta\theta}{2} - n\pi$, and as $0 \leq \Delta\theta \leq 2\pi$, the condition is satisfied for $n = 0$ and 1. Thus,

$$\phi_i = \frac{\theta_i}{2}, \quad \phi_i^0 = \frac{\theta_f}{2}, \quad \phi_i^1 = (\theta_f - 2\pi) \frac{1}{2} = \frac{\theta_f}{2} - \pi;$$

and

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) = \sum_{n=0,1} \int_0^\infty dS e^{i4\beta S} \frac{\sqrt{2\alpha}}{i\pi \sin(2S\sqrt{2\alpha})} \times$$

$$\times \exp \left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{2 \sin(2S\sqrt{2\alpha})} ((u_i^n)^2 + (v_i^n)^2 + u_i^2 + v_i^2) \cos(2S\sqrt{2\alpha}) - \mathbf{v}_i^n \cdot \mathbf{v}_i \right], \quad (52)$$

or

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) = \int_0^\infty dS e^{4i\beta S} [\langle \mathbf{v}_i^0 | \mathbf{v}_i \rangle + \langle \mathbf{v}_i^1 | \mathbf{v}_i \rangle], \quad (53)$$

with

$$\mathbf{v}_i^1 = -\mathbf{v}_i^0.$$

Knowing $G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0)$, it is possible to deduce $G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E)$ for any E .

We only have to change α into $\alpha - E$. The obtained Green function will correspond to the Levi-Civita transformation.

Case 2 : $d = 2$: bidimensional harmonic oscillator.

In this case, the number of poles is one. As $-\pi \leq \Delta\theta < \pi$, the $-\pi < t_n < \pi$ condition will only be satisfied for $n = 0$.

$$\text{Thus} \quad \phi_i = \frac{\theta_i}{2}, \quad \phi_f = \frac{\theta_f}{2},$$

and

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) = \int_0^\infty dS e^{i\beta S} \frac{\sqrt{2\alpha}}{2i\pi \sin(S\sqrt{2\alpha})} \times \\ \times \exp \left[\frac{i\sqrt{2\alpha}}{2 \sin(S\sqrt{2\alpha})} ((u_f^0)^2 + (v_f^0)^2 + u_i^2 + v_i^2) \cos(S\sqrt{2\alpha}) - \mathbf{v}_f^0 \cdot \mathbf{v}_i \right]. \quad (54)$$

The Green function for any E will be deduced by changing β into $\beta + E$,

$$G(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; E) = \int_0^\infty dS e^{iS(\beta + E)} \langle \mathbf{r}_f | \mathbf{r}_i \rangle, \quad (55)$$

where $\langle \mathbf{r}_f | \mathbf{r}_i \rangle$ is the usual propagator of the 2D harmonic oscillator (See Kleinert [4]).

Let us now go over to the study of limiting cases.

4. Limiting cases.

Let us set $E = 0$, with $E = E + i0$, and taking (12c) into account let us write (17b) in the following form :

$$\langle q_f | q_i \rangle_{E=0, \ell} = \\ = \frac{2}{d} \int_0^\infty dS \int \mathcal{D}q \mathcal{D}p \exp \left\{ i \left[p\dot{q} - \frac{p^2}{2} - \alpha e^{dq} + \beta e^{dq} + (0 + i0) e^{2q} - \frac{\ell^2}{2} \right] \right\}. \quad (56)$$

Under the $w = r^{d/2} = e^{dq/2}$ transformation the $\langle q_f | q_i \rangle$ amplitude can be obtained as follows :

$$\langle r_f | r_i \rangle_{E=0, \ell} = \frac{2}{d} \int_0^\infty dS e^{iS \left(\frac{2}{d} \right)^2 \beta} \frac{2\sqrt{2\alpha}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha/d})} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i\sqrt{2\alpha}}{d} (r_f^d + r_i^d) \cot(2S\sqrt{2\alpha/d}) \right\} I_2 |r_f|_d \left(\frac{2\sqrt{2\alpha} (r_f r_i)^{d/2}}{id \sin(2S\sqrt{2\alpha/d})} \right). \quad (57)$$

To evaluate this integral, we use the standard formula [9]

$$\int_0^\infty dx \left[\cot \left(\frac{x}{2} \right) \right]^{2\nu} e^{-\beta \cosh x} J_\mu(\alpha \sinh x) = \\ = \frac{\Gamma((1 + \mu)/2 - \nu)}{\alpha \Gamma(\mu + 1)} W_{\nu, \mu/2}(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \beta}) M_{\nu, \mu/2}(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - \beta}),$$

where $W_{\nu, \mu/2}(z)$ and $M_{\nu, \mu/2}(z)$ are the Whittaker functions. The formula is valid for $\text{Re } \beta > |\text{Re } \alpha|$, $\text{Re } (\mu/2 - \nu) > -1/2$.

The following variable changes

$$\begin{aligned} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \pm \beta &= t \gamma_{f,i}, \quad \sinh x = (\sinh y)^{-1}, \quad \cosh x = \coth y, \\ \coth (x/2) &= e^y, \quad \coth x = \cosh y, \end{aligned}$$

allow us to write

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{dy}{\sinh y} e^{2\lambda y} \exp \left\{ -\frac{t}{2} (\gamma_f + \gamma_i) \coth y \right\} I_\mu \left(\frac{t \sqrt{\gamma_f \gamma_i}}{\sinh y} \right) &= \\ &= \frac{\Gamma((1 + \mu)/2 - \lambda)}{t(\gamma_f \gamma_i)^{1/2} \Gamma(1 + \mu)} W_{\lambda, \mu/2}(t \gamma_f) M_{\lambda, \mu/2}(t \gamma_i), \quad (58) \end{aligned}$$

where $W_{\lambda, \mu/2}(t \gamma_f)$ and $M_{\lambda, \mu/2}(t \gamma_i)$ are the Whittaker functions with $\gamma_f > \gamma_i > 0$,

$$\text{Re } t > 0, \quad |\text{Arg } t| < \pi \quad \text{and} \quad \text{Re} [(1 + \mu)/2 - \lambda] > 0.$$

$$\text{Setting } y = \frac{2iS\sqrt{2\alpha}}{d}, \quad \lambda = \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \quad \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d = t \gamma_f,$$

$$\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} (r_f r_i)^{d/2} = t \sqrt{\gamma_f \gamma_i}, \quad \mu = 2|\ell|/d,$$

it follows that

$$\begin{aligned} \langle r_f | r_i \rangle_{E=0, \ell} &= \\ &= \frac{-2i}{d\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{(r_f r_i)^{d/2} \Gamma\left(\frac{2|\ell|}{d} + 1\right)} W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r_f^d \right) M_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}, \frac{|\ell|}{d}} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r_i^d \right), \quad (59) \end{aligned}$$

5. Continuous states.

As we noticed before, the $(i0 e^{2q} - \ell^2/2)$ term can be written $(-(\ell + i0)^2/2)$, which means that $i0$ is combined with ℓ .

Now $\sqrt{(\ell \pm i0)^2} = \pm |\ell|$. Let us thus determine the wave function by writing

$$\begin{aligned} \psi(r_f) \psi^*(r_i) &= \frac{1}{2\pi} [G(r_f, r_i; E + i0)_{E=0} - G(r_f, r_i; E - i0)_{E=0}] = \\ &= \sum_{\ell} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{(2\pi)^2} \left\{ \langle r_f | r_i \rangle_{0, i0} - \langle r_f | r_i \rangle_{0, -i0} \right\}, \end{aligned}$$

and let us use the following relations [10]

$$W_{\lambda, \mu}(z) = W_{\lambda, -\mu}(z), \quad W_{\lambda, \mu}(z) = \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(1/2 - \mu - \lambda)} M_{\lambda, \mu}(z) + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(1/2 + \mu - \lambda)} M_{\lambda, -\mu}(z).$$

Then we have

$$\psi(\mathbf{r}_f) \psi^*(\mathbf{r}_i) \Big|_{E=0, \ell} = \frac{1}{(2\pi)^2 \ell \sqrt{2\alpha}} \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{(r_f r_i)^{d/2}} \times$$

$$\times \left| \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{\Gamma(2|\ell|/d) \Gamma(1-2|\ell|/d)} \right|$$

$$W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}} \cdot \frac{|\ell|}{d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r_i^d \right) W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}} \cdot \frac{|\ell|}{d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r_f^d \right) \quad (60)$$

We thus obtain the wave function for $E = 0$

$$\psi(\mathbf{r})_{E=0, \ell} = \frac{e^{i\ell\theta}}{2\pi\sqrt{2\alpha}} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right)}{|\ell| \Gamma(2|\ell|/d) \Gamma(-2|\ell|/d)} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \frac{1}{r^{d/2}} W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}} \cdot \frac{|\ell|}{d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d \right) \quad (61)$$

Or $W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}} \cdot \frac{|\ell|}{d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d \right)$ is a linear combination [10] of

$$W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}} \cdot \frac{|\ell|}{d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d \right) \quad \text{and} \quad W_{\frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}} \cdot \frac{|\ell|}{d} \left(\frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d \right).$$

As we have [11]

$$M_{\lambda, \mu}(z) = z^{\mu-1/2} e^{-z} {}_1F_1(\mu, -\lambda + 1/2, 2\mu + 1; z),$$

$$M_{\lambda, -\mu}(z) = z^{-\mu-1/2} e^{-z} {}_1F_1(-\mu - \lambda + 1/2, -2\mu + 1; z),$$

there are two states for $E = 0$ whatever d :

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} e^{\sqrt{2\alpha} r^{d/2}} {}_1F_1\left(\frac{-\beta}{d\sqrt{2\alpha}} + \frac{|\ell|}{d} + \frac{1}{2}, \frac{2|\ell|}{d} + 1; \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d\right), \quad (62)$$

$$\psi^{(-)}(\mathbf{r}) = e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} e^{-\sqrt{2\alpha} r^{d/2}} {}_1F_1\left(\frac{-\beta}{d\sqrt{2\alpha}} - \frac{|\ell|}{d} + \frac{1}{2}, -\frac{2|\ell|}{d} + 1; \frac{2\sqrt{2\alpha}}{d} r^d\right), \quad (63)$$

where ${}_1F_1(\alpha, \beta; z)$ is the standard hypergeometric function.

These states $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ and $\psi^{(-)}(\mathbf{r})$ are linearly independent unless $2|\ell|/d \in \mathbb{N}$.

Taking into account the following formulae [12] in standard notation,

$${}_1F_1(\alpha, \gamma; z) = e^z {}_1F_1(\gamma - \alpha, \gamma; -z),$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\Gamma(\gamma)} {}_1F_1(\alpha, \gamma; z) = z^{n+1} \binom{\alpha+n}{n+1} {}_1F_1(\alpha+n+1, n+2; -z),$$

(which implies that d takes defined values) and [13]

$$\begin{aligned} W_{n, \mu, 1/2, \mu}(z) &= \\ &= (-)^n z^{\mu+1/2} e^{-z/2} (2\mu+1)(2\mu+2)\dots(2\mu+n) {}_1F_1(-n, 2\mu+1; z) = \\ &= (-)^n z^{\mu+1/2} e^{-z/2} L_n^{2\mu}(z), \end{aligned} \quad (64)$$

where $(n+1)$ is a natural number and $L_n^{2\mu}(z)$ a Laguerre polynomial, it appears that in equation (60)

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{d} - \frac{\beta}{d\sqrt{2\alpha}}\right) = \Gamma(-n) = \pm \infty,$$

so that the constant in equation (60) diverges,

$$\psi(\mathbf{r}_f) \psi(\mathbf{r}_i) \Big|_{E=0} \rightarrow \pm \infty.$$

$\psi(\mathbf{r})$ being not normalisable, it will describe a discrete bound state.

The single $\psi(\mathbf{r})$ wave function behaves like $L_n^{2|\ell|d}\left(\frac{2\sqrt{2\alpha}r}{d}\right)$, and in the cases where $d=1$ and 2 , it is calculable.

Particular cases

Case 1: for $d=1$: Coulomb potential

$$\frac{2|\ell|}{d} = 2|\ell| \quad \text{integer.}$$

In this case $\psi^{(+)}$ and $\psi^{(-)}$ are not linearly independent any more and equation (21) takes the following form

$$G_{\text{Coul}}(\mathbf{r}_f, \mathbf{r}_i; 0) = \sum_i \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{\pi} \langle r_f | r_i \rangle, \quad (65a)$$

where

$$\begin{aligned} \langle r_f | r_i \rangle &= \int_0^{\pi} dS e^{4i\mu S} \frac{2\sqrt{2\alpha}}{i \sin(2S\sqrt{2\alpha})} \times \\ &\times \exp\left\{i\sqrt{2\alpha}(r_f + r_i) \cot(2S\sqrt{2\alpha}) I_2^{|\ell|}\left(\frac{8\alpha(r_f r_i)^{1/2}}{i \sin(2S\sqrt{2\alpha})}\right)\right\}. \end{aligned} \quad (65b)$$

Let us make use of the standard formula [9] in equation (58) and let us set

$$y = 2iS\sqrt{2\alpha}, \quad \lambda = \frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, \quad 2\sqrt{2\alpha}r_f = i\gamma, \quad 2\sqrt{2\alpha}(r_f r_i)^{1/2} = i\sqrt{\gamma_f \gamma_i}, \quad \mu = 2|\ell|,$$

we will obtain:

$$\langle r_f | r_i \rangle = \frac{-2i}{\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(-\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}} + |\ell| + \frac{1}{2}\right)}{(r_f + r_i)^{1/2} \Gamma(2|\ell| + 1)} W_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|}(2\sqrt{2\alpha}r_f) W_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|}(2\sqrt{2\alpha}r_i). \quad (66)$$

The poles of the gamma function are given by

$$\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}} = \left(\frac{1}{2} + |\ell| + n \right) \quad \text{or} \quad \alpha = \frac{\beta^2}{2(n + |\ell| + 1/2)^2},$$

where α is the energy.

To extract the discrete states, we use the following formula given by Kleinert [5]

$$\lim_{E \rightarrow E_n} (E - E_n) \Gamma(f(E)) = \frac{1}{f'(E_n)} \frac{(-)^n}{n!},$$

which is valid for $f(E_n) = -n$.

We thus obtain

$$\begin{aligned} \psi(r_f) \psi(r_i) = & \\ = & \frac{(-)^n e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)} 4\alpha}{n! \pi \beta (r_f r_i)^{1/2} \Gamma(2|\ell| + 1)} W_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|} (2\sqrt{2\alpha} r_f) M_{\frac{\beta}{\sqrt{2\alpha}}, |\ell|} (2\sqrt{2\alpha} r_i). \end{aligned} \quad (67)$$

If we use the formula of reference [4] again

$$\begin{aligned} W_{(1-\mu)\sqrt{2}, n, \mu/2}(z_f) M_{(1-\mu)\sqrt{2}, n, \mu/2}(z_i) = & \\ = & \frac{\Gamma(-\mu)}{\Gamma(-n-\mu)} \exp\left[-\frac{z_f + z_i}{2}\right] (z_f + z_i)^{(1-\mu)/2} M(-n, 1+\mu, z_f) M(-n, 1+\mu, z_i), \end{aligned} \quad (68)$$

and insert the identity

$$\frac{(-)^n \Gamma(-\mu)}{\Gamma(-n-\mu)} = \frac{\Gamma(n+1+\mu)}{\Gamma(1+\mu)}, \quad (69)$$

into equation (68), we eventually obtain the wave function

$$\begin{aligned} \psi(r) = & \frac{(2\sqrt{2\alpha})^{|\ell|+1}}{\sqrt{2\pi}} \left| \frac{\Gamma(n+1)}{(2n+2|\ell|+1)\Gamma(n+2|\ell|+1)} \right|^{1/2} \\ & e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} e^{-\sqrt{2\alpha}r} L_n^{2|\ell|}(2\sqrt{2\alpha}r), \end{aligned} \quad (70)$$

where the $L_n^\mu(z)$ functions are the usual Laguerre polynomials [14]

$$L_n^\mu(z) = \frac{(n+\mu)!}{n! \mu!} M(-n, \mu+1, z). \quad (71)$$

Case 2: for $d = 2$: harmonic oscillator potential.

In this case, equation (21) becomes

$$G_{HO}(r_f, r_i; 0) = \sum_n \frac{e^{i\ell(\theta_f - \theta_i)}}{2\pi} \langle r_f | r_i \rangle, \quad (72a)$$

where

$$\begin{aligned} \langle r_f | r_i \rangle = & \int_0^\pi dS e^{iS\beta} \frac{\sqrt{2\alpha}}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \times \\ & \times \exp\left\{i\sqrt{2\alpha}(r_f^2 + r_i^2) \cot(S\sqrt{2\alpha})\right\} L_{|\ell|} \left(\frac{\sqrt{2\alpha} r_f r_i}{i \sin(S\sqrt{2\alpha})} \right). \end{aligned} \quad (72b)$$

If we use the standard formula [9] in equation (58) with the following notation

$$y = iS \sqrt{2\alpha}, \quad \lambda = \frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}}, \quad \sqrt{2\alpha} r = r\gamma, \quad \sqrt{2\alpha} r_f r_i = r(\gamma_f \gamma_i)^{1/2}, \quad \mu = |\ell|,$$

we obtain

$$\langle r_f | r_i \rangle = \frac{-i}{\sqrt{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(-\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}} + \left|\frac{\ell}{2}\right| + \frac{1}{2}\right)}{(r_f r_i)^{\ell} \Gamma(|\ell| + 1)} W_{\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}}, |\ell|}(\sqrt{2\alpha} r_f) M_{\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}}, |\ell|}(\sqrt{2\alpha} r_i). \quad (73)$$

The gamma function has poles given by

$$\frac{\beta}{2\sqrt{2\alpha}} = \left(\frac{1}{2} + \frac{|\ell|}{2} + n\right), \quad \text{or} \quad \beta = \sqrt{2\alpha} (1 + |\ell| + 2n).$$

Proceeding like in case 1, we eventually obtain the wave function corresponding to $E = 0$.

$$\psi_{n,\ell}(\mathbf{r}) = (-\gamma)^n (2\alpha)^{\frac{|\ell|-1}{4}} \left[\frac{n!}{\pi(n+|\ell|)!} \right]^{1/2} e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} e^{-\frac{\sqrt{2\alpha} r^2}{2}} L_n^{|\ell|}(\sqrt{2\alpha} r^2). \quad (74)$$

The spectrum and the associated wave functions, corresponding to any E , can be deduced by changing β into $\beta + E$:

$$E = \sqrt{2\alpha} (2n + |\ell| + 1) - \beta, \quad (75)$$

and

$$\psi_{n,\ell}(\mathbf{r}) = (-\gamma)^n (2\alpha)^{\frac{|\ell|-1}{4}} \left[\frac{n!}{\pi(n+|\ell|)!} \right]^{1/2} e^{i\ell\theta} r^{|\ell|} e^{-\frac{(\sqrt{2\alpha}+2)r^2}{2}} L_n^{|\ell|}(\sqrt{2\alpha} r^2). \quad (76)$$

The degeneracy of the state corresponding to $E = 0$, versus the values of d , has been discussed in references [1, 3, 4].

6. Conclusion.

For $E = 0$, we have determined the Green function in polar as well as in the generalized Levi-Civita coordinates. As it is not possible to determine the Green function as a function of (u, v) , because (u, v) do not generate the whole plane, except for $d = 1$ and 2, we have determined it by summing the series, which constitutes our main result. Our Green function has been written in two parts:

- a discrete and finite sum of Green functions depending upon the d parameter and the θ angle
- and a continuous sum.

A few limiting cases have also been investigated.

References

- [1] Mayrand M. and Vinet L., *J. Math. Phys.* **33** (1992) 203.
- [2] Khare A., *Lett. Math. Phys.* **5** (1981) 539.

- [3] Khare A., *J. Math. Phys.* **24** (1983) 867.
- [4] Kleinert H., *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics* (World Scientific, Singapore 1990).
- [5] Kleinert H. and Mustapic I., *J. Math. Phys.* **33** (1992) 663.
- [6] Chetouani L., Chouchaoui A. and Hammann T. F., *Phys. Lett. A* **161** (1991) 89.
- [7] Andersen A. and Andersen S. B., *Ann. Phys.* **199** (1990) 155.
- [8] Gradshteyn L. S. and Ryzhik I. M., *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1965), p. 958, eq. (8.431.5).
- [9] Ref. [8], p. 729, Eq. (6.669.1).
- [10] Ref. [8], p. 1062, Eq. (9.232.1) and p. 1059, Eq. (9.220.4).
- [11] Ref. [8], p. 1059, Eq. (9.220.2 and 3).
- [12] Ref. [8], p. 1058, Eq. (9.912.1) and p. 1059, Eq. (9.214).
- [13] Ref. [8], p. 1063, Eq. (9.237.2).
- [14] Ref. [8], p. 1037, Eq. (8.970).