

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Université Kasdi Merbah Ouargla

Faculté des Mathématiques et des Sciences de la Matière  
Département de physique



N° d'ordre:  
N° de série:

Thèse présentée en vue d'obtention de diplôme  
Doctorat en Sciences Physiques

Option: Matière et Rayonnement

Par : *BEGUI MOHAMED*

Intitulée

**CALCUL DE LA FONCTION DE GREEN QUANTIQUE  
DANS UNE SPHERE DE DIMENSION N**

Soutenue publiquement le 26/9/2019, devant le jury composé de :

|                     |      |                              |            |
|---------------------|------|------------------------------|------------|
| Fethi Khelfaoui     | Prof | Université d'Ouargla         | Président  |
| Med Tayeb Meftah    | Prof | Université d'Ouargla         | Rapporteur |
| Boubaker Benhaoua   | Prof | Université d'Eloued          | Examineur  |
| El Habib Guedda     | Prof | Université d'Eloued          | Examineur  |
| Aomar Boukraa       | Prof | Université d'Ouargla         | Examineur  |
| Abdelmadjid Kaddour | MRA  | Centre de recherche Ghardaia | Examineur  |

# Dédicaces

Je dédie ce travail de thèse à :

Mes parents

Ma femme et mes enfants

Mes frères et sœurs

Mes proches

# Remerciements

Mes remerciements vont tout premièrement à Dieu tout puissant pour la volonté, la patience qu'il m'a donné pour terminer ce travail.

Je tiens à remercier mon encadreur M. Mohammed Tayeb MEFTAH, professeur à l'université de Ouargla, pour m'avoir confié ce sujet et pour son aide, sa disponibilité et le temps qu'il a bien voulu me consacrer.

Mes remerciements vont ensuite au Jury de ma thèse, M. Fethi KHALFAOUI, professeur à l'université de Ouargla pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury.

Je remercie les Professeurs : El Habib GUEDDA, Boubaker BEN HAOUA de l'université d'Eloued, le professeur : Aomar BOUKRAA de l'université d'Ouargla, et également M. Abdelmadjid KADDOUR Maître de Recherche A, Centre de recherche de Ghardaia. qui ont bien voulu accepter de juger ce travail.

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

Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à ma famille, en particulier à ma mère, à mon père, à ma femme, à mes frère, à mes soeur, à mes enfants, et tous mes proches et amis qui m'ont toujours soutenu et encouragé au cours de la réalisation de cette thèse.

# Abstract

In this work, we have presented a precise treatment by the Green function method of certain problems of non-relativistic quantum mechanics in high-dimensional space.

In the first chapter we placed the work in the context of the equations of physical mathematics, we passed by a number of concepts related to this subject as : the general theory of the ordinary differential equations, the partial differential equations, the conditions to the Afterwards, we explored the concept of Green's function and presented the different methods of obtaining Green's functions for the second order differential equations, then we are interested in the function of Green in classical physics. for this we have published two examples, one for the static case and another for the dynamic case.

In the second chapter we have discussed the subject of Green's function in quantum mechanics where we have found it necessary to go through some basic notions of quantum mechanics. then we gave an explicit description of the propagative concepts and functions of Green for the Schrodinger equation. the relation with the operator of evolution ... We thus got acquainted with certain mathematical objects, of a very current use in physics, (in particular in modern theoretical physics) and which prove very important for the study of a lot of problems.

In the third chapter, we calculated the function of Green relative to the time independent Schrodinger equation in the spherical coordinate of dimension  $N$ . The potential part in the Hamiltonian is a piecewise continuous operator obeying a spherical symmetry. We have successfully used the technique of solving the differential equation (the Bessel equation). We have, with the help of this technique, recovered the function of Green from two problems : the first is related to a potential equal to a positive constant  $V_0$  inside sphere of radius "a" and a null operator in outside this sphere. the second is related to

a potential equal to a negative constant ( $0 > V_0$ ) on the sphere of radius "a" and equal to zero outside this sphere. For each problem, we have explicitly calculated the function of Green in different regions of space and for cases  $E > V_0$ ;  $E < V_0$ . We respected the boundary conditions of the problems. The discrete spectra of the Hamiltonian operator have also been derived in the case of finite and infinite well potentials.

# Résumé

Dans ce travail, nous avons présenté un traitement précis par la méthode de la fonction de Green de certains problèmes de mécanique quantique dans un espace multidimensionnel.

Nous avons d'abord placé le travail dans le contexte des équations de physique mathématique. Nous avons passé par un certain nombre de concepts liés aux équations différentielles ordinaires, équations aux dérivées partielles, conditions aux limites, etc. Ensuite, nous avons développé le concept de la fonction de Green et présenté les différentes méthodes utilisées pour les obtenir, en particulier pour les équations différentielles du second ordre, puis nous nous sommes intéressés à la signification physique des fonctions de Green, et leur importance pour la résolution de divers problèmes physique.

Nous avons abordé le sujet des fonctions de Green en mécanique quantique après avoir passé par quelques notions de base. Ensuite nous avons donné une description explicite du concept propagateur et fonctions de Green pour l'équation de Schrodinger, la relation avec l'opérateur d'évolution, etc. Nous avons ainsi fait connaissance avec certains objets mathématiques, d'une utilisation très courante en physique.

Nous avons calculé la fonction de Green relative à l'équation de Schrodinger indépendante du temps en coordonnées sphériques de dimension  $N$  avec des potentiels symétriques sphériques, nous avons traité trois cas à savoir : le problème d'un puits infini, le problème d'une barrière finie, (deux cas : cas de diffusion et le cas effet tunnel), et le problème d'un puits fini, (les états liés). Pour chaque problème, nous avons calculé explicitement la fonction de Green dans différentes régions de l'espace, et nous avons respecté les conditions aux limites des problèmes.

## ملخص

في هذا العمل، قدمنا معالجة باستعمال دوال قرين لبعض مسائل ميكانيكا الكم غير النسبوي في فضاء متعدد الأبعاد.

وضعنا العمل أولاً في سياق البحث في طرق حل المعادلات الرياضياتية الفيزيائية، فمررنا بعدد من المفاهيم النظرية العامة المتعلقة بالمعادلات التفاضلية، والتفاضلية الجزئية، ثم بحثنا مفهوم دوال قرين وعرضنا الطرق المتبعة للحصول عليها وتحديداً مع المعادلات التفاضلية من الرتبة الثانية، ثم قمنا بتوضيح المعاني الفيزيائية لدوال قرين ووقفنا على أهميتها في حل المسائل الفيزيائية المختلفة، سواء ما تعلق منها بمسائل الحالات المستقرة (غير المتعلقة بالزمن) أو الحالات الديناميكية (المتعلقة بالزمن).

ثم قمنا بمناقشة موضوع دوال قرين في ميكانيكا الكم حيث وبعد المرور ببعض المفاهيم الأساسية لميكانيكا الكم. قدمنا وصفاً واضحاً لمفاهيم دوال قرين التابعة لمعادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن ثم المستقلة عن الزمن. بحثنا في علاقتها بموثر التطور وأهميتها في حساب بعض المقادير ... لقد تعرفنا على بعض الأشياء الرياضية، من الاستخدام الحالي للغاية في الفيزياء، (خاصة في الفيزياء النظرية الحديثة) والتي تثبت أهمية كبيرة للدراسة من الكثير من المشاكل.

في الأخير، قمنا بحساب دالة قرين المتعلقة بمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن في فضاء كروي ذو أبعاد متعددة (باستخدام الاحداثيات الكروية في ن بعد). الحد الكمون في الهاميلتونيان له تماثل كروي. لقد استخدمنا بنجاح تقنية حل معادلة بيسيل و استطعنا باستخدام دوال معادلة ثلاث مسائل شهيرة هي:

مسألة البئر اللانهائي، مسألة حاجز الكمون (مسألة الانتشار ومسألة النفق الكمومي)، وأخيراً مسألة البئر المنته (الحالات المترابطة). لكل مسألة قمنا وبوضوح حساب دالة قرين في مختلف أجزاء الفضاء المحدد مع الأخذ بالاعتبار الشروط على الحدود.

# Table des matières

|  |          |
|--|----------|
| Dédicace   | i        |
| Remerciements  | ii       |
| Abstract   | iii      |
| Résumé   | v        |
| Table des matières   | vi       |
| Notations et abréviations  | ix       |
| Introduction   | 1        |
| <b>1 La fonction de Green en Physique Mathématique</b>           | <b>7</b> |
| 1.1 Introduction . . . . .                                       | 7        |
| 1.2 Notions de base . . . . .                                    | 9        |
| 1.2.1 Les équations différentielles ordinaires (EDO) : . . . . . | 9        |
| 1.2.2 Les équations aux Dérivées Partielles (EDP) . . . . .      | 9        |
| 1.2.3 Equations différentielles et opérateurs . . . . .          | 10       |
| 1.2.4 Opérateur de Sturm-Liouville . . . . .                     | 11       |
| 1.2.5 Problème aux limites . . . . .                             | 12       |
| 1.2.6 Fonction delta de Dirac : . . . . .                        | 12       |
| 1.2.7 Transformée de Fourier . . . . .                           | 13       |
| 1.3 La théorie de fonction de Green : . . . . .                  | 14       |



|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 1.3.1    | Définition des fonctions de Green : . . . . .                                       | 14        |
| 1.3.2    | Propriétés usuelles . . . . .   | 16        |
| 1.3.3    | La fonction de Green sous forme opératoire . . . . .                                | 17        |
| 1.3.4    | La fonction de Green pour les EDO inhomogènes de 2 <sup>eme</sup> ordre : . . . . . | 18        |
| 1.4      | Méthodes d'obtention de la fonction de Green : . . . . .                            | 20        |
| 1.4.1    | Méthode d'expression par morceaux : . . . . .                                       | 20        |
| 1.4.2    | Méthode des fonctions propres : . . . . .   | 22        |
| 1.4.3    | Méthode de transformée de Fourier : . . . . .                                       | 25        |
| 1.5      | La fonction de Green en physique : . . . . .  | 26        |
| 1.5.1    | Signification physique de la fonction de Green : . . . . .                          | 26        |
| 1.5.2    | Exemples d'application : . . . . .  | 29        |
| 1.6      | Conclusion . . . . .  | 35        |
| <b>2</b> | <b>La fonction de Green en mécanique quantique</b>                                  | <b>36</b> |
| 2.1      | Introduction . . . . .  | 36        |
|          | <b>Introduction</b>   | <b>38</b> |
| 2.2      | Fondements de la Mécanique Quantique. . . . .                                       | 38        |
| 2.2.1    | Fonction d'onde : . . . . .   | 38        |
| 2.2.2    | L'équation de Schrodinger : . . . . .   | 38        |
| 2.2.3    | Kets d'un espace de Hilbert . . . . .   | 38        |
| 2.2.4    | Produit scalaire . . . . .  | 39        |
| 2.2.5    | Base $ r\rangle$ . . . . .  | 39        |
| 2.2.6    | Projecteurs orthogonaux . . . . .   | 40        |
| 2.2.7    | Relation de fermeture . . . . .   | 41        |
| 2.2.8    | Opérateurs . . . . .  | 41        |
| 2.2.9    | Opérateur évolution. . . . .  | 42        |
| 2.3      | Propagateur de l'équation de Schrodinger . . . . .                                  | 42        |
| 2.3.1    | Relation avec l'opérateur d'évolution . . . . .                                     | 45        |
| 2.3.2    | Interprétation du propagateur . . . . .   | 47        |
| 2.3.3    | Equation satisfaite par $K(\vec{r}, t ; \vec{r}', t')$ . . . . .                    | 48        |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 2.3.4    | Propagateur libre . . . . .   | 49        |
| 2.3.5    | La série perturbative du propagateur . . . . .  | 52        |
| 2.4      | Fonctions de Green . . . . .  | 54        |
| 2.4.1    | Opérateurs de Green . . . . .   | 55        |
| 2.4.2    | Propriétés analytiques de l'opérateur de Green . . . . .                                    | 56        |
| 2.4.3    | Fonction de Green pour une particule libre . . . . .  | 57        |
| 2.4.4    | La série de perturbation pour la fonction de Green . . . . .                                | 59        |
| <b>3</b> | <b>Calcul de la fonction de Green sur une sphère à N dimensions</b>                         | <b>60</b> |
| 3.1      | Introduction . . . . .  | 60        |
| 3.2      | Généralité sur l'espace de dimension arbitraire . . . . .                                   | 61        |
| 3.2.1    | Les coordonnées hypersphériques . . . . .   | 61        |
| 3.2.2    | Le laplacien en coordonnées sphériques de dimension N . . . . .                             | 62        |
| 3.2.3    | La fonction delta à N dimensions . . . . .  | 63        |
| 3.3      | Problèmes de dimension N dans les coordonnées sphériques . . . . .                          | 64        |
| 3.3.1    | Equation de Schrodinger de dimension N . . . . .  | 64        |
| 3.3.2    | La fonction de Green hyperradiale . . . . .   | 65        |
| 3.3.3    | La fonction de Green hyperangulaire . . . . .   | 67        |
| 3.3.4    | Calcul de la fonction de Green d'une particule libre . . . . .                              | 68        |
| 3.3.5    | Fonction de Green et amplitude de diffusion dans un espace multi-<br>dimensionnel . . . . . | 71        |
| 3.4      | Recherche de la FG pour une particule dans une sphère . . . . .                             | 72        |
| 3.4.1    | Application au cas d'un puits de potentiel infini . . . . .                                 | 72        |
| 3.4.2    | Application aux cas des barrières de potentiel . . . . .                                    | 75        |
| 3.4.3    | Application au cas des puits de potentiel fini . . . . .                                    | 88        |
|          | <b>Conclusion</b>   | <b>91</b> |
|          | <b>Bibliographie</b>  | <b>93</b> |

# Notations et abréviations

|     |   |                                      |
|-----|---|--------------------------------------|
| FG  | : | Fonction de Green                    |
| EDO | : | Equations différentielles Ordinaires |
| EDP | : | Equations aux Dérivées Partielles    |
| C L | : | Conditions aux limites               |
| C I | : | Conditions Initiales                 |
| S L | : | Sturm-Liouville                      |
| T F | : | Transformée de Fourier               |

# Introduction générale

Il est difficile de fixer le début précis d'un sujet vaste et diversifié qui existe maintenant sous le nom de "Fonctions de Green", mais l'origine de la méthode peut certainement être associée au travail original et ingénieux de George Green (1793-1841), mathématicien anglais, né et mort à Sneinton (près de Nottingham).

George Green, à travers sa recherche d'une formulation mathématique de la théorie de l'électricité statique et du magnétisme, est le créateur de la théorie du potentiel. En 1828, George Green publia un travail intitulé "Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theory of Electricity and Magnetism". Malgré son importance, ce travail est passé inaperçu du monde mathématique jusqu'à sa réédition par lord Kelvin, en 1846, dans le Journal "für Mathematik". On y trouve la formule de Green, ainsi que la fonction de Green qui est devenue un des concepts fondamentaux de la théorie des équations aux dérivées partielles ; c'est dans ce mémoire qu'apparaît pour la première fois le terme « potentiel », et Green n'hésite pas à considérer des potentiels dans des espaces à  $n$  dimensions (où il introduit les fonctions appelées de nos jours ultrasphériques) [1–4].

Les fonctions de Green sont nées comme fonctions auxiliaires pour la résolution des problèmes de valeurs aux limites. Elles ont été appliquées avec succès à résoudre divers problèmes de Mathématique physique. Elles sont également très utiles pour transformer les équations différentielles en équations intégrales, qui sont préférées dans certains cas comme les problèmes de diffusion [2].

A la fin du XIXe siècle, les fonctions de Green, qui seront dénommées ainsi par Riemann en 1869, seront alors abondamment utilisées, notamment par Neumann en 1877 pour sa théorie du potentiel Newtonien dans un espace à deux dimensions, puis en 1882 par Kirchhoff pour l'équation de propagation des ondes dans un espace à trois dimensions,

et enfin par Helmholtz en acoustique. Elles sont devenues un outil essentiel en théorie quantique des champs après que Feynman les a popularisées en 1948 sous le nom de propagateur dans sa formulation en intégrale de chemin de l'électrodynamique quantique. La théorie des fonctions de Green forme la fondation pour le travail d'autres scientifiques dans beaucoup d'applications dans la physique et en génie, comme Lipschitz dans l'électrodynamique, Betti en théorie de la chaleur et l'élasticité, et autres [5–7] .

La méthode de la fonction de Green est un formalisme très pratique en physique de la matière condensée, et en particulier dans les propriétés de transport d'électrons (le mouvement électronique dans la matière où apparaissent certains effets de confinement quantique), aussi, en physique du corps solide, les fonctions de Green ont été introduites comme fonctions de réponse, elles peuvent être utilisées pour déterminer la densité d'états de particules, et en physique des matériaux surtout l'étude des structures périodiques et aléatoires, la propagation des ondes dans les cristaux photoniques et phononiques...etc. Dans tout cela, nous trouvons les fonctions de Green jouer un rôle important en tant qu'outil théorique dans ce nouveau domaine de la physique moderne [8].

La mécanique quantique et les fonctions de Green semblaient, à première vue, totalement indépendantes, mais au cours des 50 dernières années, les fonctions de Green se sont révélées être un outil très utile pour résoudre nombreux problèmes dans le domaine de la mécanique quantique. L'interprétation de propagateur des fonctions de Green est également très utile dans la théorie des champs quantiques et, l'intégrale de chemin. La représentation intégrale est le point de départ de la théorie des perturbations modernes. En plus de cela, les fonctions de Green ont joué un grand rôle dans la théorie quantique à plusieurs corps, dans la théorie des perturbations et même dans le développement de la mécanique quantique moderne [9].

Avant d'examiner le développement des fonctions de Green dans la mécanique quantique, nous devons examiner certaines propriétés générales d'une fonction de Green.

En général, le terme "Fonction de Green en physique " se réfère à ce que les mathématiciens appellent la solution élémentaire ou fondamentale d'une équation différentielle linéaire à coefficients constants, ou d'une équation aux dérivées partielles linéaire à coefficients constants [10].

Dans ce sens, on peut mentionner que les lois physiques sont écrites en termes d'équations différentielles ou équations aux dérivées partielles (la loi de Newton est une équation différentielle pour la position d'un objet en fonction du temps, les équations de Maxwell sont des équations pour les champs électriques et magnétiques comme fonctions de l'espace et temps, etc.). Généralement la quantité qui nous intéresse est reliée à une source (une cause située à l'origine) par une équation aux dérivées partielles (EDP) linéaire. La source est la force si nous traitons les lois de Newton et la charge et les densités de courant si nous traitons l'électrodynamique [11]. Soulignons que la quantité physique recherchée n'est pas déterminée de manière univoque par la donnée de l'EDP qu'elle satisfait. En fait, l'unicité est garantie en imposant des conditions auxiliaires. Celles-ci peuvent inclure des conditions initiales, des conditions aux limites, des conditions de décroissance asymptotiques, des conditions de régularité, etc [12].

Dans la plupart des situations physiques, il apparaît naturellement des conditions aux limites (C.L.) sur la forme de la grandeur cherchée aux bords du système. Par exemple, en électrostatique, ces conditions aux limites reviennent à prendre en compte implicitement les contributions de sources supplémentaires qui sont induites dans le milieu extérieur au système considéré. De manière générale, ces conditions aux limites ont une signification physique bien précise, et elles jouent ainsi un rôle crucial dans la forme de la grandeur étudiée [13].

Mathématiquement, la détermination du type de C.L. qu'il faut imposer pour assurer à la fois l'existence d'une solution et son unicité est en général assez délicat : en effet, l'existence requiert des C.L. pas trop restrictives, tandis que l'unicité nécessite au contraire des C.L. assez restrictives. La question fondamentale des conditions aux limites est donc la première tâche à aborder dans chaque situation [13]. La linéarité de l'EDP permet de déterminer le champ d'intérêt en appliquant le principe de superposition. Il est alors très naturel d'introduire le champ particulier créé par une source ponctuelle : c'est ce champ qui est appelé fonction de Green du problème considéré. Le champ total induit par une distribution arbitraire de sources se réduit alors à la superposition des champs particuliers créés par des sources ponctuelles. Cette décomposition met en lumière le rôle majeur des fonctions de Green dans la résolution générale des EDP linéaires [13].

Durant les dernières décennies une quantité considérable de travaux théoriques avait été consacrée à l'étude et la compréhension des problèmes dans l'espace multidimensionnel. L'idée de l'espace multidimensionnel a une histoire riche, remontant au moins aux années 1910 quand la théorie de Nordstrom-Kaluza-Klein - généralement appelée théorie de Kaluza-Klein - a été proposée. Cette théorie est un modèle physique qui cherche à unifier deux forces fondamentales de la gravitation et de l'électromagnétisme. Plus précisément, l'idée de dimensions spatiales additionnelles vient de la théorie des cordes, la seule théorie quantique de la gravitation jusqu'à présent [14].

Les problèmes de mécanique quantique dans l'espace multidimensionnel deviennent de plus en plus importants pour des raisons telles que : l'approche multidimensionnelle fournit une compréhension plus profonde de problèmes unidimensionnels en physique. Aussi, a plusieurs dimensions, ces problèmes possèdent des propriétés de symétrie. Cela signifie qu'une généralisation peut être un choix facilitant la solution du problème. D'autre part, l'étude de problème dans N- dimensions donne un traitement général du problème de telle manière que l'on peut obtenir les résultats requis dans des dimensions moindres [15]. Récemment, les chercheurs ont montré un grand intérêt pour l'étude de problème dans des dimensions plus élevées (c'est-à-dire dans les dimensions N). Ces études fournissent des applications utiles dans différents domaines de la physique, notamment en astrophysique et en physique des particules...

Les problèmes de mécanique quantique rencontrés dès les premiers cours de mécanique quantique concernent les barrières de potentiel et les sauts de potentiel dans le cas à une dimension, plusieurs articles ont été publiés dans un large éventail de revues traitant ce genre de problèmes en utilisant la méthode de la fonction de Green. Pour les cas de dimensions supérieures, peu de choses ont été faites surtout l'utilisation de la technique de la fonction de Green et les méthodes des équations intégrales. Cela a été une motivation majeure pour la recherche sur ce sujet.

L'application de la méthode des fonctions de Green pour résoudre des problèmes en mécanique quantique exige la connaissance de la fonction de Green pour l'équation de Helmholtz [ 5 ]. Les fonctions de Green de l'équation de Helmholtz dans des régions régulières sont bien connues. Dans les références [ 16 ] et [ 17 ], la fonction de Green pour

l'équation de Schrodinger avec des potentiels rectangulaires de dimension un et le potentiel saut de heaviside et les barrières de potentiel dans un espace de dimension un ont été résolus exactement. Dans [ 18 ], la fonction de Green a été étudiée pour le problème de Kirchhoff-Poisson de la plaque circulaire mince. La fonction de Green a été également étudiée dans deux dimensions pour un potentiel continu par morceaux [ 19 ] et dans trois dimensions pour un potentiel continu par morceaux possédant une symétrie sphérique [ 20 ]. Dans [ 21-22 ] la fonction de Green a été analysée dans le domaine elliptique. Le problème de diffusion en mécanique quantique en deux dimensions a été également traité asymptotiquement dans [ 23 ]. Fonction de Green et amplitudes de diffusion dans l'espace multi-dimensionnel ont été abordées en [ 24 ]. La fonction de Green pour l'oscillateur harmonique isotrope de dimension  $N$  a été étudiée en [51], Dans [26-27] la fonction de Green a été traitée en employant les méthodes d'approximation. L'équation de Schrodinger pour des modèles quantiques possédant la symétrie sphérique tels que le problème d'atome d'hydrogène a été résolue dans des dimensions plus élevées [ 28 ]. Les formes exactes des fonctions de Green et les fonctions de Green généralisées pour l'opérateur de Helmholtz sur la sphère unité de dimension  $N$ , qui correspond à la partie angulaire de l'opérateur de Helmholtz a été obtenue en [ 29-30 ]. Quelques travaux récents sur l'équation de Schrodinger à  $N$  dimensions se trouvent dans la liste de référence [ 31-36 ].

Dans ce travail nous avons étudié par la méthode des fonctions de Green la partie radiale de l'équation de Schrodinger avec un opérateur potentiel dans un espace à  $N$  dimension.

En mécanique quantique, si le potentiel est constant dans un domaine et est égal à zéro à l'extérieur (ou vice versa), la solution de l'équation de Schrodinger et la dérivée de la solution sont continues sur la frontière. Spécifions encore nos problèmes : l'équation de Schrodinger prend deux formes différentes selon que l'on est à l'intérieur ou à l'extérieur du domaine. Ce type de problème correspond à la mécanique quantique dans l'étude d'une particule soumise à un potentiel qui est une constante à l'intérieur du domaine et est égal à zéro à l'extérieur.

Cette thèse se subdivise en trois chapitres structurés de la manière suivante :

Le premier chapitre est consacré essentiellement aux rappels théoriques et généraux.



Nous y présentons la théorie générale des équations différentielles ordinaires d'ordre  $n$ , le concept général de la fonction de Green, les différentes méthodes d'obtenir les fonctions de Green pour les équations différentielles du second ordre, la construction de la fonction de Green pour ce type d'équations, puis on s'intéresse à la fonction de Green pour des équations de la physique classique, en illustrant par des exemples.

Au deuxième chapitre, nous passons par quelques notions de base de la mécanique quantique, ensuite nous donnons une description explicite du concept de propagateur et fonctions de Green pour l'équation de Schrodinger, la relation avec l'opérateur d'évolution, la fonction de Green et l'opérateur de Green. Nous avons présenté le calcul de la fonction de Green pour une particule libre, la méthode de la théorie des perturbations adaptée à la mécanique quantique en présentant une interprétation physique aux termes de la série de perturbation. Nous avons également présenté le rôle du propagateur de Feynmann et sa relation avec la fonction de Green ainsi qu'avec la fonction d'onde, solution de l'équation de Schrodinger. Nous avons achevé ce chapitre par l'élaboration de l'équation intégrale gouvernant la fonction de Green.

Dans le troisième chapitre, nous avons donné au début un rappel sur la notion d'espace à dimension élevée, les coordonnées hypersphériques, ensuite nous avons présenté l'équation de Schrodinger dans un espace de dimension arbitraire  $N$ , puis nous avons entamé le calcul des fonctions de Green pour des cas où le potentiel dans l'équation de Schrodinger est continu par morceaux. Nous avons appliqué la théorie du potentiel symétrique sphérique (axi-symétrique) dans l'espace multidimensionnel défini comme constante positive à l'intérieur de la sphère et zéro en dehors de la sphère pour le cas  $E > V_0$ . Le cas où  $0 < E < V_0$  est aussi présenté, nous avons effectué le calcul en employant la continuité de la solution et de sa première dérivée sur la frontière. Le cas du potentiel puits sphérique sera discuté quand nous étudierons le problème avec le potentiel négatif à l'intérieur de la sphère et zéro en dehors de la sphère. Ici, nous avons également employé la continuité de la solution et de sa première dérivée sur la frontière pour obtenir la fonction de Green associée.

Nous avons clôturé ce travail par une conclusion et des perspectives.

# Chapitre 1

## La fonction de Green en Physique Mathématique

### 1.1 Introduction

Les fonctions de Green sont nommées d'après le mathématicien britannique George Green, qui a développé le concept dans les années 1830. Les méthodes de fonction de Green permettent de mettre en relation une équation différentielle contenant un terme inhomogène (souvent appelé terme source) avec un opérateur intégral. Il peut être utilisé pour résoudre des équations différentielles ordinaires et partielles (qui seront notées en abrégé EDP dans la suite).

Les équations différentielles linéaires du second ordre jouent un rôle fondamental en mécanique et en physique. D'ailleurs, on ne peut pas aller plus loin dans le développement de la mécanique des fluides, de la conduction de la chaleur, du mouvement des vagues, des phénomènes électromagnétiques, et de la mécanique quantique, sans savoir résoudre les équations différentielles linéaires de deuxième ordre. On les rencontre soit directement, soit comme intermédiaire dans la résolution des équations aux dérivées partielles linéaire du second ordre. Rappelons que, à ces équations, on associe souvent des conditions aux limites, pour incorporer les caractéristiques physiques du problème considéré. Il est bien connu que la théorie des équations différentielles est intimement liée à la théorie des opérateurs.

L'objectif de ce chapitre est de donner une introduction rappelant les principaux

concepts et propriétés importantes de la théorie de fonction de Green. Nous aborderons ce sujet que très légèrement ici, et nous nous contentons de rappeler les grands principes de la méthode (sans se soucier de la rigueur mathématique). Et, afin de présenter les idées clés dans le contexte le plus simple possible, nous allons présenter quelques notions de base concernant le sujet. Ce chapitre constitue alors la base des applications que nous allons présenter plus loin dans ce travail.

## 1.2 Notions de base

### 1.2.1 Les équations différentielles ordinaires (EDO) :

Une équation différentielle est une équation ayant pour inconnue une fonction ; elle se présente sous la forme d'une relation entre cette fonction inconnue et ses dérivées successives.

$$F(x, y(x), y'(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0 \quad (1.1)$$

On dit que l'équation différentielle est d'ordre  $n$ , où  $n$  est l'ordre de dérivations le plus élevé qui apparaît dans l'équation.

Une équation différentielle d'ordre  $n$  est **linéaire** si elle est de la forme

$$a_0(x)y + a_1(x)y' + \dots + a_n(x)y^{(n)} = g(x) \quad (1.2)$$

où les  $a_i$  et  $g$  sont des fonctions réelles continues sur un intervalle  $I \subset \mathbb{R}$

Une équation différentielle linéaire est **homogène**, (ou sans second membre), si la fonction  $g$  ci-dessus est la fonction nulle :

$$a_0(x)y + a_1(x)y' + \dots + a_n(x)y^{(n)} = 0 \quad (1.3)$$

### 1.2.2 Les équations aux Dérivées Partielles (EDP)

Une équation aux dérivées partielles est une équation mathématique contenant, en plus de la variable dépendante ( $u$  : ci-dessous) et les variables indépendantes ( $x, y, \dots$  ci-dessous), une ou plusieurs dérivées partielles. Cette équation est de la forme.

$$F(x, y, \dots, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \dots) = 0 \quad (1.4)$$

où  $F$  est une fonction de plusieurs variables. Considérons les variables indépendantes ( $x, y, \dots$ ) appartenant à un domaine  $\Omega$  convenable de  $\mathbb{R}^n$ .

L'ordre d'une EDP est l'ordre de la dérivée partielle d'ordre le plus élevé.

La solution d'une EDP est une fonction de plusieurs variables. Par conséquent, le domaine sur lequel on résout l'EDP joue un rôle essentiel et il est important de le connaître dès le début.

En général, il existe des conditions au bord (c'est à dire des conditions sur la fonction en tout point du bord du domaine), des conditions initiales (lorsque l'une des variables représente le temps par exemple, on possède des informations sur la fonction à  $t = 0$ ), etc.

Les EDP proviennent de la modélisation mathématique, c'est à dire de la transcription en équations, de problèmes intervenant dans tous les domaines des sciences : physique, chimie, biologie, finance... Les EDP les plus utilisées en physique sont de second ordre pour l'espace, et de premier ou de second ordre pour le temps. Ce sont les équations de la chaleur, de Laplace et de Poisson, et l'équation d'onde.

Beaucoup d'équations de la Physique, comme par exemple l'équation des ondes, l'équation de Laplace, l'équation de la chaleur, l'équation de Schrodinger etc..., peuvent être traitées grâce à la méthode de séparation des variables qui ramène ces équations aux dérivées partielles à des équations différentielles linéaires du second ordre de la forme

$$\alpha(x)\frac{d^2u}{dx^2} + \beta(x)\frac{du}{dx} + \gamma(x)u(x) = \lambda u(x), \text{ ou } \lambda \in C, \quad (1.5)$$

équations dont on cherche les solutions  $u$  satisfaisant à des conditions imposées par le problème physique étudié.

### 1.2.3 Equations différentielles et opérateurs

L'équation (1.2) peut s'écrire sous la forme

$$L(u) = f(x; y; \dots) \quad (1.6)$$

où  $L$  est un opérateur différentiel,  $f(x, y, \dots)$  est une fonction donnée et  $u$  est une fonction à déterminer.

Un opérateur  $L$  est **linéaire** si et seulement si  $L(au + bv) = aL(u) + bL(v)$  quelque

soient les nombres réels  $a, b$  et les bonnes "bien définis" fonctions  $u, v$ .

Une EDP est dite linéaire si elle est de la forme  $Lu = f(x, y, \dots)$  où  $L$  est un opérateur linéaire,  $f(x, y, \dots)$  est une fonction des  $n$  variables indépendantes,  $(x, y, \dots)$  appartenant à un domaine  $\Omega$  convenable de  $R^n$  et  $u$  est la fonction recherchée. Si en plus  $f(x, y, \dots) \equiv 0$ , on dit alors que l'équation est linéaire homogène. Sinon elle est non-homogène.

## 1.2.4 Opérateur de Sturm-Liouville

L'opérateur de Sturm Liouville est la forme la plus générale d'opérateur différentiel de second ordre qui peut être écrit sous la forme d'équation

$$Lu = \frac{d}{dx} \left( p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u(x) = 0. \quad (1.7)$$

Beaucoup d'équations les plus importantes en physique mathématique sont des équations de S-L. Par exemple,

$$p(x) = 1, q(x) = 0; \quad \frac{d^2u}{dx^2} = 0, \quad \text{équation de Laplace}$$

$$p(x) = 1, q(x) = k^2; \quad \frac{d^2u}{dx^2} + k^2u = 0, \quad \text{équation de Helmholtz}$$

$$(1 - x^2) \frac{d^2u}{dx^2} - 2x \frac{du}{dx} + l(l + 1)u = 0, \quad \text{équation de Legendre}$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2x \frac{du}{dx} + 2\alpha u = 0, \quad \text{équation de Hermite}$$

$$x \frac{d^2u}{dx^2} - (1 - x) \frac{du}{dx} + \alpha u = 0, \quad \text{équation de Laguerre}$$

$$x^2 \frac{d^2u}{dx^2} + x \frac{du}{dx} + (x^2 - n^2)u = 0, \quad \text{équation de Bessel}$$

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \omega_0^2 u = 0, \quad \text{équation d'oscillateur harmonique simple}$$

Il convient de noter que toute équation différentielle linéaire de second ordre peut être changée en forme d'équation de SL.

### 1.2.5 Problème aux limites

En mathématiques, dans le domaine des équations différentielles, un problème de valeurs aux limites est une équation différentielle (ou plus généralement aux dérivées partielles) associée à un ensemble de contraintes supplémentaires, appelées les conditions aux limites. Une solution à un problème de valeurs aux limites est une solution à l'équation différentielle qui satisfait également à valeurs imposées en des limites du domaine de résolution.

Pour être utile dans les applications, un problème de valeurs aux limites devrait être bien posé. Cela signifie que, pour définir univoquement la solution d'une équation aux dérivées partielles, il est essentiel d'imposer des conditions aux limites sur la quantité recherchée. Il faut garder à l'esprit que des conditions aux limites (CL) voisines peuvent conduire à des solutions extrêmement différentes. De plus, ces conditions aux limites doivent être ajustées de sorte à incorporer les caractéristiques physiques du problème considéré.

Les problèmes de valeurs initiales (CI) sont similaires aux problèmes de valeurs aux limites. Un problème de valeurs aux limites a des conditions spécifiées aux extrêmes ("limites") de la variable indépendante dans l'équation alors qu'un problème de valeur initiale a toutes les conditions spécifiées à la même valeur de la variable indépendante (et cette valeur est à la limite inférieure du domaine, d'où le terme "valeur initiale").

Par exemple : L'équation d'une corde vibrante, de la forme  $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$ , où  $t$  est une variable de temps,  $x$  désigne les abscisses des points de la corde, et  $y$  leur ordonnée dont on cherche la variation en fonction de  $x$  et  $t$ , s'accompagne d'une condition initiale, donnée par  $y(x, 0) = f(x)$  et d'une condition aux limites, la stabilité des deux points extrêmes de la corde, donnée par  $y(0, t) = y(1, t) = 0$

### 1.2.6 Fonction delta de Dirac :

On appelle fonction (ou plus exactement distribution) de Dirac la fonction :

$$\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \neq a \\ +\infty, & \text{si } x = a \end{cases} \quad (1.8)$$

et telle que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = 1 \quad (1.9)$$

Dans certains cas, on utilise une notation comme :

$$\delta_a(x) = \delta(x - a) \quad (1.10)$$

C'est la limite d'une impulsion rectangulaire d'aire = 1 lorsque sa durée tend vers 0 (et par conséquent lorsque sa hauteur tend vers l'infini, ce qui n'en fait pas exactement une fonction).

En étudiant les techniques de FG, nous allons rencontrer quelques propriétés de la fonction delta de Dirac.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta(x - a) = f(a) \quad (1.11)$$

$$\delta(x - a) = \delta(a - x) \rightarrow \delta(x) = \delta(-x) \quad (1.12)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x), \quad a \neq 0 \quad (1.13)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta'(x - a) = -f'(a) \quad (1.14)$$

$$\int_{-\infty}^x dx' \delta(x') = H(x) \leftrightarrow \delta(x) = \frac{dH(x)}{dx} \quad (1.15)$$

où  $H(x)$  est la fonction échelon (Heaviside).

$$\delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-a)} dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip(x-a)} dp \quad (1.16)$$

### 1.2.7 Transformée de Fourier

On présente la transformation de Fourier (abrégée TF) avec les conventions habituelles des physiciens.

Par définition, on a les relations de passage entre les deux représentations :

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \leftrightarrow f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \quad (1.17)$$



En mécanique quantique, du fait de la relation  $p = \hbar k$ , on définit la fonction d'onde donnant la distribution en impulsion grace à la transformée de Fourier et en introduisant  $\hbar$

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \leftrightarrow f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (1.18)$$

la TF de distribution de Dirac

$$\begin{aligned} \tilde{\delta}_{x_0}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) e^{-ipx/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx_0/\hbar} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Et en particulier :

$$\tilde{\delta}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (1.20)$$

un point très utile des transformées de Fourier, notamment pour résoudre les équations différentielles linéaires, est que l'opération de dérivation de la fonction se traduit dans la représentation réciproque par une multiplication par la variable  $k$ . Concrètement, on voit à partir des définitions que :

$$f'(x) = \frac{df}{dx} \leftrightarrow ikf(k) \quad (1.21)$$

et, de façon analogue, dans l'autre sens

$$xf(x) \leftrightarrow if'(k) \quad (1.22)$$

## 1.3 La théorie de fonction de Green :

### 1.3.1 Définition des fonctions de Green :

Considérons un système contenu dans un domaine  $\Omega$  de dimension quelconque, et comprenant des sources distribuées avec une certaine densité  $\rho(r)$ , où ici  $r$  désigne un point du domaine  $\Omega$ . Supposons que ces sources induisent un certain champ  $\phi(r)$ , univoquement

déterminé par le système

$$\begin{aligned} L\phi(r) &= \rho(r), \\ C.L.(\phi). \end{aligned} \tag{1.23}$$

la notation  $C.L.(\phi)$  représente les conditions aux limites spécifiques à la situation étudiée. En général, celles-ci porteront sur la valeur de  $\phi(r)$  et/ou de ses dérivées spatiales sur le bord du domaine  $\Omega$ .

L'EDP satisfaite par  $\phi$  étant linéaire, il est préférable d'introduire le principe de superposition, i.e. de décomposer  $\phi$  comme la somme de champs créés par des sources élémentaires adéquates.

En vertu de l'identité

$$\rho(r) = \int_{\Omega} dr' \rho(r') \delta(r - r') \tag{1.24}$$

valable pour  $r$  strictement à l'intérieur de  $\Omega$  (et non sur la frontière  $\partial\Omega$ ), il est naturel d'introduire l'ensemble de toutes les sources ponctuelles, chacune d'elles localisée en un point quelconque  $r'$  de  $\Omega$ . A chacune de ces sources localisée en un point  $r'$  donné est associée une densité purement locale qui n'est autre que  $\delta(r - r')$ . Chacune d'entre elles induit un champ élémentaire, défini univoquement par la donnée de conditions aux limites sur la frontière  $\partial\Omega$ . Ce champ est appelé fonction de Green de l'opérateur  $L$ , et il est donc défini par le système [13]

$$\begin{aligned} L_r G(r, r') &= \delta(r - r'), \\ C.L.(G). \end{aligned} \tag{1.25}$$

Soulignons que la fonction de Green  $G(r, r')$  dépend de deux positions qui ne jouent pas le même rôle :  $r$  désigne le point d'observation où le champ élémentaire est évalué, alors que  $r'$  dénote la position de la source ponctuelle. Ainsi dans l'EDP satisfaite par  $G(r, r')$ , l'opérateur agit sur la variable  $r$ , ce qui est stipulé par la notation  $L_r$ . De plus, il existe souvent plusieurs types de  $C.L.$ , qui, en particulier, peuvent être différentes de celles définissant  $\phi$ .

Poursuivons maintenant l'idée de superposition. Considérons pour cela le champ  $\phi$ , défini comme la combinaison linéaire, sommée sur  $r$ , des champs élémentaires  $G(r, r')$  pondérés par  $\rho(r')$ , alors le champ  $\phi$  peut être écrit :

$$\phi(r) = \int_{\Omega} dr' G(r, r') \rho(r'). \quad (1.26)$$

### 1.3.2 Propriétés usuelles

Quelques propriétés simples des fonctions de Green découlent immédiatement de leur définition. Ces propriétés sont reliées aux symétries du problème déterminées à la fois par la forme du domaine  $\Omega$ , la structure de l'opérateur  $L$  et la nature des conditions aux limites. Dans la suite, nous énumérons celles qui sont le plus fréquemment rencontrées.

#### Réciprocité.

Supposons que  $L$  soit hermitien dans l'ensemble des fonctions définies dans  $\Omega$  et satisfaisant à des *C.L.* données.

$$G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = G^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad \forall \vec{r}_1, \vec{r}_2 \in \Omega \quad (1.27)$$

Cette propriété est un cas particulier de relations dites de réciprocité.

Dans le cas où  $G$  est réelle

$$G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = G(\vec{r}_2, \vec{r}_1), \quad (1.28)$$

Alors, les points  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  jouent des rôles symétriques : le champ élémentaire créé en  $\vec{r}_1$  par  $\vec{r}_2$ , est identique à celui créé par  $\vec{r}_2$  en  $\vec{r}_1$ .

#### Invariance par translation.

Si les symétries du problème impliquent l'invariance par translation, alors  $G(\vec{r}_1; \vec{r}_2)$  est fonction uniquement de la différence  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ .

$$G(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = G(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (1.29)$$

### Invariance par translation et rotation.

Si les symétries du problème induisent la double invariance par translation et rotation. alors  $G$  est une fonction uniquement de la distance relative  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

$$G(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = G(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|), \quad (1.30)$$

### 1.3.3 La fonction de Green sous forme opératoriel

Revenons à l'équation générale (1.23) avec les conditions aux limites  $C.L$  proposées. Ces  $C.L.$  définissant une solution  $\phi$  unique pour chaque  $\rho$ , l'opérateur inverse  $L^{-1}$  est alors bien défini. Cet opérateur inverse dépend de  $C.L.$  choisies.

Pour des  $C.L.$  données, nous pouvons donc écrire

$$\phi(\vec{r}) = L^{-1}\rho(\vec{r}) \quad (1.31)$$

Dans ce langage opératoriel, la fonction de Green  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  est obtenue par la spécification de la formule d'inversion (1.31) au cas d'une source ponctuelle de densité associée  $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ , i.e. :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = L^{-1}\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.32)$$

où  $L^{-1}$  agit sur la position  $\vec{r}$ .

Il est aisé de trouver que,

$$\phi(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \rho(\vec{r}') L^{-1}\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.33)$$

Cette expression correspond bien à la forme (1.26) de la solution générale en  $\phi$  avec  $G(\vec{r}, \vec{r}') = L^{-1}\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ .

## Extensions et réécritures

Nous avons introduit la notion de fonction de Green dans le contexte de la détermination d'un champ créé par des sources données. Il se trouve que cette notion peut être étendue à d'autres situations physiques, comme en mécanique quantique, où l'enjeu n'est plus la détermination d'un champ créé par une source.

Pour une simplification des manipulations algébriques et pour des interprétations et extensions ultérieures, il est particulièrement utile de réécrire la formule d'inversion (1.32), en introduisant les concepts spécifiques aux espaces vectoriels. Ici, l'espace vectoriel en question n'est autre que l'espace des fonctions définies sur  $\Omega$  avec les C.L. données. Cet espace de dimension infinie est un espace de Hilbert.

Dans un tel cadre, la formule d'inversion (1.32) devient :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | L^{-1} | \vec{r}' \rangle \quad (1.34)$$

où nous avons utilisé la notation de Dirac. Ainsi, la fonction de Green  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  créée, en un point d'observation  $\vec{r}$  par une source localisée en  $\vec{r}'$ , n'est autre que la composante suivant le vecteur de base  $|\vec{r}\rangle$  du vecteur image  $L^{-1}|\vec{r}'\rangle$  de  $|\vec{r}'\rangle$  par l'opérateur  $L^{-1}$ , i.e. l'élément de matrice de  $L^{-1}$  entre  $\langle \vec{r} |$  et  $|\vec{r}'\rangle$ .

### 1.3.4 La fonction de Green pour les EDO inhomogènes de 2<sup>eme</sup> ordre :

En utilisant le concept de fonction delta, nous allons maintenant développer une théorie systématique des fonctions de Green pour les EDO.

Considérons un opérateur différentiel linéaire de second ordre  $L$  sur  $[a, b]$ , c'est-à-dire :

$$Ly(x) = \alpha(x) \frac{d^2}{dx^2} y + \beta(x) \frac{d}{dx} y + \gamma(x) y = f(x). \quad (1.35)$$

où  $\alpha, \beta, \gamma$ , sont continues,  $f(x)$  est borné, et  $\alpha$  est non nul (sauf peut-être à un nombre de points isolés), et  $a \leq x \leq b$  (a, b peuvent être  $\pm\infty$ ).

Pour cet opérateur  $L$ , la fonction de Green  $G(x; x')$  est définie comme la solution du

problème

$$LG(x, x') = \delta(x - x'). \quad (1.36)$$

satisfaisant aux conditions aux limites homogènes  $G(a, x') = G(b, x') = 0$ . (d'autres C.L homogènes peuvent être utilisées aussi, mais pour plus de clarté, nous traiterons que celles -ci).

La fonction de Green a la propriété fondamentale suivante : la solution au problème inhomogène  $Ly = f(x)$  avec des conditions aux limites homogènes  $y(a) = y(b) = 0$  peut être exprimée comme

$$y(x) = \int_a^b G(x, x')f(x')dx' \quad (1.37)$$

$G$  est le noyau d'un opérateur intégral qui agit comme une inversion de l'opérateur différentiel  $L$ . Notez que  $G$  dépend de  $L$ , mais pas de la fonction source  $f$ .

L'importance de la fonction de Green vient du fait que, compte tenu de notre solution  $G(x, x')$  à l'équation (1.36), on peut résoudre immédiatement le problème plus général  $Ly(x) = f(x)$  de (1.35) pour un terme source arbitraire  $f(x)$ , directement à partir de la formule intégrale eq. (1.37).

Nous pouvons facilement établir la validité de l'eq. (1.37) comme une simple conséquence de (1.35) en utilisant la propriété de la fonction delta Dirac :

$$\begin{aligned} Ly(x) &= L \int_a^b G(x; x')f(x')dx' \\ &= \int_a^b [LG(x; x')] f(x')dx' \\ &= \int_a^b \delta(x - x')f(x')dx' = f(x) \end{aligned} \quad (1.38)$$

puisque la fonction de Green est la seule chose qui dépend de  $x$ . On note aussi que la solution (1.37) ainsi construite obéit à  $y(a) = y(b) = 0$  comme une conséquence directe de ces conditions sur la fonction de Green.

$$y(a) = \int_a^b G(a; x')f(x')dx' = 0 = \int_a^b G(b; x')f(x')dx' = y(b) \quad (1.39)$$

Car que  $G(x, x') = 0$  en  $x = a, b$ .

## 1.4 Méthodes d'obtention de la fonction de Green :

Il existe plusieurs méthodes standard pour trouver la fonction de Green. Nous introduisons ici la méthode d'expression par morceaux, la méthode des fonctions propres et la méthode de transformation de Fourier [35].

### 1.4.1 Méthode d'expression par morceaux :

Notre méthode repose sur le fait que pour tout  $x \neq x'$  éloigné de  $x'$ ,  $LG = 0$ ,  $G$  peut être construite en termes de solutions de l'équation homogène convenablement adaptée à travers  $x = x'$  (cf ci-dessous). Nous procédons avec les étapes suivantes [36] :

1- Résoudre l'équation homogène  $Ly = 0$  sur  $[a; b]$  et trouver des solutions  $y_1$  et  $y_2$  satisfaisant respectivement les deux C.L à savoir.  $y_1(a) = 0$  et  $y_2(b) = 0$ .

Notez que la solution homogène générale satisfaisant  $y(a) = 0$  est  $y(x) = cy_1(x)$  pour  $c$  constante arbitraire (et de même  $y(x) = cy_2(x)$  pour  $y(b) = 0$ ).

2- Considérant maintenant l'intervalle  $[a, b]$  divisé en  $x = x'$ . Puisque pour chaque  $x'$ ,  $G(a, x') = G(b, x') = 0$ , nous définissons :

$$G(x, x') = \begin{cases} A(x')y_1(x); & a \leq x \leq x' \\ B(x')y_2(x); & x' \leq x \leq b. \end{cases} \quad (1.40)$$

Notez que les coefficients  $A$  et  $B$  sont indépendants de  $x$  mais dépendent généralement du point de séparation  $x'$ .

3- Nous avons besoin de deux autres conditions sur  $G$  (pour chaque  $x'$ ) pour fixer les coefficients  $A$  et  $B$ . Ces conditions sont :

**Condition de continuité** : la fonction  $G(x; x')$  est continue en  $x$  pour  $x'$  fixe, en particulier elle est continue au point  $x = x'$  :

$$A(x')y_1(x') = B(x')y_2(x') \quad (1.41)$$

**Condition de saut** : pour chaque  $x'$ ,  $G'(x, x')$  subit en ce point un saut de valeur  $\frac{1}{\alpha(x')}$

$$\left[ \frac{dG}{dx} \right]_{x=x'^-}^{x=x'^+} = \frac{1}{\alpha(x')} \quad (1.42)$$

c'est à dire.

$$B(x')y_2'(x') - A(x')y_1'(x') = \frac{1}{\alpha(x')} \quad (1.43)$$

Récrivons les deux égalités :

$$\begin{cases} -A(x')y_1(x') + B(x')y_2(x') = 0 \\ -A(x')y_1'(x') + B(x')y_2'(x') = \frac{1}{\alpha(x')} \end{cases} \quad (1.44)$$

Le déterminant du système est le wronskien  $W[y_1(x), y_2(x)] = y_1y_2' - y_2y_1'$  calculé en  $x = x'$  pour les solutions linéairement indépendantes  $y_1(x)$  et  $y_2(x)$  de l'équation (1.35).

Donc :

$$W[y_1(x), y_2(x)] \neq 0, \quad (1.45)$$

de sorte que  $A(x')$  et  $B(x')$  de (1.40) se définissent de suite :

$$A(x') = \frac{y_2(x')}{\alpha(x')W(x')} \quad (1.46)$$

$$B(x') = \frac{y_1(x')}{\alpha(x')W(x')} \quad (1.47)$$

Portant les expressions de  $A(x')$  et  $B(x')$  dans (1.40) nous obtenons finalement :

$$G(x; x') = \begin{cases} \frac{y_1(x)y_2(x')}{\alpha(x')W(x')} & a \leq x < x' \\ \frac{y_2(x)y_1(x')}{\alpha(x')W(x')} & x' < x \leq b. \end{cases} \quad (1.48)$$

En outre, la fonction de Green peut être exprimée comme une équation unique en fonction de la fonction Heaviside  $H(x)$  (où  $H(x) = 0$  si  $x < 0$ , et  $H(x) = 1$  si  $x > 0$ ) :

$$G(x; x') = \frac{1}{\alpha(x')W(x')} [H(x' - x)y_1(x)y_2(x') + H(x - x')y_2(x)y_1(x')].$$



ou sous une autre forme :

$$G(x, x') = y_1(x_{<})y_2(x_{>})/\alpha(x')W(x'). \quad (1.49)$$

avec  $x_{>} = \max(x, x')$ , et  $x_{<} = \min(x, x')$

Et la solution de  $Ly = f$  est

$$\begin{aligned} y(x) &= \int G(x, x')f(x')dx' \\ &= y_2(x) \int_a^x \frac{y_1(x')}{\alpha(x')W(x')} f(x')dx' + y_1(x) \int_x^b \frac{y_2(x')}{\alpha(x')W(x')} f(x')dx' \end{aligned} \quad (1.50)$$

Notez que l'intégrale  $\int_a^b$  est séparée en  $x$  en deux parties (1)  $\int_a^x$  et (2)  $\int_x^b$ . Dans la gamme (1) nous avons  $x' < x$  donc on utilise la deuxième expression de l'éq. (1.48) pour  $G(x, x')$ . qui incorpore la CL en  $x = b$ . Pour (2) nous avons  $x > x'$  nous utilisons donc la première expression de  $G(x, x')$  donnée par l'équation. (1.48). qui incorpore la CL en  $x = a$

### 1.4.2 Méthode des fonctions propres :

Il y a des moments qu'il pourrait ne pas être si simple de trouver la fonction de Green sous la forme fermée simple que nous avons vu jusqu'à présent. Cependant, il existe une méthode pour déterminer les fonctions de Green des problèmes de valeurs aux limites de Sturm-Liouville sous la forme d'un développement sur la base des fonctions propres [37].

Considérons l'équation différentielle

$$Ly(x) = f(x), \quad x \in [a, b] \quad (1.51)$$

avec les conditions aux limites appropriées, où  $L$  est l'opérateur de Sturm-Liouville

$$L = \frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{d}{dx}\right) - q(x). \quad (1.52)$$

Nous avons vu que l'opérateur  $L$  a un ensemble complet de fonctions propres définies par l'équation

$$L\varphi_n(x) = \lambda_n\varphi_n(x) \quad (1.53)$$

où  $\lambda_n$  sont les valeurs propres et  $\varphi_n(x)$  les fonctions propres satisfaisant à la relation d'orthogonalité et à la relation de fermeture

$$\int \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx = \delta_{nm} \quad (1.54)$$

$$\sum \varphi_n^*(x)\varphi_n(x')dx = \delta(x - x') \quad (1.55)$$

Dans l'intervalle  $x \in [a, b]$ , nous pouvons développer  $y(x)$  et  $f(x)$  en fonction de l'ensemble  $\{\varphi_n(x)\}$

$$y(x) = \sum_n^{\infty} \alpha_n \varphi_n(x) \quad (1.56)$$

$$f(x) = \sum_n^{\infty} \beta_n \varphi_n(x)$$

où  $\alpha_n$  et  $\beta_n$  sont les coefficients de développement :

$$\alpha_n = \int_a^b \varphi_n^*(x)y(x)dx \quad (1.57)$$

$$\beta_n = \int_a^b \varphi_n^*(x)f(x)dx$$

Opérant sur  $y(x)$  avec  $L$ , nous obtenons

$$Ly(x) = L \sum_n^{\infty} \alpha_n \varphi_n(x) \quad (1.58)$$

$$= \sum_n^{\infty} \alpha_n L\varphi_n(x)$$

En utilisant l'équation (1.58) avec l'équation de la valeur propre (1.53) et l'équation (1.56) nous pouvons écrire

$$Ly(x) = f(x)$$

comme

$$\sum_n^{\infty} [\alpha_n \lambda_n - \beta_n] \varphi_n(x) = 0 \quad (1.59)$$

Parce que les  $\varphi_n$  sont linéairement indépendant, la seule façon de satisfaire cette équation pour tout  $n$  est de mettre l'expression à l'intérieur des crochets égale à zéro, obtenant ainsi

$$\alpha_n = \frac{\beta_n}{\lambda_n} \quad (1.60)$$

Nous utilisons cela dans l'équation (1.56) pour écrire

$$y(x) = \sum_n^{\infty} \frac{\beta_n}{\lambda_n} \varphi_n(x) \quad (1.61)$$

Après avoir substitué le  $\beta_n$  donné dans l'équation (1.57), on obtient

$$y(x) = \int_a^b \sum_n^{\infty} \frac{\varphi_n^*(x) \varphi_n(x')}{\lambda_n} f(x') dx' \quad (1.62)$$

En utilisant la définition de la fonction de Green, c'est-à-dire

$$y(x) = \int_a^b G(x, x') f(x') dx', \quad (1.63)$$

on obtient

$$G(x, x') = \sum_n^{\infty} \frac{\varphi_n^*(x) \varphi_n(x')}{\lambda_n} \quad (1.64)$$

En général, nous rencontrons des équations différentielles données comme

$$(L - \lambda)y(x) = f(x) \quad (1.65)$$

où la fonction de Green pour l'opérateur  $(L - \lambda)$  peut s'écrire

$$G(x, x') = \sum_n^{\infty} \frac{\varphi_n^*(x) \varphi_n(x')}{\lambda_n - \lambda} \quad (1.66)$$

La connaissance du spectre de l'opérateur  $L$ , donne donc accès via la représentation

(1.66) à la fonction de Green correspondant aux C.L. considérées. Remarquons que si  $L$  est hermitien, alors ses valeurs propres  $\lambda_n$  sont toutes réelles : ceci permet de retrouver la relation de réciprocité (1.27) en prenant le complexe conjugué de la représentation (1.66).

Notez que dans l'espace des fonctions complexes, la fonction de Green est hermitienne

$$G(x, x') = G^*(x', x) \quad (1.67)$$

### Extensions et notations

Dans l'élément de matrice (1.34), écrivons  $L^{-1} = L^{-1}I$ , où  $I$  est l'opérateur identité. Remplaçons ensuite  $I$  par la somme des opérateurs de projection orthogonale suivant les vecteurs propres  $|\varphi_n\rangle$  de  $L$ ,

$$I = \sum |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|, \quad (1.68)$$

cette identité étant une simple réécriture de la relation de complétude.

Nous obtenons

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}') &= \langle \vec{r} | L^{-1}I | \vec{r}' \rangle \\ &= \langle \vec{r} | L^{-1} \sum |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \vec{r}' \rangle \\ &= \sum \lambda_n^{-1} \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \vec{r}' \rangle \end{aligned} \quad (1.69)$$

ce qui redonne bien la représentation spectrale (1.64) via les identifications  $\langle \vec{r} | \varphi_n \rangle = \varphi_n(\vec{r})$  et  $\langle \varphi_n | \vec{r}' \rangle = \varphi_n^*(\vec{r}')$ .

Nous allons présenter dans le prochain chapitre des exemples d'extensions et d'autres interprétations des fonctions de Green basées sur l'écriture matricielle (1.69).

### 1.4.3 Méthode de transformée de Fourier :

Une autre méthode commode - quelque fois - consiste à calculer les fonctions de Green par intégration du contour et utilisation du théorème des résidus de Cauchy. La trans-

formée de Fourier de la fonction de Green contiendra généralement des pôles simples. La transformée de Fourier inverse peut ensuite être calculée via l'intégration de contour pour obtenir la fonction de Green dans l'espace de position [35].

Lorsque l'équation aux dérivées partielles est une équation à coefficients constants, la méthode de choix consiste à passer par la transformée de Fourier. Nous allons l'illustrer dans différents exemples plus loin dans ce chapitre.

## 1.5 La fonction de Green en physique :

Les lois de la physique sont écrites en termes d'équations différentielles (la loi de Newton est une équation différentielle de la position d'un objet en fonction du temps, les équations de Maxwell sont des équations différentielles des champs électriques et magnétiques en fonction de l'espace et du temps, etc. Généralement, la quantité qui nous intéresse est une fonction  $u$  et la physique nous dit quel est l'opérateur différentiel  $L$  approprié. Le membre de droite de l'équation différentielle  $Lu(x) = f(x)$  est le terme source. C'est la force si nous traitons les lois de Newton et les densités de charge et de courant si nous traitons l'électrodynamique. Il est généralement considéré comme donné. Lorsque le terme source est une fonction delta de Dirac, la quantité d'intérêt,  $u$  devient la fonction de Green de l'opérateur  $L$ .

### 1.5.1 Signification physique de la fonction de Green :

Généralement, en physique nous pouvons avoir deux situations différentes [13] :

#### 1- Situation stationnaire :

Dans cette situation toutes les quantités en jeu sont indépendantes du temps. La quantité physique étudiée est une fonction dépendante uniquement des coordonnées spatiales. c'est-à-dire un champ statique déterminé par une EDP et par des conditions aux limites spécifiques au problème étudié.

$$L\phi(r) = \rho(r), \tag{1.70}$$

$$C.L.(\phi).$$

Donc les fonctions de Green correspondantes s'appellent indépendantes du temps, et **représentent la distribution spatiale du champ au point  $r'$  généré par une "source ponctuelle"**. Ex : champs électrostatique

$$L_r G(r, r') = \delta(r - r'). \tag{1.71}$$

En utilisant le principe de superposition, nous montrons que l'intégrale de ces fonctions de Green sur tous les points sources est bien solution de l'EDP considérée.

En définitive, la solution de l'éq (1.70) peut être écrite sous la forme :

$$\phi(r) = \int G(r; r') \rho(r') dr' \tag{1.72}$$

## 2- Situation dynamique :

Dans cette situation la densité de sources  $\rho(r, t)$  dépend, cette fois-ci, aussi du temps  $t$ . Ces sources induisent le champ  $\phi(r, t)$ , qui est une solution particulière de l'EDP

$$L\phi(r, t) = \rho(r, t) \tag{1.73}$$

où  $L$  est un opérateur linéaire dépendant des coordonnées spatiales et temporelles.

Naturellement, le champ  $\phi$  est déterminé par cette EDP et par les conditions aux limites spécifiques au problème étudié. Le temps  $t$  joue en fait un rôle particulier par suite de l'existence de la flèche du temps. En vertu du principe de causalité, l'évolution d'un système physique est en partie déterminée par les conditions initiales à un certain temps  $t_0$  pris pour origine. La partie temporelle des conditions aux limites consiste donc à fixer les valeurs du champ et d'un certain nombre de ses dérivées partielles temporelles au temps origine  $t_0$ , et en tout point du domaine  $D$ . Ces conditions initiales seront notées  $C.I.(t_0)$ . En plus des conditions initiales, il faut bien sûr ajouter des conditions aux limites spatiales.

En définitive, la solution unique du système est donnée par :

$$\begin{aligned} L\phi(r, t) &= \rho(r, t) \\ C.L.(\phi(\partial D)) \text{ et } C.I.(\phi(t_0)) \end{aligned} \tag{1.74}$$

Ici, la fonction de Green dynamique est le champ créé par une source ponctuelle avec des conditions aux limites appropriées, i.e..

$$\begin{aligned} L_{r,t}G(r, t; r', t') &= \delta(r - r')\delta(t - t') \\ C.L.(G) \end{aligned} \tag{1.75}$$

Les conditions aux limites sur  $G$  [ $C.L.(G)$ ] contiennent une partie spatiale imposée par les conditions de bord sur la frontière du domaine, et encore une partie temporelle, garantissant le principe de causalité. Bien sûr, la source étant active uniquement à l'instant  $t'$ , **une fonction de Green causale (retardée)**  $G^+(r, t; r', t')$  apparaît comme un champ élémentaire émis à cet instant  $t'$  en un point  $r'$ , et observé à un instant ultérieur  $t > t'$  en un point  $r$ .

Alors le principe de causalité peut s'écrire comme :

$$G^+(r, t; r', t') = 0 \text{ pour } t \prec t' \tag{1.76}$$

Par conséquent, **la fonction de Green a la signification physique de la fonction de réponse d'un système.**

Une telle fonction de Green peut être appelée **fonction de Green avancée**. En physique classique, la fonction de Green avancée semble être une violation du bon sens. néanmoins, en mécanique quantique, la fonction de Green avancée peut exister et a une signification physique précise : il s'agit d'une sorte de parcours en annihilation les particules ou créant des anti-particules.

La différence essentielle par rapport au cas stationnaire réside donc dans la propagation du champ entre les points  $(r, t)$  et  $(r', t')$  de l'espace-temps. Cette remarque conduit immédiatement à une autre qui a des conséquences importantes : la propagation entre ces deux points de l'espace-temps doit respecter le principe de causalité.

## 1.5.2 Exemples d'application :

Nous allons voir en présentant des exemples que la fonction de Green est également très utile pour la résolution d'un grand nombre de problèmes en physique.

### En électrostatique :

Dans le cas de l'électrostatique, l'équation de Poisson est une équation différentielle linéaire aux dérivées partielles [38].

$$\Delta V(\vec{r}) = -\rho(\vec{r})/\epsilon_0 \quad (1.77)$$

où la fonction  $\rho(\vec{r})$  est la distribution de la charge électrique dans un domaine  $\Omega$ .

Nous voulons déterminer le potentiel scalaire  $V(\vec{r})$  en tout point de l'espace.

Pour le faire, nous allons chercher la fonction de Green pour le potentiel scalaire  $V(\vec{r})$ , Nous devons donc vérifier l'équation suivante :

$$\Delta G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.78)$$

On détermine  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  en prenant la transformée de Fourier de chaque membre de (1.78).

Où

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') \quad (1.79)$$

Alors

$$\Delta G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} (i\vec{p})^2 e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') \quad (1.80)$$

Et

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (1.81)$$



En reportant ce résultat dans l'équation (1.77) nous arrivons à :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} (i\vec{p})^2 e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') = (-4\pi) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \\
& \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} \left[ -\vec{p}^2 \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') + 4\pi \right] e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} = 0 \\
& \rightarrow -\vec{p}^2 \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') + 4\pi = 0 \\
& \rightarrow \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{4\pi}{\vec{p}^2}
\end{aligned}$$

Ainsi, la fonction de Green G est donnée par

$$\begin{aligned}
G(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} \tilde{G}(\vec{p}, \vec{p}') \\
&= \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{\vec{p}^2} e^{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} d\vec{p}.
\end{aligned} \tag{1.82}$$

On peut calculer cette intégrale en prenant comme axe  $Oz$  la direction du vecteur fixé  $(\vec{r} - \vec{r}')$  de telle manière que l'angle entre le vecteur d'intégration  $\vec{p}$  et le vecteur  $(\vec{r} - \vec{r}')$  corresponde à l'angle  $\theta$  des coordonnées sphériques. Avec  $d\vec{p} = d^3p = p^2 dp \sin \theta d\theta d\varphi$ , l'intégration donne

$$\begin{aligned}
G(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{1}{\vec{p}^2} e^{ip|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta} p^2 dp \sin \theta d\theta d\varphi \\
&= \frac{4\pi}{(2\pi)^3} (2\pi) \int_0^\infty dp \int_0^\pi e^{ip|\vec{r}-\vec{r}'|\cos\theta} \sin \theta d\theta \\
&= \frac{4\pi}{(2\pi)^3} (2\pi) \int_0^\infty dp \int_{-1}^{+1} e^{ip|\vec{r}-\vec{r}'|x} (-dx) \\
&= \frac{2}{\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^\infty \frac{\sin(p|\vec{r} - \vec{r}'|)}{p} dp \\
&= \frac{2}{\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \left[ \frac{\pi}{2} \right].
\end{aligned}$$

D'où l'on tire la fonction de Green

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \tag{1.83}$$

Ainsi nous obtenons la solution bien connue de l'équation de Poisson

$$V(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad (1.84)$$

**Exemple d'application en électrodynamique :**

En électrodynamique, le potentiel scalaire  $\Phi(\vec{r}, t)$  obéit à l'équation de d'Alembert [38]

$$\square\Phi(\vec{r}, t) = -\rho(\vec{r}, t)/\epsilon_0 \quad (1.85)$$

où  $\rho(\vec{r}, t)$  représente la densité de charge et  $\square$  est le d'alembertien défini par

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (1.86)$$

La fonction de Green  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  relative à l'opérateur  $\square$  est définie par l'équation

$$\square G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t') \quad (1.87)$$

Alors, la solution de l'équation de d'Alembert est donnée par l'intégrale

$$\Phi(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \int dt' G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \rho(\vec{r}', t'). \quad (1.88)$$

On détermine  $G$  en prenant les transformées de Fourier de chacun des membres de l'équation, pour aboutir à

$$\square \tilde{G}(\vec{p}, \omega) = -4\pi\tilde{\delta}(\vec{p})\tilde{\delta}(\omega). \quad (1.89)$$

A l'aide de la formule de la transformée de Fourier d'une dérivée, on obtient la relation

$$i^2(\vec{p}^2 - \frac{\omega^2}{c^2})\tilde{G}(\vec{p}, \omega) = -4\pi \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \quad (1.90)$$

qui fournit la fonction de Green dans l'espace  $\vec{p}$

$$\tilde{G}(\vec{p}, \omega) = -\frac{c^2}{\pi} \frac{1}{\omega^2 - c^2 p^2} \quad (1.91)$$

Ainsi, déterminer  $G(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$  revient à calculer la transformée de Fourier

$$G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{p} \int d\omega \tilde{G}(\vec{p}, \omega) e^{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')} e^{-i\omega(t-t')}. \quad (1.92)$$

Pour des raisons conventionnelles, on choisit le signe moins pour la transformée de Fourier sur  $\omega$  et l'on écrit

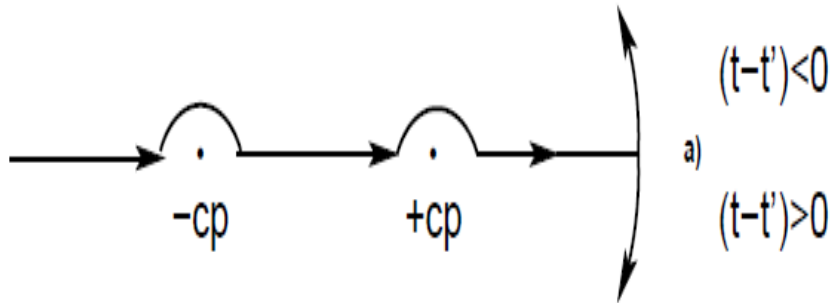
$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') &= -\frac{c^2}{4\pi^3} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')} \int d\omega \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega^2 - c^2 p^2} \\ &= -\frac{c^2}{4\pi^3} \int d\vec{p} e^{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')} I(p) \end{aligned} \quad (1.93)$$

L'intégrant de  $I(p)$  possède des pôles en  $\omega = \pm cp$  et n'est par conséquent pas continu en tout point de l'axe réel. On peut éviter les pôles en considérant différents chemins d'intégration que l'on choisit en appliquant les conditions causales ou des conditions aux limites fixées par le système physique.

Pour calculer les intégrales sur les différents chemins qui évitent les pôles, on doit passer à une intégrale équivalente dans le plan complexe. Cette opération peut être effectuée grâce au lemme de Jordan qui permet de transformer l'intégrale sur l'axe réel  $\omega$  en une intégrale équivalente, fermée dans le plan complexe.

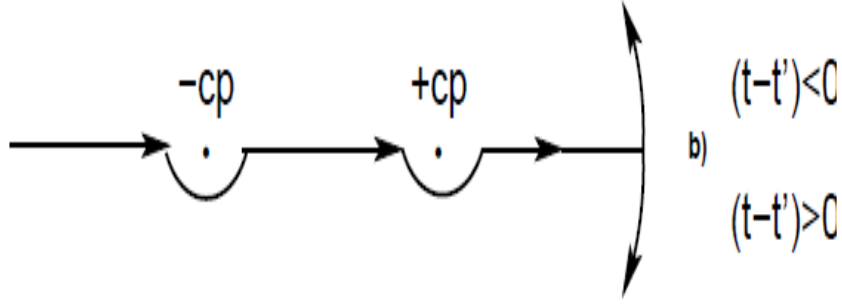
Pour l'intégrant de  $I(p)$  (1.93) qui possède des pôles en  $\omega = \pm cp$ , les intégrales dans le plan complexe sont calculées à l'aide du théorème des résidus qui fournit les valeurs :

- Si l'on évite les pôles par la gauche comme en a)



$$I(p) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t - t' < 0 \\ -2\pi i \sum_{\omega=\pm cp} \text{Res} \left( \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega^2 - c^2 p^2} \right) & \text{pour } t - t' > 0 \end{cases}$$

- si l'on évite les pôles par la droite comme en b)



$$I(p) = \begin{cases} 2\pi i \sum_{\omega=\pm cp} \text{Res} \left( \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega^2 - c^2 p^2} \right) & \text{pour } t - t' < 0 \\ 0 & \text{pour } t - t' > 0 \end{cases}$$

Dans l'expression (2.90) de la fonction de Green, l'intégrant a deux pôles en  $\omega = \pm cp$ . Alors, dans le cas du chemin a), on obtient

$$\begin{aligned} I(p) &= -2\pi i H(t - t') \left[ \lim_{\omega \rightarrow pc} \frac{(\omega - pc)e^{-i\omega(t-t')}}{\omega^2 - p^2 c^2} + \lim_{\omega \rightarrow -pc} \frac{(\omega + pc)e^{-i\omega(t-t')}}{\omega^2 - p^2 c^2} \right] \\ &= -2\pi i H(t - t') \left[ \frac{e^{-ipc(t-t')}}{2pc} + \frac{e^{ipc(t-t')}}{-2pc} \right] \\ &= -2\pi H(t - t') \frac{\sin [pc(t - t')]}{pc}, \end{aligned} \quad (1.94)$$

où  $H(x)$  est la fonction de Heaviside. De même, pour le cas b), on obtient

$$I(p) = 2\pi H(t' - t) \frac{\sin [pc(t - t')]}{pc}. \quad (1.95)$$

Pour effectuer l'intégration  $d\vec{p}$  de (1.93), on place naturellement l'axe d'intégration  $p_z$  parallèle à  $(\vec{r} - \vec{r}')$  de telle manière que l'angle entre  $\vec{p}$  et  $\vec{r} - \vec{r}'$  correspond à l'angle  $\vartheta$  des coordonnées sphériques. Alors pour le cas (1.94), le calcul donne

$$\begin{aligned}
G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') &= -\frac{c^2}{4\pi^3} \int_0^\infty 2\pi dp p^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{ip|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \vartheta} I(p) \\
&= -\frac{c^2}{2\pi^2} \frac{1}{i|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^\infty dpp \left[ e^{ip|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^{-ip|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] I(p) \\
&= \frac{cH(t - t')}{i\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^\infty dp 2i \sin [p|\vec{r} - \vec{r}'|] \sin [pc(t - t')] \\
&= \frac{cH(t - t')}{\pi|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^\infty dp [\cos p(|\vec{r} - \vec{r}'| - c(t - t')) - \cos p(|\vec{r} - \vec{r}'| + c(t - t'))].
\end{aligned} \tag{1.96}$$

La forme (1.16) de la fonction de Dirac fournit l'expression

$$\int_0^\infty d\zeta \cos(a\zeta) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta \cos(a\zeta) = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta (e^{ia\zeta} + e^{-ia\zeta}) = \pi\delta(a) \tag{1.97}$$

qui permet d'écrire explicitement la fonction de Green

$$G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \frac{cH(t - t')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} [\delta(|\vec{r} - \vec{r}'| - c(t - t')) - \delta(|\vec{r} - \vec{r}'| + c(t - t'))]. \tag{1.98}$$

Finalement, la condition de causalité  $t - t' > 0$  où le temps  $t'$  de la source est antérieur au temps  $t$  de la mesure, nous conduit à **la fonction de Green retardée**

$$G_{ret}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta\left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c} - (t - t')\right) \tag{1.99}$$

On a utilisé la propriété  $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$  et le fait que la distribution de Dirac est nulle pour un argument strictement positif. Le cas b) en découle immédiatement, il suffit de remplacer  $t - t'$  par  $t' - t$  pour obtenir **la fonction de Green avancée**. Avec la fonction de Green (1.99), l'intégration de (1.88) sur  $dt'$  est immédiate et la solution retardée de l'équation de d'Alembert s'écrit :

$$\Phi_{ret}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \rho(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c}) \tag{1.100}$$

Sa forme est la même que dans le cas statique (1.84), mais avec un temps  $t - |r - r'|/c$  de la source retardé par rapport au temps  $t$  de la mesure du champ.

## 1.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons précisé que les fonctions de Green interviennent essentiellement dans la recherche des solutions d'une équation aux dérivées partielles satisfaisant à certaines conditions aux limites et initiales.

Nous avons vu qu'elles sont également très utiles pour la résolution d'un grand nombre de problèmes en physique.

Nous avons envisagé trois méthodes de construction de la fonction de Green :

- 1- méthode de division-de-région.
- 2- méthode du développement sur la base des fonctions propres.
- 3- méthode de la transformée de Fourier

Nous avons traité deux types de problèmes très fréquents en physique classique : l'équation de Poisson en électrostatique puis l'équation de d'Alembert en électrodynamique.

# Chapitre 2

## La fonction de Green en mécanique quantique

### 2.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de donner un aperçu sur les fonctions de Green, en particulier dans leur application à la mécanique quantique. Nous présentons les fonctions de Green dans le contexte simple de l'équation de Schrodinger à une particule unique.

Les fonctions et les opérateurs de Green que nous allons traiter sont : soient dépendantes du temps ou dépendantes de l'énergie. Les fonctions de Green dépendant du temps sont appelées propagateurs, elles sont utiles pour résoudre des problèmes dépendants du temps. Tandis que les fonctions dépendantes de l'énergie (indépendantes du temps), elle sont appelées la fonction de Green. Le lecteur devra cependant noter que de nombreux auteurs utilisent cette dernière appellation pour les deux. Comme on peut s'y attendre, l'une de ces deux fonctions est la transformée de Fourier de l'autre.

Bien entendu, les fonctions de Green ont une grande importance en physique quantique. Elles sont étroitement liées aux fonctions d'onde et contiennent également des informations sur l'évolution temporelle du système, les valeurs propres d'énergie, les fonctions propres, la densité d'états [39 – 40]. La technique des fonctions de Green permet de s'attaquer directement aux problèmes de calcul des énergies d'excitation et d'ionisation, à l'étude de la variation des niveaux d'énergie, aux matrices de transition. En plus, les fonctions

de Green et les opérateurs de Green sont au cœur de tout traitement raisonnable et complet des processus de diffusion et de désintégration en mécanique quantique. De plus, les théories des perturbations autocohérentes peuvent être formulées en termes de fonction de Green.

Nous commençons ce chapitre en présentant des connaissances minimales en mécanique quantique, comme l'équation de Schrodinger, la notion d'espace de Hilbert et d'opérateurs agissant sur les vecteurs de l'espace de Hilbert. Nous utiliserons fréquemment la notation des bras et kets de Dirac pour indiquer les vecteurs de l'espace de Hilbert et leurs conjugués complexes. A toutes fins utiles, certaines notions de base de la mécanique quantique sont rappelées au début de ce chapitre.

Nous discutons ensuite des fonctions de Green dans la mécanique quantique, qui dépendent du temps (propagateur), et qui constituent un point de départ vers la théorie des fonctions de Green dépendant de l'énergie. Nous présentons le propagateur de l'équation de Schrodinger, qui peut être interprété comme l'amplitude de probabilité pour qu'une particule élémentaire se déplace d'un endroit à un autre dans un temps donné.

Nous développons la théorie des fonctions et des opérateurs de Green. Nous présentons la transformée de Fourier de propagateur. Nous déduisons l'opérateur de Green et nous verrons en particulier comment les opérateurs de Green fournissent une méthode générale et simple pour manipuler formellement les équations intégrales de diffusion.

Enfin, nous travaillons sur le cas particulier de la fonction de Green pour une particule libre.



## 2.2 Fondements de la Mécanique Quantique.

### 2.2.1 Fonction d'onde :

Il s'est avéré que les particules les plus infimes ou élémentaires (atomes, électrons, noyaux...) n'obéissent pas aux lois de la Mécanique Classique. Leur description s'inscrit donc dans une nouvelle mécanique, à savoir la Mécanique Quantique. Dans cette mécanique, une particule élémentaire se manifeste dans l'espace comme une onde.

Soit  $\psi(\vec{r}, t)$  la fonction d'onde associée, où  $\vec{r}$  est la position de la particule dans l'espace et  $t$  le temps. La probabilité de présence dans un élément de volume autour de  $\vec{r}$  est tout simplement le carré du module de la fonction d'onde :  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ .

### 2.2.2 L'équation de Schrodinger :

Comme pour toute onde,  $\psi$  doit satisfaire une équation d'onde. C'est l'équation de Schrodinger, définie par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H\psi(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

où  $H$  est le Hamiltonien du système et  $\hbar$  la fameuse constante de Planck, divisée par  $2\pi$ . Pour une particule de masse  $m$ , subissant l'action d'un potentiel  $V(\vec{r})$ , l'on a

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\vec{r}), \quad (2.2)$$

où  $\Delta_r$  est l'opérateur Laplacien.

Il est souvent commode de se placer dans la représentation de Dirac.

### 2.2.3 Kets d'un espace de Hilbert

De manière très schématique, un espace de Hilbert est un espace vectoriel de dimension infinie, muni d'un produit scalaire. Ainsi, un vecteur de cet espace n'est autre qu'une fonction  $\psi(r)$  d'un domaine  $D$  dans  $C$ . Elle est désignée par  $|\psi\rangle$ , dit « ket  $\psi$  », qui est

construit à partir de la fonction d'onde de la façon suivante :

$$\langle \vec{r}' | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{r}', t) \quad (2.3)$$

Cela veut dire que la projection du ket sur la base continue  $\{\vec{r}'\}$  est la fonction d'onde.

Cette notation, introduite par Dirac à l'origine dans le cadre de la mécanique quantique, peut être utilisée pour n'importe quel autre problème, où la quantité physique d'intérêt appartient à un espace de Hilbert. Soulignons que  $|\psi\rangle$  est le strict analogue d'un vecteur  $u$  dans un espace vectoriel de dimension finie.

A côté du ket, l'on définit le "bras", comme le conjugué hermitique du ket :

$$\langle \psi | = |\psi\rangle^\dagger \quad (2.4)$$

## 2.2.4 Produit scalaire

Le produit scalaire du ket  $|\psi_b\rangle$  avec le ket  $|\psi_a\rangle$ , noté  $\langle \psi_b | \psi_a \rangle$  avec  $\langle \psi_b |$  dit «Bra  $\psi_b$ », est défini par le bracket

$$\langle \psi_b | \psi_a \rangle = \int_D dr \psi_b^*(r) \psi_a(r) \quad (2.5)$$

où  $\psi_b^*(r)$  est le complexe conjugué de  $\psi_b(r)$ . Notons ici que l'équivalent du produit scalaire usuel  $u_b \cdot u_a$  n'est plus invariant dans l'échange des deux vecteurs puisque  $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = (\langle \psi_b | \psi_a \rangle)^*$ . Par contre les autres propriétés habituelles du produit scalaire sont conservées.

## 2.2.5 Base $|r\rangle$

La distribution de Dirac  $\delta(r - r')$ , conçue comme une fonction de  $r$  à  $r'$  donné,  $r'$  est un vecteur particulier noté  $|r'\rangle$ . L'ensemble des vecteurs  $|r'\rangle$  forme une base complète et orthonormée de l'espace considéré. En particulier, avec la définition du produit scalaire, on obtient aisément

$$\langle r'' | r' \rangle = \delta(r'' - r') \quad (2.6)$$

Par ailleurs, le produit scalaire du vecteur  $|r\rangle$  par le vecteur  $|\psi\rangle$  se réduit à la valeur de la fonction  $\psi$  au point  $r$ , c'est-à-dire

$$\langle\psi|r\rangle = \psi(r). \quad (2.7)$$

N'importe quel vecteur  $|\psi\rangle$  peut être décomposé en une combinaison linéaire unique des  $|r\rangle$ , i.e. :

$$|\psi\rangle = \int_D dr c(r) |r\rangle, \quad (2.8)$$

où les coefficients  $c(r)$  sont les analogues des coefficients  $c_i$  de la décomposition de n'importe quel vecteur  $v$  sur une base  $\{u_i, i = 1, \dots, d\}$  d'un espace vectoriel de dimension finie  $d$ . En exploitant l'orthonormalité de la base  $\{|r\rangle, r \in D\}$ , on montre facilement que les coefficients  $c(r)$  de cette combinaison linéaire s'identifient à  $\psi(r)$ , soit

$$|\psi\rangle = \int_D dr \psi(r) |r\rangle \quad (2.9)$$

## 2.2.6 Projecteurs orthogonaux

L'image d'un vecteur  $|\psi\rangle$ , par l'opérateur linéaire  $P_a$  de projection orthogonale suivant le vecteur  $|\psi_a\rangle$ , est un vecteur  $P_a|\psi\rangle$  colinéaire à  $|\psi_a\rangle$  avec un facteur de proportionnalité qui n'est autre que le produit scalaire  $\langle\psi_a|\psi\rangle$  :

$$P_a|\psi\rangle = \langle\psi_a|\psi\rangle |\psi_a\rangle. \quad (2.10)$$

tel que :

$$P_a = |\psi_a\rangle \langle\psi_a|, \quad (2.11)$$

Soulignons que cette notation ket-bra  $|\psi_a\rangle \langle\psi_a|$  définit un opérateur et non pas un vecteur.

## 2.2.7 Relation de fermeture

Etant donnée une base orthonormée formée de vecteurs  $|\psi_a\rangle$  où l'indice  $a$  décrit un certain ensemble  $A$  de valeurs (discrètes et/ou continues), la composante suivant  $|\psi_a\rangle$  d'un vecteur  $|\psi\rangle$ , est donnée par le produit scalaire  $\langle\psi_a|\psi\rangle$ . Ainsi la décomposition correspondante de  $|\psi\rangle$  peut être réécrite comme l'action de l'opérateur  $\sum_{a\in A} P_a$  sur  $|\psi\rangle$ . Ceci étant valable pour n'importe quel vecteur, la somme sur  $a$  des opérateurs de projection orthogonale suivant  $|\psi_a\rangle$  n'est autre que l'opérateur identité  $I$ , ce qui s'écrit

$$\sum_{a\in A} |\psi_a\rangle \langle\psi_a| = I. \quad (2.12)$$

Cette relation, dite de fermeture ou de complétude, est valable pour n'importe quelle base orthonormée.

## 2.2.8 Opérateurs

Soit enfin un opérateur linéaire  $L$ , défini originellement par son action sur une fonction quelconque  $\psi(r)$ . Alors l'image du vecteur correspondant  $|\psi\rangle$  par  $L$ , notée  $L|\psi\rangle$ , est définie par l'ensemble de ses composantes  $\langle r' | L | \psi \rangle$  sur la base  $\{|r'\rangle, r' \in D\}$ , chaque composante étant identifiée à  $L\psi(r')$ . De manière plus générale, n'importe quel opérateur linéaire  $L$  est défini à partir d'une base orthonormée  $\{|\psi_a\rangle, a \in A\}$  par la donnée de tous les éléments de matrice  $\langle\psi_b | L | \psi_a\rangle$ . L'opérateur  $L$  peut donc se réécrire comme :

$$L = \sum_{a,b} \langle\psi_b | L | \psi_a\rangle |\psi_b\rangle \langle\psi_a|. \quad (2.13)$$

On déduit l'équation de Schrodinger pour le ket

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \widehat{H} |\psi(t)\rangle, \quad (2.14)$$

Où cette fois-ci le Hamiltonien  $\widehat{H}$  est un opérateur agissant sur l'espace de Hilbert

Comme le Hamiltonien est un opérateur hermitien ( $\widehat{H}^\dagger = \widehat{H}$ ), l'on déduit l'équation

de Schrodinger pour le bras

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}, \quad (2.15)$$

### 2.2.9 Opérateur évolution.

On suppose que l'on connaît l'état du système,  $|\psi(t_0)\rangle$ , à l'instant  $t_0$ . La solution de l'équation de Schrodinger (2.1) peut s'écrire

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (2.16)$$

où  $\hat{U}(t, t_0)$  est l'opérateur "évolution", qui fait passer l'état du système de  $t_0$  à  $t$ . Il doit satisfaire l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} = \hat{H} \hat{U}, \quad (2.17)$$

L'opérateur  $\hat{U}$  caractérise la "propagation" dans le temps.

#### Propriétés de l'opérateur $\hat{U}$

Rappelons les principales propriétés de l'opérateur

1.  $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}$  : il n'y a pas de propagation.
2.  $\hat{U}(t, t_0)^{-1} = \hat{U}(t_0, t)$  : propagation dans le sens opposé.
3.  $\hat{U}(t, t') \cdot \hat{U}(t', t'') = \hat{U}(t, t'')$  : propagation progressive.
4.  $\hat{U}(t, t_0) \cdot \hat{U}(t, t_0)^\dagger = \hat{I}$  : conservation des probabilités de transition.

## 2.3 Propagateur de l'équation de Schrodinger

L'objet qui sert à la description quantique usuelle d'une particule est sa fonction d'onde  $\varphi(x, t)$ , gouvernée par l'équation de Schrodinger [41]

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \varphi(x, t) = 0 \quad (2.18)$$

L'hamiltonien  $H(t)$ , qui n'est pas explicitement spécifié ici, peut contenir l'effet de champs extérieurs dépendant du temps.

Toutes les propriétés de la particule au temps  $t$  peuvent être déduites de la connaissance de  $\varphi(x, t)$

Soit  $H$  le hamiltonien indépendant du temps, de valeurs propres  $E_n$  et de vecteurs propres  $|\phi_n\rangle$  : on a les relations

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (2.19)$$

$$\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (2.20)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (2.21)$$

Dans la représentation  $\vec{r}$  nous posons

$$\langle \vec{r} | \phi_n \rangle = \phi_n(\vec{r}). \quad (2.22)$$

La relation de fermeture conduit à

$$\sum_n \langle \vec{r} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \vec{r}' \rangle = \sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.23)$$

Décomposons la fonction d'onde  $|\psi(t)\rangle$  sur les états  $|\phi_n\rangle$ .

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi(t)\rangle \\ &= \sum_n |\phi_n\rangle c_n(t). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Avec

$$c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t)\rangle \quad (2.25)$$

vérifiant

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_n(t) = E_n c_n(t). \quad (2.26)$$

Dont la solution

$$c_n(t) = c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \quad (2.27)$$

Alors

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}. \quad (2.28)$$

On déduit de (2.28)

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \sum_n \langle \vec{r} | \phi_n \rangle c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \\ &= \sum_n \phi_n(\vec{r}) c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Et de (2.25) et (2.27)

$$\begin{aligned} c_n &= c_n(t) e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} = \langle \phi_n | \psi(t) \rangle e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \\ &= \int \phi_n^*(\vec{r}) e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

D'autre part

$$\psi(\vec{r}', t') = \sum_n \phi_n(\vec{r}') c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t'}. \quad (2.31)$$

Et compte tenu de (2.30)

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t')} \psi(\vec{r}', t') d^3\vec{r}'. \quad (2.32)$$

L'équation ci-dessus décrit l'évolution temporelle de la fonction d'onde à partir d'un temps et d'une position donnés  $(\vec{r}', t')$ , en l'évaluant vers un autre temps et espace  $(\vec{r}, t)$ .

C'est pourquoi l'expression  $\sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t')}$  est connue comme le propagateur.

On a donc le propagateur de l'équation de Schrodinger :

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t')}. \quad (2.33)$$

Nous avons ainsi défini  $K$  en fonction des vecteurs propres et des valeurs propres du Hamiltonien  $H$ .

$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  est donc une quantité extrêmement riche en information, car sa connaissance exige la diagonalisation complète du Hamiltonien  $H$  [42].

Si on fait dans (2.33)  $t' = t$ , on trouve :

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t) = \sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.34)$$

On peut réécrire

$$\psi(\vec{r}, t) = \int K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \psi(\vec{r}', t') d^3 r'. \quad (2.35)$$

étant donné que l'expression (2.33) de  $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  ne fait pas d'hypothèse sur l'ordre des temps  $t'$  et  $t$ . Cependant, comme l'état du système à l'instant  $t$  ne peut dépendre que de son état à des instants antérieurs, on complètera la définition de  $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  par la condition :

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = 0, \quad t' \prec t \quad (2.36)$$

Finalement

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \sum_n \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') e^{-i \frac{E_n}{\hbar} (t-t')} H(t-t') \quad (2.37)$$

$H(t-t')$  étant la fonction Heaviside définie par :

$$\begin{cases} H(t-t') = 1 & \text{si } t \geq t' \\ H(t-t') = 0 & \text{si } t \prec t' \end{cases} \quad (2.38)$$

### 2.3.1 Relation avec l'opérateur d'évolution

La fonction de Green a un lien étroit avec l'opérateur  $U(t, t')$  qui gouverne l'évolution des états

$$U(t, t') = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t')}. \quad (2.39)$$



Réécrivons la fonction d'onde en fonction de l'opérateur d'évolution.

Pour simplifier, nous pouvons représenter les fonctions d'onde comme des vecteurs d'état dans la représentation de position comme

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle. \quad (2.40)$$

Ecrivons  $\Psi(t)$  comme l'évolution de  $\Psi(t')$ , et en utilisant la relation de fermeture

$$\int |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}'| d^3r' = 1, \quad (2.41)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \langle \vec{r} | U(t, t') | \psi(t') \rangle \quad (2.42)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \langle \vec{r} | U(t, t') | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi(t') \rangle d^3r' \quad (2.43)$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \langle \vec{r} | U(t, t') | \vec{r}' \rangle \psi(\vec{r}', t') d^3r' \quad (2.44)$$

qui reproduit l'équation (2.35) avec :

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \langle \vec{r} | U(t, t') | \vec{r}' \rangle \theta(t - t') = \langle \vec{r}, t | \vec{r}', t' \rangle \theta(t - t') \quad (2.45)$$

où

$$\langle \vec{r}, t | = \langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (2.46)$$

et

$$|\vec{r}', t'\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} |\vec{r}'\rangle. \quad (2.47)$$

Ainsi, nous avons associé la fonction de Green à l'amplitude de probabilité de trouver la particule dans un état  $\langle \vec{r}, t |$ , étant donné quel état commençait à  $|\vec{r}', t'\rangle$ .

En peut définir  $K$  comme un opérateur associé à l'hamiltonien  $H$  et en fonction de

l'opérateur d'évolution en écrivant :

$$\widehat{K}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \theta(t - t') \widehat{U}(t, t') \quad (2.48)$$

Cette notation est fréquemment utilisée de façon conventionnelle même lorsque  $H$  dépend du temps.

### 2.3.2 Interprétation du propagateur

Dans la représentation de position, on obtient la fonction d'onde sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle &= \psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int d^3 r' \langle \vec{r} | U(t, t_0) | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

où nous avons supposé que les vecteurs propres de l'opérateur de position forment une base complète :

$$\int d^3 r' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | = 1 \quad (2.50)$$

On peut donc écrire [41] :

$$\psi(\vec{r}, t) = i \int d^3 r' K(\vec{r}, t; \vec{r}', t_0) \psi(\vec{r}', t_0) \quad (2.51)$$

où nous avons défini :

$$iK(\vec{r}, t; \vec{r}', t_0) \equiv \langle \vec{r} | U(t, t_0) | \vec{r}' \rangle \quad (2.52)$$

Le facteur  $i$  a été introduit pour se conformer aux notations de Bjorken et Drell [42]. Nous verrons qu'il simplifiera certaines équations par la suite.

Comme nous le montrerons plus loin,  $iK$  est le propagateur de l'équation de Schrodinger.

Explorons davantage le sens de la fonction d'onde. Supposons par exemple que la

particule soit localisée au point  $\vec{r}_0$ , à l'instant  $t_0$ . Alors  $|\psi(t_0)\rangle = |\vec{r}_0\rangle$ , et donc :

$$\psi(\vec{r}', t_0) = \langle \vec{r}' | \psi(t_0) \rangle = \langle \vec{r}' | \vec{r}_0 \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \quad (2.53)$$

Dans ces conditions, on a, en partant de (2.51) :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= i \int d^3r' K(\vec{r}, t; \vec{r}', t_0) \psi(\vec{r}', t_0) \\ &= i \int d^3r' K(\vec{r}, t; \vec{r}', t_0) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \\ &= iK(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \\ &= \langle \vec{r} | U(t, t_0) | \vec{r}_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.54)$$

Donc  $K(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)$  représente l'amplitude de probabilité pour trouver une particule au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$  sachant que cette particule était en  $\vec{r}_0$  à l'instant  $t_0$ . Ce qui est très important à comprendre c'est que nous ne savons pas comment la particule passe de  $\vec{r}_0$  à  $\vec{r}$ . En fait, si nous n'essayons pas de déterminer les points de passage intermédiaires, la mécanique quantique nous enseigne que tout se passe comme si la particule prenait tous les chemins possibles en même temps! Bien que nous ne puissions pas dire quel chemin la particule a pris, nous pouvons cependant calculer l'amplitude de probabilité qu'elle ait pris un certain chemin, et on peut montrer que  $iK$  est la somme des amplitudes correspondantes à tous les chemins possibles. En d'autres termes,  $iK$  peut s'écrire comme une intégrale de chemin.

Nous comprenons mieux maintenant pourquoi  $iK(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)$  est appelé un propagateur. Cette fonction décrit avec quelle amplitude de probabilité la particule est propagée de  $(\vec{r}_0, t_0)$  à  $(\vec{r}, t)$ .

### 2.3.3 Equation satisfaite par $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$

Pour déterminer l'équation différentielle à laquelle  $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  obéit, on peut calculer la dérivée par rapport au temps de  $K$  [43].

Compte tenu de la définition (2.45) et de l'identité :

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t) = \delta(t)$$

On a

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K = HK + i\hbar\langle\vec{r} | U(t, t') | \vec{r}'\rangle\delta(t - t') \quad (2.55)$$

Comme  $U(t, t) = I$ , on en déduit que le propagateur  $K$  vérifie l'équation différentielle inhomogène

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right]K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = i\hbar\delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t') \quad (2.56)$$

où  $H(t)$  est écrit en représentation  $\vec{r}$ . Cette équation ne spécifie pas le propagateur de façon unique, puisque l'on peut toujours ajouter à une solution de (2.56) une solution de l'équation homogène correspondante. Ainsi que nous l'avons déjà noté, c'est la fonction  $\theta(t - t')$  dans (2.45) qui fixe la solution de façon unique et définit le propagateur retardé.

Il est clair que la formulation de la mécanique quantique d'une particule en terme de sa fonction d'onde ou de propagateur soumis à (2.56) sont équivalentes.

La connaissance de  $\psi(\vec{r}, t)$  pour  $t \geq t'$  permet de déterminer  $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  par la relation (2.54). Réciproquement, la solution retardée de (2.56) fournit selon (2.54) une fonction d'onde qui obéit à l'équation de Schrodinger [41].

Utilisant la propriété (4) de l'opérateur d'évolution et la relation de fermeture ( $\int |\vec{r}_1\rangle\langle\vec{r}_1| d^3r_1 = 1$ ) écrite pour un temps  $t' < t_1 < t$ , on déduit l'équation suivante

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \int K(\vec{r}, t; \vec{r}_1, t_1)K(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}', t')d^3r_1 \quad (2.57)$$

### 2.3.4 Propagateur libre

L'exemple le plus simple de propagateur est celui de l'équation de Schrodinger libre :  $V = 0$ . Pour des raisons de simplicité d'écriture, nous allons nous limiter au cas d'une particule de masse  $m$  se déplaçant dans un espace à une dimension, mais la plupart des

résultats qui vont suivre se généralisent sans difficulté à N particules dans un espace à trois dimensions [43].

En notant  $K_0(x, r'; x, t')$  le propagateur libre, nous obtenons à partir de (2.45), avec  $H = H_0 = P^2/2m$

$$K_0(x, t; x', t' = 0) = \langle x | e^{-ip^2(t-t')/2m\hbar} | x' \rangle$$

Insérons alors deux fois la relation de fermeture pour les impulsions dans la définition du propagateur

$$K_0(x, t; x', t') = \int dp \int dp' \langle x | p \rangle \langle p | e^{-ip^2(t-t')/2m\hbar} | p' \rangle \langle p' | x' \rangle \quad (2.58)$$

Le ket  $|p'\rangle$  étant par définition un état propre de l'opérateur impulsion  $\hat{p}$ , on a :

$$\hat{p} |p'\rangle = p' |p'\rangle \quad (2.59)$$

et l'élément de matrice devient :

$$\langle p | e^{-ip^2(t-t')/2m\hbar} | p' \rangle = e^{-ip'^2(t-t')/2m\hbar} \langle p | p' \rangle \quad (2.60)$$

Sachant que  $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$ , on obtient pour le propagateur :

$$K_0(x, t; x', t') = \int dp \langle x | p \rangle e^{-ip^2(t-t')/2m\hbar} \langle p | x' \rangle \quad (2.61)$$

Compte tenu de la formule  $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{+ipx/\hbar}$ , et  $\langle p | x' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx'/\hbar}$  il vient :

$$K_0(x, t; x', t') = \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{+ipx/\hbar} \times e^{-ip^2(t-t')/2m\hbar} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx'/\hbar} \quad (2.62)$$

qui se réécrit :

$$\begin{aligned} K_0(x, t; x', t') &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{p(x-x')/\hbar} \times e^{-ip^2(t-t')/2m\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left[ \frac{ip(x-x')}{\hbar} - \frac{ip^2(t-t')}{2m\hbar} \right] \end{aligned} \quad (2.63)$$

L'argument de l'exponentielle peut se réécrire comme suit :

$$\frac{ip(x-x')}{\hbar} - \frac{ip^2(t-t')}{2m\hbar} = -\frac{i(t-t')}{2m\hbar} \left[ p^2 - \frac{2mp(x-x')}{(t-t')} \right] \quad (2.64)$$

Or le crochet est le début d'un carré parfait :

$$\left[ p^2 - \frac{2mp(x-x')}{(t-t')} \right] = \left[ p - \frac{m(x-x')}{(t-t')} \right]^2 - \frac{m^2(x-x')^2}{(t-t')^2} \quad (2.65)$$

donc l'argument de l'exponentielle devient :

$$\begin{aligned} & -\frac{i(t-t')}{2m\hbar} \left[ \left( p - \frac{m(x-x')}{(t-t')} \right)^2 - \frac{m^2(x-x')^2}{(t-t')^2} \right] \\ & = -\frac{i(t-t')}{2m\hbar} \left( p - \frac{m(x-x')}{(t-t')} \right)^2 + \frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')} \end{aligned} \quad (2.66)$$

Le dernier terme étant indépendant de l'impulsion, il sort de l'intégrale et le propagateur s'écrit :

$$K_0(x, t; x', t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right) \times \int dp \exp\left[-\frac{i(t-t')}{2m\hbar} \left(p - \frac{m(x-x')}{(t-t')}\right)^2\right] \quad (2.67)$$

On fait un changement de variable sur les impulsions, les autres paramètres étant fixés :

$$p \rightarrow k = p - \frac{m(x-x')}{(t-t')} \Rightarrow dp \rightarrow dk = dp$$

ce qui donne :

$$K_0(x, t; x', t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right) \times \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp\left[-\frac{i(t-t')k^2}{2m\hbar}\right] \quad (2.68)$$

Il subsiste une intégrale Gaussienne qui se calcule exactement :

$$\int dk e^{-\alpha k^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

On en déduit que :

$$K_0(x, t; x', t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m\hbar}{i(t-t')}} \exp\left(\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right) \quad (2.69)$$

d'où l'expression finale du propagateur libre :

$$K_0(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}} \exp\left(\frac{+im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right) \quad (2.70)$$

Pour une particule libre dans un espace Euclidien à  $d$  dimensions, on pourrait démontrer de façon analogue que [8] :

$$K_0(x, t; x', t') = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}\right)^{d/2} \exp\left(\frac{+im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right) \quad (2.71)$$

### 2.3.5 La série perturbative du propagateur

Soit un système quantique dont l'évolution est décrite par un hamiltonien  $H_0$ . Supposons connu son propagateur retardé  $K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ , il vérifie les relations

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right] K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = i\hbar\delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t') \quad (2.72)$$

où

$$K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = 0 \quad \text{si } t' \prec t \quad (2.73)$$

Appliquons maintenant une perturbation  $V$  (dépendante ou indépendante du temps). Le hamiltonien devient  $H = H_0 + V$ . Cherchons à déterminer, à partir de  $K_0$  et de  $V$ , le propagateur retardé du hamiltonien  $H$ , c'est à dire  $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  vérifiant

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right] K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = i\hbar\delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t') \quad (2.74)$$

où

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = 0 \quad \text{si } t' \prec t$$

Pour cela, écrivons l'équation (2.74) sous la forme inhomogène

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right] K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = i\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') + V(\vec{r}) K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \quad (2.75)$$

et considérons le second membre comme une source  $\rho(\vec{r}, t)$ .

Nous avons vu que si  $K'(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  vérifie

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right] K'(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \quad (2.76)$$

alors

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \int \rho(\vec{r}'', t'') K'(\vec{r}, t; \vec{r}'', t'') d\vec{r}'' dt'' \quad (2.77)$$

Or, d'après (2.72), et (2.76), on voit que  $K'(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t')}{i\hbar}$ .

(2.77) s'écrit alors :

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{i\hbar} \int K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \left[ i\hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') + V(\vec{r}_1) K(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}', t') \right] d\vec{r}'' dt'' \quad (2.78)$$

Soit

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') + \frac{1}{i\hbar} \int K_0(\vec{r}, t; \vec{r}'', t'') V(\vec{r}_1) K(\vec{r}'', t''; \vec{r}', t') d\vec{r}'' dt'' \quad (2.79)$$

Les deux propagateurs retardés du hamiltonien non perturbé et du hamiltonien perturbé sont donc reliés entre eux par l'équation intégrale (2.79).

Nous pouvons, dans la second membre de (2.79), remplacer  $K(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}', t')$  par son expression intégrale et on obtient ainsi le développement en série de la perturbation

$$\begin{aligned} K(\vec{r}, t; \vec{r}', t') &= K_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') + \frac{1}{i\hbar} \int K_0(\vec{r}, t; \vec{r}_1, t_1) V(\vec{r}_1) K(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}', t') d\vec{r}_1 dt_1 \\ &+ \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int K_0(\vec{r}, t; \vec{r}_1, t_1) V(\vec{r}_1) K_0(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_2, t_2) V(\vec{r}_2) K_0(\vec{r}_2, t_2; \vec{r}', t') d\vec{r}_1 dt_1 d\vec{r}_2 dt_2 + \dots \end{aligned} \quad (2.80)$$

Dans chaque terme de la série (2.80), la présence des fonctions des propagateurs  $K_0$



fait que les temps sont automatiquement rangés par ordre croissant.

## 2.4 Fonctions de Green

Nous allons maintenant nous restreindre au cas où le hamiltonien est indépendant du temps et où l'opérateur d'évolution dépend seulement de la différence  $(t - t')$

$$U(t - t') = \exp[-iH(t - t')/\hbar] \quad (2.81)$$

Il sera commode de choisir  $t' = 0$  et de récrire le propagateur sous la forme

$$K(\vec{r}, t; \vec{r}', t' = 0) = K(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \theta(t) \langle \vec{r} | \exp[-iHt/\hbar] | \vec{r}' \rangle \quad (2.82)$$

Soit  $\{\phi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \phi_n \rangle\}$  un système complet de fonctions propres du hamiltonien  $H$  d'énergie  $E_n$

$$H\phi_n(\vec{r}) = E_n\phi_n(\vec{r}) \quad (2.83)$$

Compte tenu de ces définitions on peut récrire le propagateur en utilisant la relation de fermeture des vecteurs propres de  $H$ ,  $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = I$

$$\begin{aligned} K(\vec{r}, \vec{r}'; t) &= \theta(t) \sum_n \sum_m \langle \vec{r} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \exp[-iHt/\hbar] | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \vec{r}' \rangle \\ &= \theta(t) \sum_n \exp[-iE_n t/\hbar] \phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}') \end{aligned} \quad (2.84)$$

La transformée de Fourier temporelle de  $K(\vec{r}, \vec{r}'; t)$  introduit une fonction intéressante, la fonction de Green  $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$  dépendante de l'énergie  $E$ .

Pour calculer cette transformée de Fourier, évaluons l'intégrale

$$I(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt/\hbar} \theta(t) e^{-iE_n t/\hbar} = \int_0^{+\infty} dt e^{i(E-E_n)t/\hbar} \quad (2.85)$$

Nous observons que nous devons calculer des intégrales de la forme  $\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt/\hbar}$  et

elles ne sont pas bien définies si  $E$  est réel. Cependant, si  $E$  est complexe et si sa partie imaginaire est positive, alors cette intégrale est bien définie.

Alors, nous remplaçons  $E$  par  $E + i\epsilon$ ,  $\epsilon \rightarrow 0^+$ . Ceci équivaut à prendre la transformée de Fourier d'une fonction  $\theta(t)$  comme celle d'une distribution. Nous obtenons pour  $I(E)$

$$I(E) = \frac{i\hbar}{E - E_n + i\epsilon} \quad (2.86)$$

Nous pouvons vérifier le résultat en calculant la transformée de Fourier inverse à l'aide d'une intégration dans le plan complexe en  $E$ .

Nous pouvons maintenant écrire la transformée de Fourier du propagateur

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\frac{i}{\hbar} \int K(\vec{r}, \vec{r}'; t) e^{iEt/\hbar} dt = \sum_n \frac{\phi_n(\vec{r}) \phi_n^*(\vec{r}')}{E - E_n + i\epsilon} \quad (2.87)$$

où le facteur  $-\frac{i}{\hbar}$  a été introduit par convention. La transformation de Fourier inverse est

$$K(\vec{r}, \vec{r}'; t) = i \int \frac{dE}{2\pi} e^{-iEt/\hbar} G(\vec{r}, \vec{r}'; E). \quad (2.88)$$

La fonction  $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$  est appelée fonction de Green de l'équation de Schrodinger indépendante du temps, car elle vérifie

$$(E - H)G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.89)$$

L'équation (2.89) est la transformée de Fourier temporelle de (2.74).

### 2.4.1 Opérateurs de Green

$H$  étant l'hamiltonien à une particule. Soit  $\lambda$  une variable complexe. On définit l'opérateur de Green  $\widehat{G}$  associé à l'hamiltonien  $H$  comme :

$$\widehat{G}(\lambda) = \frac{1}{\lambda \widehat{I} - H} \quad (2.90)$$

Ici  $\widehat{I}$  représente l'opérateur identité. L'opérateur de Green est une fonction de variable

$\lambda$ .

$G(\lambda) = (\lambda - H)^{-1}$  est la résolvante de  $H$ , et  $G(\lambda)$  étant obtenue en choisissant  $\lambda = E + i\epsilon$ . avec  $\epsilon \rightarrow 0^+$

$$\widehat{G}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E + i\epsilon - H} \quad (2.91)$$

$G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$  est l'élément de matrice  $\langle \vec{r} | \widehat{G}(E) | \vec{r}' \rangle$  de l'opérateur  $\widehat{G}(E)$ .

Pour justifier directement (2.89) on utilise (2.87)

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}'; E) &= \left\langle \vec{r} | \widehat{G}(E) | \vec{r}' \right\rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\langle \vec{r} | \frac{1}{E + i\epsilon - H} | \vec{r}' \right\rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_n \langle \vec{r} | \phi_n \rangle \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \left\langle \phi_n | \vec{r}' \right\rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{\phi_n^*(\vec{r}') \phi_n(\vec{r})}{E - E_n + i\epsilon} \end{aligned} \quad (2.92)$$

## 2.4.2 Propriétés analytiques de l'opérateur de Green

On définit l'opérateur de Green, fonction de la variable complexe  $z$ , par :

$$G(z) = (z - H)^{-1} \quad (2.93)$$

L'hamiltonien étant hermitien,  $H = H^\dagger$ , on a la relation  $G^\dagger(z) = G(z^*)$ . On peut donc se limiter à l'étude de  $\widehat{G}(z)$  dans le demi plan  $\text{Im } z \geq 0$ .

Les pôles de  $\widehat{G}(z)$  correspondent aux valeurs propres réelles de  $H$ . Ils sont donc situés sur l'axe réel et  $\widehat{G}(z)$  est analytique en dehors de cet axe.

Pour un système de taille finie on obtient un spectre discret de pôles sur l'axe réel, c-à-d que pour un système infini on pourra obtenir des distributions continues de pôles correspondant aux différentes bandes d'énergie, séparées par des gaps contenant éventuellement des pôles isolés.

Au niveau d'un pôle isolé ou d'une coupure,  $\widehat{G}(z)$  a une partie imaginaire discontinue sur l'axe réel.

Connaître les fonctions de Green permet de déterminer où se trouvent les états discrets. Si le spectre est continu, cela permet de déterminer la densité d'états. Celle-ci est définie comme [48]

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = -\frac{1}{\pi} \int dr \operatorname{Im} G(r, r'; E)$$

La connaissance de la fonction de Green pour un problème quantique indépendant du temps est équivalente à celle des fonctions propres et valeurs propres de  $H$ , c'est-à-dire à la solution complète du problème quantique. C'est cette observation qui rend la fonction de Green particulièrement utile (éq 2.92).

### 2.4.3 Fonction de Green pour une particule libre

A titre d'exemple, calculons les fonctions de Green pour une particule libre. Ce cas est assez simple pour que nous puissions faire tous les calculs de manière explicite, et il est également important pour les applications à la théorie de diffusion. Pour trouver  $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ , nous utilisons Eq. (2.92) et nous introduisons la représentation d'impulsion :

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}'; E) &= \langle \vec{r} | G(E + i\epsilon) | \vec{r}' \rangle \\ &= \int d\vec{p} d\vec{p}' \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | G(E + i\epsilon) | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \\ &= \int d\vec{p} d\vec{p}' \left\langle \vec{r} | \vec{p} \right\rangle \langle \vec{p} | \left\{ (E + i\epsilon)\widehat{I} - \widehat{H} \right\}^{-1} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \vec{r}' \rangle \end{aligned}$$

Appliquant

$$\langle \vec{p} | \left\{ (E + i\epsilon)\widehat{I} - \widehat{H} \right\}^{-1} | \vec{p}' \rangle = \frac{\delta(\vec{p} - \vec{p}')}{E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m}}$$

alors

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \left\{ E + i\epsilon - \frac{p^2}{2m} \right\}^{-1} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}$$

Effectuons les changements

$$\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad \text{et} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

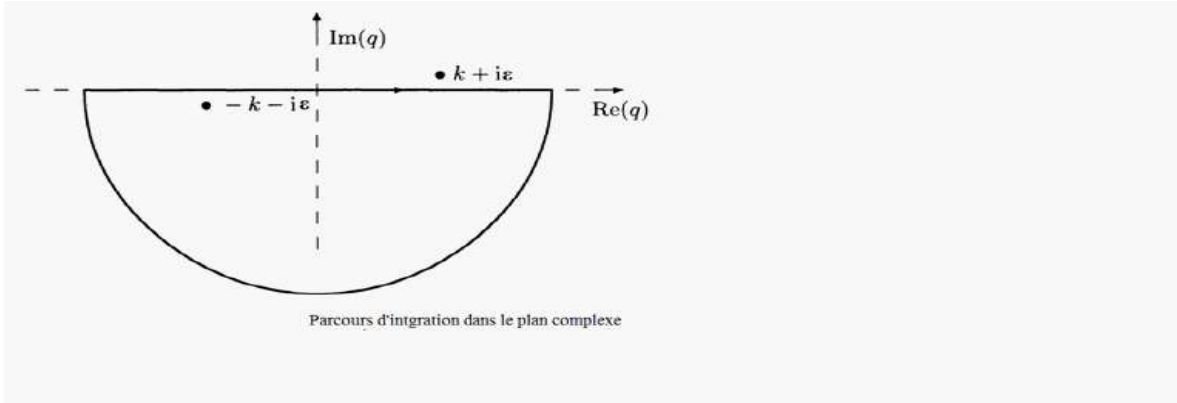
$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\frac{m}{4\pi^3 \hbar^2} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \quad (2.94)$$

Et introduisons les coordonnées sphériques  $(q, \theta_q, \varphi_q)$  du vecteur  $\vec{q}$  par rapport à la direction  $\vec{r} - \vec{r}'$ .

En effectuant l'intégrale sur  $d\theta_q$  et  $d\varphi_q$ , on trouve que

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}'; E) &= -\frac{m}{4\pi^3 \hbar^2} \int_0^\infty q^2 dq \int d\Omega_q \frac{1}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{-iq|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta_q} \\ &= \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{i|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^\infty dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} \left\{ e^{-iq|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} \right\} \\ &= \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{i|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{-iq|\vec{r} - \vec{r}'|}. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Pour effectuer cette intégrale, il est utile de considérer  $q$  comme une variable complexe, représentée sur la figure ci-dessous



Parcours d'intégration dans le plan complexe [37]

Il est aisé de montrer que l'ajout, au parcours d'intégration, du demi-cercle de rayon infini dans le demi-plan inférieur ne produit aucun apport additionnel à l'intégrale. A l'intérieur du parcours fermé, la seule singularité est un pôle simple situé à  $q = -k - i\epsilon$ . L'application du théorème des résidus nous donne

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{(-2\pi i)}{i |\vec{r} - \vec{r}'|} \lim_{q \rightarrow -k - i\epsilon} \left\{ \frac{q}{q - k - i\epsilon} e^{-iq|\vec{r} - \vec{r}'|} \right\}.$$

En effectuant la limite indiquée, et en faisant tendre  $\epsilon$  vers zéro, on obtient finalement

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (2.96)$$

#### 2.4.4 La série de perturbation pour la fonction de Green

La transformation de Fourier sur le temps de  $K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$  est

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -\frac{i}{\hbar} \int dT e^{iEt/\hbar} K(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$$

Donc le transformation de Fourier de l'équation (2.79) est

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E) + \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r}_1 G_0(\vec{r}, \vec{r}_1; E) V(\vec{r}_1) G(\vec{r}_1, \vec{r}'; E).$$

Cette équation intégrale est maintenant appelée équation de Lippman–Schwinger pour la fonction de Green [42].

Le raisonnement précédent peut aussi être appliqué pour construire un développement perturbatif de la résolvante associée à l'opérateur  $H$  au voisinage de la résolvante libre (associée à l'opérateur  $H_0$ ).

$$\frac{1}{E - H + i\epsilon} = \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E - H + i\epsilon}$$

On déduit que :

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = G_0(\vec{r}, \vec{r}'; E) + G_0(\vec{r}, \vec{r}_1; E) V(\vec{r}_1) G(\vec{r}_1, \vec{r}'; E)$$

# Chapitre 3

## Calcul de la fonction de Green sur une sphère à $N$ dimensions

### 3.1 Introduction

Dans ce chapitre on propose de résoudre quelques problèmes de physique quantique dans un espace de dimension arbitraire  $N$ , en faisant usage de la méthode de la fonction de Green. Concrètement, ce problème entre dans le cadre de la théorie du potentiel très fréquentée par les physiciens de la mécanique quantique. Tout d'abord on donne un rappel sur l'espace multi-dimensionnel tel que les coordonnées hypersphériques et les harmoniques hypersphériques, qui sont les généralisations  $N$ -dimensionnelles des coordonnées sphériques et des harmoniques sphériques tridimensionnelles bien connues. On rappelle certains faits de base sur les opérateurs hypersphériques de Laplace. On résume également les propriétés de leurs fonctions propres - harmoniques hypersphériques - qui trouveront des applications dans les sous-sections suivantes. Puis, on arrive à la forme de l'équation de Schrodinger de dimensions  $N$ . On aboutit à une forme générale de la fonction de Green hyperradiale, et hyperangulaire de Schrodinger pour un système de dimension  $N$ . Ensuite nous avons calculé la fonction de Green relative à l'équation de Schrodinger indépendante du temps en coordonnées sphériques de dimension  $N$  avec des potentiels symétriques sphériques, On construit l'équation intégrale relative au problème aux limites posés; nous allons traiter trois cas à savoir : le problème d'une barrière finie, le problème d'un puits fini et le problème

d'un puits infini.

## 3.2 Généralité sur l'espace de dimension arbitraire

### 3.2.1 Les coordonnées hypersphériques

Dans l'espace euclidien de dimension  $N$ , pour un point de coordonnées cartésiennes  $(x_1, \dots, x_N)$ , on définit les coordonnées hypersphériques  $(r, \theta_1, \dots, \theta_{N-1})$  par [44]

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-3} \sin \theta_{N-2} \sin \varphi \\ x_2 = r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-3} \sin \theta_{N-2} \cos \varphi \\ x_3 = r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-3} \cos \theta_{N-2} \\ x_4 = r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \cos \theta_{N-3} \\ \quad \cdot \\ \quad \cdot \\ \quad \cdot \\ x_i = r \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \dots \sin \theta_{N-i} \cos \theta_{N-i+1} \\ \quad \cdot \\ \quad \cdot \\ \quad \cdot \\ x_N = r \cos \theta_1 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

avec

$$0 \leq \theta_K \leq \pi \quad (k = 1, 2, \dots, N-2) \quad \text{et} \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

Il n'est pas difficile de montrer que le jacobien de la transformation (3.1) est

$$J = r^{N-1} (\sin \theta_1)^{N-2} (\sin \theta_2)^{N-3} \dots (\sin \theta_i)^{N-i-1} \dots (\sin \theta_{N-2}) \quad (3.2)$$

Et que l'élément de volume en termes de ces coordonnées est

$$d^N x = J dr d\theta_1 d\theta_2 \dots d\theta_{N-1} = r^{N-1} dr d\Omega_N \quad (3.3)$$



où

$$d\Omega_N = (\sin \theta_1)^{N-2} (\sin \theta_2)^{N-3} \dots (\sin \theta_{N-2}) d\theta_1 d\theta_2 \dots d\theta_{N-1} \quad (3.4)$$

est l'élément de l'angle solide de dimension  $N$ .

### 3.2.2 Le laplacien en coordonnées sphériques de dimension $N$

Considérons le mouvement d'une particule dans un potentiel sphérique symétrique en  $N$  dimensions,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_N + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \Omega_N) = E \psi_{nlm}(r, \Omega_N), \quad (3.5)$$

où  $\Delta_N$  est le laplacien en coordonnées sphériques à  $N$  dimensions (voir [45]).

Lorsque  $N \geq 3$

$$\begin{aligned} \Delta_N &\equiv \nabla_N^2 \equiv \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\Lambda_{N-1}^2(\Omega_N)}{r^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\Lambda_{N-1}^2(\Omega_N)}{r^2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

et  $\Lambda_{N-1}^2(\Omega_N)$  est un opérateur différentiel partiel sur la sphère unitaire  $S^{N-1}$  appelé Laplace Beltrami où l'opérateur grand orbitale ou hyperangulaire. qui est donné ci-après en coordonnées angulaires hypersphériques. Sa définition est analogue à celle du moment angulaire tridimensionnel.

$$\Lambda_{N-1}^2 = - \sum_{i \geq j}^N \Lambda_{ij}^2, \quad \Lambda_{ij}^2 = x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j \frac{\partial}{\partial x_i}; \quad (3.7)$$

pour toutes les composantes cartésiennes  $x_i$  du vecteur  $N$ -dimensionnel  $(x_1, \dots, x_N)$ . Compte tenu de la symétrie sphérique du problème, il convient d'introduire les coordonnées hypersphériques  $(r, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-2}, \varphi)$ . Ici,  $r$  est la variable radiale tandis que les variables angulaires  $\Omega_N \equiv \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-2}, \varphi$  sont les hyperangles.

L'opérateur Laplace-Beltrami  $\Lambda_{N-1}^2(\Omega_N)$  a maintenant l'expression explicite suivante,

$$\Lambda_{N-1}^2(\Omega_N) = \sum_{i=1}^{N-2} \left( \prod_{j=1}^i \sin \theta_j \right)^{-2} (\sin \theta_i)^{i+3-N} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left( \sin \theta_i^{N-i-1} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \left( \prod_{j=1}^{N-2} \sin \theta_j \right)^{-2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.8)$$

Cet opérateur est bien connu et possède le spectre suivant,

$$\Lambda_N^2(\Omega_N) Y_\ell^m(\Omega_N) = \ell(\ell + N - 2) Y_\ell^m(\Omega_N). \quad (3.9)$$

où  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  et  $Y_\ell^m(\Omega_N)$  sont les harmoniques hypersphériques définies par

$$Y_\ell^m(\Omega_N) = N_{\ell,m} \exp(im\varphi) \prod_{k=1}^{N-2} C_{Z_k - Z_{k+1}}^{\alpha_k + Z_{k+1}}(\cos \theta_k) (\sin \theta_k)^{Z_{k+1}}, \quad (3.10)$$

avec la constante réelle de normalisation  $N_{\ell,m} > 0$  telle que

$$N_{\ell,m}^2 = \frac{1}{2\pi} \prod_{k=1}^{N-2} \frac{(\alpha_k + Z_k)(Z_k + Z_{k+1})! [\Gamma(\alpha_k + Z_{k+1})]^2}{\pi 2^{1-2\alpha_k - 2Z_{k+1}} \Gamma(2\alpha_k + Z_k + Z_{k+1})}$$

### 3.2.3 La fonction delta à N dimensions

La fonction delta en coordonnées cartésiennes à N dimensions peut-être écrite[44]

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \delta(x_1)\delta(x_2)\dots\delta(x_N)$$

la transformation entre les coordonnées cartésiennes et sphériques donne

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \frac{1}{|J|} \delta(r)\delta(\theta_1)\dots\delta(\theta_{N-1})$$

où  $J$  est le jacobien

$$|J| = \left| \frac{\partial (x_1 x_2 \dots x_N)}{\partial (r \theta_1 \dots \theta_{N-1})} \right| = r^{N-1} (\sin \theta_1)^{N-2} (\sin \theta_2)^{N-3} \dots \sin \theta_{N-2}$$

alors

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \frac{1}{r^{N-1} \sin \theta_1^{N-2} \dots \sin \theta_{N-2}} \delta(r) \delta(\theta_1) \dots \delta(\theta_{N-1}). \quad (3.11)$$

En prenant la partie radiale (après intégration sur les angles  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1}$ ), nous trouvons[46 – 47]

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r) \quad (3.12)$$

### 3.3 Problèmes de dimension N dans les coordonnées sphériques

#### 3.3.1 Equation de Schrodinger de dimension N

L'équation de Schrodinger indépendante du temps pour une particule de masse  $m$ , soumise à un potentiel sphérique symétrique  $V(\vec{r}) = V(r)$ , dans l'espace à N dimensions a la forme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_N \psi_{nlm} + V(r) \psi_{nlm} = E \psi_{nlm} \quad (3.13)$$

où  $\Delta_N$  est le laplacien dans les coordonnées sphériques  $(r, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1})$ . tel que  $r = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_N^2}$  est la coordonnée radiale.

On choisit les fonctions propres de l'état lié  $\psi_{nlm}(r, \Omega_N)$  qui disparaissent pour  $r \rightarrow 0$  et  $r \rightarrow \infty$ .

En appliquant la méthode de séparation de variables, cela nous aide à écrire la fonction d'onde comme :

$$\psi_{nlm}(r, \Omega_N) = R_{nl}(r) Y_l^m(\Omega_N) \quad (3.14)$$

où  $R_{nl}(r)$  est la partie radiale de l'équation (3.13) et  $Y_l^m(\Omega_N)$  est la partie angulaire appelée harmonique hypersphérique.  $Y_l^m(\Omega_N)$  obéit à l'équation aux valeurs propres [47]

$$\Lambda_N^2 Y_l^m(\Omega_N) = l(l + N - 2) Y_l^m(\Omega_N), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.15)$$

L'équation hyperradiale N-dimensionnelle devient

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (3.16)$$

où  $E$  est la valeur propre de l'énergie et  $l$  est le nombre quantique angulaire orbital  $l = 0; 1; 2; \dots$

### 3.3.2 La fonction de Green hyperradiale

Dans un espace de dimension N l'équation de Schrodinger d'une particule soumise à un potentiel sphérique symétrique  $V(r)$  a la forme

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_N + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \Omega_N) = E \psi_{nlm}(r, \Omega_N),$$

La fonction de Green  $G_N$  associée à ce problème satisfait

$$\left[ E - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_N - V(r) \right] G_N(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.17)$$

où  $G_N(\vec{r}, \vec{r}'; E)$  s'écrit

$$G_N(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \sum_{l,m} Y_l^{m*}(\Omega'_N) Y_l^m(\Omega_N) G_N^l(r, r'; E) \quad (3.18)$$

$G_N^l(r, r'; E)$  est la fonction de Green radiale solution de l'équation différentielle suivante

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] G_N^l(r, r') = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r - r') \quad (3.19)$$

Nous réorganisons l'équation (3.19) pour la rendre sous la forme standard de Sturm-Liouville (1.7)

$$\frac{d}{dr}(r^{N-1} \frac{d}{dr} G_N^l(r, r')) + r^{N-1} \left( \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) G_N^l(r, r') = \delta(r - r') \quad (3.20)$$

En vertu de la procédure annoncée dans le chapitre (1), la fonction de Green peut être écrite sous la forme (1.49)

$$G_N^l(r, r'; E) = u(r_<)v(r_>)/r'^{N-1}W[u, v](r'). \quad (3.21)$$

$$\text{où } r_> = \max(r, r'), \text{ et } r_< = \min(r, r')$$

Ici  $u(r)$  et  $v(r)$  sont des solutions de l'équation homogène (1.2) quand  $r \neq r'$ , appropriées aux conditions aux limites à  $r = 0$  et  $r = \infty$  respectivement, tandis que  $W[u, v]$  est le Wronskian

$$W[u, v] = u(r)v'(r) - v(r)u'(r).$$

La solution particulière  $G_N^l(r, r'; E)$  se comporte comme une onde sphérique sortante comme  $r_> \rightarrow \infty$ .

Cette fonction de Green est liée par une transformée de Fourier du propagateur  $K$  comme suit (2.78)

$$G(r, r', E) = -\frac{i}{\hbar} \int K(r, r', t) e^{iEt} dt. \quad (3.22)$$

Cela peut être montré facilement, à partir des représentations spectrales suivantes (2.78)

$$G(r, r', E) = \sum_n \frac{R_n(r)R_n^*(r')}{E + i\epsilon - E_n} \quad (3.23)$$

et (2.37)

$$K(r, r', t) = \sum_n R_n(r)R_n^*(r') e^{-iE_n t}. \quad (3.24)$$

### 3.3.3 La fonction de Green hyperangulaire

La fonction de Green hyperangulaire est donnée comme solution de l'équation

$$[\Lambda_N^2 - \ell(\ell + N - 2)] G^N(\Omega, \Omega') = \delta(\Omega - \Omega') \quad (3.25)$$

où  $\Omega$  représente les  $N - 1$  coordonnées hyperangulaires nécessaires pour décrire la surface d'une hypersphère à  $N$  dimensions. et  $\delta(\Omega - \Omega')$  est la fonction  $\delta$  de Dirac dans les coordonnées hyperangulaires.

La fonction de Green  $G^N(\Omega, \Omega')$  peut être trouvée sous plusieurs formes [28 – 46 – 47].

La dérivation la plus simple de la fonction de Green repose sur la complétude des harmoniques hypersphériques :

$$\sum_{\ell m} Y_{\ell m}^*(\Omega') Y_{\ell m}(\Omega) = \delta(\Omega - \Omega') \quad (3.26)$$

La fonction  $Y_{\ell m}$  est la solution de l'équation aux valeurs propres

$$\Lambda_N^2 Y_{\ell m}(\Omega) = \ell(\ell + N - 2) Y_{\ell m}(\Omega) \quad (3.27)$$

Ici,  $\ell$  est le nombre quantique de moment hyperangulaire, et  $m$  énumère les états dégénérés.

Depuis [28]

$$\sum_m Y_{\ell m}^*(\Omega') Y_{\ell m}(\Omega) = \frac{2\ell + N - 1}{(N - 1)S_N} C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(-\vec{R} \cdot \vec{R}')$$

où  $C_\nu^\alpha$  est une fonction de Gegenbauer,  $S_N$  est la surface d'hypersphère unité de dimension  $N$ .

$$S_N = \int d\Omega = \frac{2\pi^{\frac{N+1}{2}}}{\Gamma(\frac{N+1}{2})}$$

et  $(\vec{R} \cdot \vec{R}') \equiv \cos \theta$  où  $\theta$  est l'angle entre les deux hypervecteurs normalisés  $\vec{R}$ ,  $\vec{R}'$  portés par  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$ .

On peut utiliser l'équation (3.24) avec l'équation (3.25) pour trouver  $G^N(\Omega, \Omega')$  comme

$$G^N(\Omega, \Omega') = \sum_{lm} \frac{Y_{lm}^*(\Omega') Y_{lm}(\Omega)}{\ell(\ell + N - 2) - m(m + N - 2)} \quad (3.28)$$

La forme de la fonction de Green hyperangulaire est donnée dans [28] par

$$G^N(\Omega, \Omega') = \frac{-\pi}{(N - 2) S_N \sin \pi \ell} C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(-\vec{R} \cdot \vec{R}'), \quad /N \geq 2 \quad (3.29)$$

Ainsi la forme générale de la fonction de Green

$$G^N(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\Gamma(\frac{N}{2} - 1)}{4\pi^{N/2}} \sum_{\ell} (2\ell + N - 3) C_\ell^{\frac{N-2}{2}}(-\vec{R} \cdot \vec{R}') G_\ell(r, r'), \quad /N \geq 2 \quad (3.30)$$

### 3.3.4 Calcul de la fonction de Green d'une particule libre

On considère une particule de masse  $m$  soumise à un potentiel sphérique symétrique  $V(r)$  dans une sphère de dimension  $N$ .

La fonction de Green est définie comme une solution de l'équation

$$\left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{r^{N-1} \partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l + N - 2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] G_N(\vec{r}, \vec{r}') = \delta^{(N)}(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.31)$$

Adoptons la dépendance angulaire trouvée ci-dessus (3.30) :

$$G_N(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\Gamma(\frac{N}{2} - 1)}{4\pi^{N/2}} \sum_l (2l + N - 3) C_l^{\frac{N-2}{2}}(-\vec{R} \cdot \vec{R}') G_N(r, r')$$

où  $G_N(r, r')$  la fonction de Green radiale.

Nous voyons que, à cause de l'orthonormalité des harmoniques sphériques, (3.26), l'équation (3.31) correspond à l'équation suivante vérifiée par la fonction de Green radiale,

$$\left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{r^{N-1} \partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l + N - 2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right] G_N(r, r') = \frac{\delta^{(N)}(r - r')}{r^{N-1}} \quad (3.32)$$

Pour le cas de la particule libre, nous écrivons l'équation (3.32) avec  $V = 0$ , on trouve

$$\frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) G_N(r, r') + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right] G_N(r, r') = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r - r') \quad (3.33)$$

Pour faciliter, nous mettons  $G_N(r; r') \equiv g_{l,N}(r)$ , et pour  $r \neq r'$  l'équation (3.33) peut être écrite sous la forme :

$$\frac{d^2}{dr^2} g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} g_{l,N}(r) + \left( \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) g_{l,N}(r) = 0 \quad (3.34)$$

En faisant les changements

$$z = kr$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

alors  $g_{l,N}(r)$  satisfait à l'équation suivante

$$\frac{d^2}{dz^2} g_{l,N}(z) + \frac{(N-1)}{z} \frac{d}{dz} g_{l,N}(z) + \left[ \left( 1 - \frac{l(l+N-2)}{z^2} \right) \right] g_{l,N}(z) = 0 \quad (3.35)$$

qui est l'équation de Bessel multisphérique d'ordre  $l$ .

Les solutions linéairement indépendantes correspondantes sont  $j_{l,N}(z)$  et  $\eta_{l,N}(z)$  définies par :

$$u(r) = j_{l,N}(kr) = \left( \frac{\pi}{2kr} \right)^{\frac{N-2}{2}} J_{l+\frac{N-2}{2}}(kr) \equiv (kr)^{\frac{2-N}{2}} J_{l+\frac{N-2}{2}}(kr) \quad (3.36)$$

et

$$v(r) = \eta_{l,N}(kr) = \left( \frac{\pi}{2kr} \right)^{\frac{N-2}{2}} Y_{l+\frac{N-2}{2}}(kr) \equiv (kr)^{\frac{2-N}{2}} Y_{l+\frac{N-2}{2}}(kr) \quad (3.37)$$

où

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$



$j_{l,N}, \eta_{l,N}$  sont les fonctions de Bessel multisphériques, leur comportement asymptotique étant décrit dans [44 – 46].

Pour  $z \rightarrow \infty$

$$j_l(x) \rightarrow \sin(z - l\pi/2)/z, \quad \eta_l(z) \rightarrow \cos(z - l\pi/2)/z.$$

et pour  $z \rightarrow 0$

$$j_l(z) \rightarrow z^l, \quad \eta_l(z) \rightarrow \frac{1}{z^{l+1}},$$

Nous pouvons écrire une solution plus générale de l'équation (3.35) comme

$$g(z, z') = Aj_{l,N}(kr) + B\eta_{l,N}(kr) \quad (3.38)$$

où les constantes A et B doivent être choisies selon le problème étudié.

Le Wronskian de (3.36) et (3.37) est donné par [47]

$$\begin{aligned} W [j_{l,N}(kr'), \eta_{l,N}(kr')] &= (kr')^{2-N} W \left[ J_{l+\frac{N-2}{2}}(kr'), Y_{l+\frac{N-2}{2}}(kr') \right] \\ &= (kr')^{2-N} \frac{2}{\pi(kr')} = \frac{2}{\pi} (kr')^{1-N} \end{aligned}$$

En appliquant la procédure décrite ci-dessus, depuis, (3.21) la solution de l'équation (3.33) peut être écrite sous la forme

$$\begin{aligned} G_N^l(r, r') &= j_{l,N}(kr_{<})\eta_{l,N}(kr_{>})/\frac{2}{\pi} (kr')^{1-N} (kr')^{N-1} \\ &= \frac{\pi}{2} j_{l,N}(kr_{<})\eta_{l,N}(kr_{>}) \end{aligned} \quad (3.39)$$

où

$$G_N^l(r, r') = \frac{\pi}{2} \begin{cases} \eta_{l,N}(kr')j_{l,N}(kr), & r < r' \\ j_{l,N}(kr')\eta_{l,N}(kr), & r' < r \end{cases}$$

Seul  $j_{l,N}$  apparaît dans la première forme car la solution doit être finie en  $r = 0$ ,

### 3.3.5 Fonction de Green et amplitude de diffusion dans un espace multidimensionnel

La diffusion dans un espace multidimensionnel peut être étudiée d'une manière assez similaire à celle utilisée pour la diffusion d'une particule par un potentiel dans un espace tridimensionnel.

Comme la plupart des interactions physiques sont décrites par des potentiels dont une grande partie est invariante par rotation dans l'espace N-dimensionnel, nous étudierons le cas de la diffusion d'une onde plane par un potentiel hypercentral  $U(r)$ .

Le développement d'une onde plane sous forme d'une série de polynômes Gegenbauer

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 2^{(N-3/2)} \frac{\Gamma(N/2 - 1)}{(\pi)^{1/2}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l + N - 2) C_l^{\frac{N-2}{2}}(\cos\theta) j_{l,N}(kr), \quad (3.40)$$

où  $\vec{k}\cdot\vec{r} = kr \cos\theta$ .

Nous recherchons une onde radiale  $R_l(r)$ , analogue à  $j_{l,N}(kr)$  dans Eq.(3.34), qui est une solution de

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] R_l(r) = 0 \quad (3.41)$$

avec le comportement asymptotique

$$R_l(r) \rightarrow j_{l,N}(kr) + f_l(k) e^{ikr} / r^{(N-1)/2}; \text{ si } r \rightarrow \infty \quad (3.42)$$

L'onde partielle  $R_l(r)$  qui est une solution de (3.41) peut être écrite sous la forme :

$$R_l(r) = j_{l,N}(kr) + \int_0^{\infty} G_l(r, r') U(r') r'^{N-1} R_l(r') dr' \quad (3.43)$$

On peut facilement le prouver en substituant Eq. (3.43) dans (3.41).

L'amplitude  $f_l(k)$  est obtenue à partir du comportement asymptotique de l'Eq. (3.43) pour  $r \rightarrow \infty$ .

$$f_l(k) = \int_0^{\infty} G_l(r, r') U(r') r'^{N-1} R_l(r') dr' \quad (3.44)$$

L'éq. (3.43) est la représentation intégrale de l'équation (3.41), y compris la condition asymptotique requise d'une onde sortante, de l'équation différentielle (3.41). Dans l'approximation de Born, nous supposons que  $f_l(k)$  est petit, ce qui conduit à

$$f_l(k) = - \left( \frac{k}{i} \right)^{(N-3)/2} \int_0^\infty (j_{l,N}(kr))^2 U(r') r'^{N-1} R_l(r') dr' \quad (3.45)$$

La diffusion avec une onde sortante se comporte de manière asymptotique selon les équations (3.40) et (3.42) comme

$$\Psi^+(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\Omega) e^{ikr} / r^{(N-1)/2} \quad (3.46)$$

Dans Ref.[46] l'amplitude de diffusion  $f(\Omega)$  est donnée en approximation de Born par

$$f(\Omega) = - \left( \frac{k}{i} \right)^{(N-3)/2} \int_0^\infty j_0(kr) U(r) r^{N-1} dr \quad (3.47)$$

où

$$K = 2k \sin(\theta/2)$$

Pour  $N = 3$  on trouve la formule bien connue de l'approximation de Born

$$f(\theta) = - \int_0^\infty \frac{\sin(Kr)}{Kr} U(r) r^2 dr \quad (3.48)$$

## 3.4 Recherche de la FG pour une particule dans une sphère

### 3.4.1 Application au cas d'un puits de potentiel infini

Nous nous proposons d'examiner le cas d'une particule enfermée dans une sphère de rayon  $a$ . Le potentiel est considéré comme nul dans la sphère, et infini à l'extérieur.

$$V(r, \theta) = \begin{cases} 0; r < a \\ \infty; r > a \end{cases}$$

Dans ce cas la fonction de Green est définie comme une solution de l'équation

$$\frac{d}{dr}(r^{N-1} \frac{d}{dr} G_N^l(r, r')) + r^{N-1} \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) G_N^l(r, r') = \delta(r - r')$$

avec la condition

$$G(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{r=a} = 0 \quad (3.49)$$

Depuis (3.35), la solution de cette équation (pour  $0 < r' < a$ ) est directement de la forme :

$$G_N^l(r, r') = \begin{cases} \alpha(r') j_{l,N}(kr), & 0 \leq r < r' \\ \beta(r') j_{l,N}(kr) + \gamma(r') \eta_{l,N}(kr), & r' < r \leq a \end{cases} \quad (3.50)$$

Seule  $j_{l,N}$  apparaît dans la première forme car la solution doit être finie en  $r = 0$ .

Pour déterminer les fonctions  $\alpha$ ,  $\beta$ , et  $\gamma$ , on procède comme suit :

la condition aux limites en  $r = a$ ,  $G_N^l(r, r') = 0$ , implique

$$\beta(r') j_{l,N}(ka) + \gamma(r') \eta_{l,N}(ka) = 0 \quad (3.51)$$

ou bien

$$\frac{\beta(r')}{\gamma(r')} = - \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (3.52)$$

Ainsi, nous pouvons écrire dans la région  $r' < r \leq a$ ,

$$G_N^l(r, r') = A(r') [j_{l,N}(kr) \eta_{l,N}(ka) - \eta_{l,N}(kr) j_{l,N}(ka)] \quad (3.53)$$

La condition suivante que nous imposons est celle de la continuité de  $G_N^l(r, r')$  en  $r = r'$

$$\alpha(r') j_{l,N}(kr') = A(r') [j_{l,N}(kr') \eta_{l,N}(ka) - \eta_{l,N}(kr') j_{l,N}(ka)] \quad (3.54)$$

Par contre, la dérivée de  $G_N^l(r, r')$  est discontinue en  $r = r'$

$$\frac{dG_N^l(r, r')}{dr} \Big|_{r=r'} = \frac{1}{r'^{N-1}} \quad (3.55)$$

ce qui implique

$$k\alpha(r')j'_{l,N}(kr') - kA(r') \left[ j'_{l,N}(kr')\eta_{l,N}(ka) - \eta'_{l,N}(kr')j_{l,N}(ka) \right] = -\frac{1}{r'^{N-1}} \quad (3.56)$$

Maintenant, multiplions Eq. (3.54) par  $k j'_{l,N}(kr')$  et Eq. (3.56) par  $j_{l,N}(kr')$ , et soustrayons :

$$\frac{j_{l,N}(kr')}{r'^{N-1}} = -kA(r')j_{l,N}(ka) \left[ j_{l,N}(kr')\eta'_{l,N}(kr') - \eta_{l,N}(kr')j'_{l,N}(kr') \right] \quad (3.57)$$

Le Wronskian de  $j_{l,N}$ ,  $\eta_{l,N}$  a la forme

$$W(j_{l,N}(kr'), \eta_{l,N}(kr')) = j_{l,N}(kr')\eta'_{l,N}(kr') - \eta_{l,N}(kr')j'_{l,N}(kr') = \frac{2}{\pi} (kr')^{1-N} \quad (3.58)$$

Ainsi, puisque la partie droite de l'équation (3.57) est proportionnelle au Wronskien, on trouve la fonction A :

$$A(r') = -\frac{\pi}{2} k^{N-2} \frac{j_{l,N}(kr')}{j_{l,N}(ka)} \quad (3.59)$$

Depuis l'équation (3.54), on trouve la fonction  $\alpha$  :

$$\alpha(r') = -\frac{\pi}{2} \frac{k^{N-2}}{j_{l,N}(ka)} [j_{l,N}(kr')\eta_{l,N}(ka) - \eta_{l,N}(kr')j_{l,N}(ka)] \quad (3.60)$$

La fonction de Green est donc explicitement donnée par

$$G_N^l(r, r') = -\frac{\pi}{2} k^{N-2} \begin{cases} \frac{j_{l,N}(kr)}{j_{l,N}(ka)} [j_{l,N}(kr')\eta_{l,N}(ka) - \eta_{l,N}(kr')j_{l,N}(ka)], & 0 \leq r < r' \\ \frac{j_{l,N}(kr')}{j_{l,N}(ka)} [j_{l,N}(kr)\eta_{l,N}(ka) - \eta_{l,N}(kr)j_{l,N}(ka)], & r' < r \leq a \end{cases} \quad (3.61)$$

ou bien

$$G_N^l(r, r') = -\frac{\pi}{2} k^{N-2} j_{l,N}(kr_{<})j_{l,N}(kr_{>}) \left[ \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} - \frac{\eta_{l,N}(kr_{>})}{j_{l,N}(kr_{>})} \right] \quad (3.62)$$

avec

$$r_{>} = \max(r, r'); r_{<} = \min(r, r')$$

### 3.4.2 Application aux cas des barrières de potentiel

Nous considérons le potentiel  $V(r, \theta = \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1})$  de la forme

$$V(r, \theta) = \begin{cases} V_1 & \text{if } 0 < r < a \\ V_2 & \text{if } r > a \end{cases} \quad (3.63)$$

En insérant (3.63) dans (3.31), nous trouvons pour  $(0 < r < a)$  et  $(r > a)$  respectivement

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1) \right] G(r, r') = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r - r'), \\ \left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2) \right] G(r, r') = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r - r'), \end{array} \right. \quad (3.64)$$

**Application pour le cas**  $V_1 = V_0 > 0; V_2 = 0, E > V_0$

**A l'extérieur de sphère**  $r; r' > a$  Notons par  $G^{l,2,2}$  la fonction de Green en dehors de la sphère. Dans ce cas la deuxième équation de (3.64) est

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right] G^{l,2,2}(r, r') = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r - r') \quad (3.65)$$

ou bien

$$\frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} G^{l,2,2}(r, r') \right) + \left[ \left( \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) r^{N-1} \right] G^{l,2,2}(r, r') = \delta(r - r') \quad (3.66)$$

Cette fois-ci nous avons le même cas de puits de potentiel infini, mais avec des conditions aux limites différentes; maintenant nous effectuons le calcul en employant la continuité de la solution et de sa première dérivée sur la frontière.

Nous pouvons écrire l'équation (3.66) pour  $r \neq r'$  sous la forme suivante

$$\frac{d^2 G^{l,2,2}(r, r')}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{dG^{l,2,2}(r, r')}{dr} + \left( \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) G^{l,2,2}(r, r') = 0 \quad (3.67)$$

Par conséquent, avec l'utilisation de l'équation (3.38), la solution de l'équation (3.67) peut être immédiatement écrite comme

$$G^{l,2,2}(r, r') = \begin{cases} C(r') [\eta_{l,N}(kr) - \beta j_{l,N}(kr)], & a \prec r \prec r' \\ D(r') j_{l,N}(kr), & r' \prec r \prec \infty \end{cases} \quad (3.68)$$

Dans cette expression de la fonction de Green, nous voyons le combinaison de deux ondes, une sortante de la sphère  $\eta_{l,N}(kr)$  et une autre venant de l'infini  $j_{l,N}(kr)$ .

Les constantes  $C, D$  et  $\beta$  doivent être déterminées en employant les conditions de frontière.

La première condition exige que  $G^{l,2,2}(r, r')$ , comme fonction de  $r$  ( $r'$  est fixé), doit être continu à  $r = r'$

$$G^{l,2,2}(r'_+, r') - G^{l,2,2}(r'_-, r') = 0 \quad (3.69)$$

On trouve

$$-C(r') \eta_{l,N}(kr') + [D(r') + \beta C(r')] j_{l,N}(kr') = 0 \quad (3.70)$$

La deuxième condition exige que la première dérivée à  $r = r'$  doit posséder un saut, c'est-à-dire

$$\frac{d}{dr} G^{l,2,2}(r'_+, r') - \frac{d}{dr} G^{l,2,2}(r'_-, r') = \frac{1}{r'^{2N-1}} \quad (3.71)$$

D'une manière équivalente

$$-C(r') \dot{\eta}_{l,N}(kr') + \left( D(r') + \beta C(r') \right) \dot{j}_{l,N}(kr') = \frac{1}{kr'^{2N-1}} \quad (3.72)$$

où  $\dot{j}_{l,N}(x)$ ,  $\dot{\eta}_{l,N}(x)$  sont les premières dérivées de  $j_{l,N}(x)$ ,  $\eta_{l,N}(x)$ .

En combinant les équations (3.70) et (3.72), nous obtenons

$$C(r') \dot{\eta}_{l,N}(kr') - \left( D(r') + \beta C(r') \right) \dot{j}_{l,N}(kr') = -\frac{1}{kr'^{2N-1}} \quad (3.73)$$

En employant le Wronskian des fonctions de Bessel multisphériques  $j_{l,N}$ ,  $\eta_{l,N}$

$$W(j_{l,N}(kr), \eta_{l,N}(kr)) = j_{l,N}(kr) \dot{\eta}_{l,N}(kr) - \eta_{l,N}(kr) \dot{j}_{l,N}(kr) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} \frac{1}{(kr)^{N-1}} \quad (3.74)$$

nous vérifions les coefficients  $C$  et  $D$  sont donnés par

$$C(r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(kr') \quad (3.75)$$

et

$$D(r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(kr') - \beta j_{l,N}(kr')] \quad (3.76)$$

Comme nous avons mentionné ci-dessus, le coefficient  $D(r')$  est une somme de deux ondes, une sortante de la sphère et l'autre venant de l'infini.

Donc la fonction de Green, en dehors de la sphère, est donnée par

$$G^{d,2,2}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \begin{cases} [\eta_{l,N}(kr) - \beta j_{l,N}(kr)] j_{l,N}(kr'), & a < r < r' \\ [\eta_{l,N}(kr') - \beta j_{l,N}(kr')] j_{l,N}(kr), & r' < r < \infty \end{cases} \quad (3.77)$$

Nous avons déterminé les coefficients  $C$  et  $D$ . Le coefficient restant  $\beta$  sera calculé dans la prochaine sous-sous-section.

**A l'intérieur de la sphère :** A l'intérieur de la sphère  $0 < (r; r') < a$ , nous devons employer la première équation de (3.64)

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right] G(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{r^{N-1}} \quad (3.78)$$

qui a deux solutions indépendantes  $\eta_{l,N}(\mu r)$  et  $j_{l,N}(\mu r)$ .

La fonction de Green peut être écrite comme :



$$G^{l:1,1}(r, r') = \begin{cases} A(r') j_{l,N}(\mu r), & 0 < r < r' < a \\ B(r') [\eta_{l,N}(\mu r) - \alpha j_{l,N}(\mu r)], & r' < r < a \end{cases} \quad (3.79)$$

où  $\mu^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$ , et  $A, B, \alpha$  sont des constantes qui seront calculées à l'étape suivante.

En utilisant la continuité de la fonction de Green en  $r = r'$

$$G^{l:1,1}(r'_+, r') - G^{l:1,1}(r'_-, r') = 0 \quad (3.80)$$

c'est-à-dire

$$B(r') \eta_{l,N}(\mu r') - [A(r') + \alpha B(r')] j_{l,N}(\mu r') = 0 \quad (3.81)$$

et la discontinuité de la dérivée de la fonction de Green à  $r = r'$

$$\frac{d}{dr} G^{l:1,1}(r'_+, r') - \frac{d}{dr} G^{l:1,1}(r'_-, r') = \frac{1}{r'^{N-1}} \quad (3.82)$$

c'est-à-dire

$$B(r') \eta'_{l,N}(\mu r') - (A(r') + \alpha B(r')) j'_{l,N}(\mu r') = \frac{1}{\mu r'^{N-1}} \quad (3.83)$$

Depuis les équations (3.74), (3.81) et (3.83), nous obtenons les constantes  $A(r')$  et  $B(r')$  comme suit

$$A(r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} [\eta_{l,N}(\mu r') - \alpha j_{l,N}(\mu r')] \quad (3.84)$$

et

$$B(r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} j_{l,N}(\mu r') \quad (3.85)$$

Après leur remplacement dans (3.79), on trouve la fonction de Green dans la sphère

$$G^{l:1,1}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} \begin{cases} [\eta_{l,N}(\mu r') - \alpha j_{l,N}(\mu r')] j_{l,N}(\mu r), & 0 \leq r < r' \leq a \\ [\eta_{l,N}(\mu r) - \alpha j_{l,N}(\mu r)] j_{l,N}(\mu r'), & r' < r \leq a \end{cases} \quad (3.86)$$

Pour trouver les coefficients  $\alpha$  et  $\beta$ , nous utilisons la continuité de la fonction de Green et la continuité de sa dérivée première à  $r = r' = a$

$$G^{l:1,1}(a_-, a) = G^{l:2,2}(a_+, a) \quad (3.87)$$

ou alors

$$\mu^{N-2} [\eta_{l,N}(\mu a) - \alpha j_{l,N}(\mu a)] j_{l,N}(\mu a) = -k^{N-2} [\eta_{l,N}(ka) - \beta j_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka) \quad (3.88)$$

et

$$\frac{d}{dr} G^{l:1,1}(r, a) \Big|_{r=a_-} = \frac{d}{dr} G^{l:2,2}(r, a) \Big|_{r=a_+} \quad (3.89)$$

c'est-à-dire

$$\mu^{N-1} [\eta'_{l,N}(\mu a) - \alpha j'_{l,N}(\mu a)] j_{l,N}(\mu a) = -k^{N-1} [\eta'_{l,N}(ka) - \beta j'_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka) \quad (3.90)$$

Après quelques simplifications, nous obtenons le coefficient  $\alpha$

$$\alpha = \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} \quad (3.91)$$

où nous avons défini

$$V(k, \mu) = k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu a) - \mu j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu a) \quad (3.92)$$

De la même manière, nous trouvons le coefficient  $\beta$

$$\beta = \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} \quad (3.93)$$

où nous avons défini

$$U(k, \mu) = k\eta'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu a) - \mu \eta_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu a) \quad (3.94)$$

En résumé, la fonction de Green à l'intérieur de la sphère est donnée par l'expression suivante pour  $0 \leq r < r' \leq a$

$$G^{l:1,1}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} \times \quad (3.95)$$

$$\left[ \eta_{l,N}(\mu r') - \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} j_{l,N}(\mu r') \right] j_{l,N}(\mu r)$$

Et en changeant  $r$  avec  $r'$ , nous obtenons l'expression suivante pour la fonction de Green à l'intérieur de la sphère pour  $r' < r \leq a$

$$G^{l:1,1}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} \times \quad (3.96)$$

$$\left[ \eta_{l,N}(\mu r) - \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} j_{l,N}(\mu r) \right] j_{l,N}(\mu r')$$

Et en dehors de la sphère pour  $a < r < r'$

$$G^{l:2,2}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \times \quad (3.97)$$

$$\left[ \eta_{l,N}(kr) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} j_{l,N}(kr) \right] j_{l,N}(kr')$$

Et pour  $a < r' < r < \infty$

$$G^{l:2,2}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \times \quad (3.98)$$

$$\left[ \eta_{l,N}(kr') - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} j_{l,N}(kr') \right] j_{l,N}(kr)$$

**Le cas  $0 < r' < a < r < \infty$  ( $r'$  à l'intérieur et  $r$  à l'extérieur de la sphère)** Dans ce cas, la fonction de Green s'écrit comme

$$G^{2,1}(l : r, r') = \mu^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu r') [\eta_{l,N}(kr) - \lambda j_{l,N}(kr)] \quad (3.99)$$

où  $\lambda$  est une constante à déterminer en utilisant la continuité de la fonction de Green en  $r = r' = a$

$$G^{2,1}(l : r, a)|_{r=a} = G^{2,2}(l : r, a)|_{r=a} \quad (3.100)$$

Alors

$$\begin{aligned} & \mu^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu a) [\eta_{l,N}(ka) - \lambda j_{l,N}(ka)] \\ &= -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \left[ \eta_{l,N}(ka) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} j_{l,N}(ka) \right] j_{l,N}(ka) \end{aligned}$$

Ce qui conduit à obtenir la constante  $\lambda$

$$\lambda = \frac{-2\mu (\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (3.101)$$

On obtient ainsi la fonction de Green (mixte)

$$G^{2,1}(l : r, r') = \mu^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \times \quad (3.102)$$

$$\left[ \eta_{l,N}(kr) - \left( \frac{-2\mu (\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \right) j_{l,N}(kr) \right] j_{l,N}(\mu r')$$

**Le cas  $0 < r < a < r' < \infty$  ( $r$  intérieur et  $r'$  extérieur de la sphère) :** De même que ci-dessus, la fonction de Green s'écrit comme

$$G^{1,2}(l : r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu r) [\eta_{l,N}(kr') - \theta j_{l,N}(kr')] \quad (3.103)$$

où  $\theta$  est une constante à déterminer en utilisant la continuité de la fonction de Green en  $r = r' = a$  :

$$G^{1,2}(l : r, a)|_{r=a} = G^{1,1}(l : r, a)|_{r=a} \quad (3.104)$$

Alors

$$\begin{aligned} & -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu a) [\eta_{l,N}(ka) - \theta j_{l,N}(ka)] \quad (3.105) \\ & = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} \left[ \eta_{l,N}(\mu a) - \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} j_{l,N}(\mu a) \right] j_{l,N}(\mu a) \end{aligned}$$

Cela conduit à la constante

$$\theta = \frac{2k (ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (3.106)$$

Alors, la fonction de Green mixte ( $r < a < r'$ ) devient

$$\begin{aligned} G^{1,2}(l : r, r') & = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu r) \times \quad (3.107) \\ & \left[ \eta_{l,N}(kr') - \left( \frac{2k (ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \right) j_{l,N}(kr') \right] \end{aligned}$$

**Application au cas  $V_1 = V_0 > 0, V_2 = 0, 0 < E < V_0$**

Dans ce cas  $\mu$  devient un nombre purement imaginaire

$$\mu' = i\mu$$

et l'effet tunnel de la mécanique quantique peut être vérifié.

$$\mu' = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = i\mu \quad (3.108)$$

**A l'intérieur de la sphère**  $[0 \leq (r', r) \leq a]$  La seconde équation de (3.64) devient

$$\frac{d^2}{dr^2}g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr}g_{l,N}(r) + \left(-\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) - \frac{l(l+N-2)}{r^2}\right)g_{l,N}(r) = 0$$

$$\frac{d^2}{dr^2}g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr}g_{l,N}(r) + \left((i\mu)^2 - \frac{l(l+N-2)}{r^2}\right)g_{l,N}(r) = 0 \quad (3.109)$$

qui est l'équation de Bessel modifiée multi-sphérique d'ordre  $l$  qui admet deux solutions indépendantes  $i_{l,N}(\mu r)$  et  $k_{l,N}(\mu r)$  qui sont :

$$i_{l,N}(\mu r) \equiv j_{l,N}(i\mu r) \quad (3.110)$$

$$k_{l,N}(\mu r) \equiv \eta_{l,N}(i\mu r) \quad (3.111)$$

Ensuite, de la même manière, nous trouvons la fonction de Green correspondante

$$G^{l,3,3}(r, r') = \begin{cases} A(r')i_{l,N}(\mu r); 0 \leq r \prec r' \leq a \\ B(r') [k_{l,N}(\mu r) - \gamma i_{l,N}(\mu r)]; 0 \leq r' \prec r \leq a \end{cases} \quad (3.112)$$

où  $\gamma$  est une constante qui sera calculée plus tard.

D'après la continuité de la fonction de Green au point  $r = r'$ ,

$$G^{l,3,3}(r'_+, r') - G^{l,3,3}(r'_-, r') = 0 \quad (3.113)$$

ou de manière équivalente

$$B(r')k_{l,N}(\mu r') - [A(r') + B(r')\gamma]i_{l,N}(\mu r') = 0 \quad (3.114)$$

La discontinuité de la dérivée première par rapport à  $r$  de  $G^{l,3,3}$  au point  $r = r'$  donne

$$\frac{d}{dr}G^{l,3,3}(r'_+, r') - \frac{d}{dr}G^{l,3,3}(r'_-, r') = \frac{1}{r'^{N-1}} \quad (3.115)$$

$$B(r')k'_{l,N}(\mu r') - [A(r') + B(r')\gamma] i'_{l,N}(\mu r') = \frac{1}{\mu r'^{N-1}} \quad (3.116)$$

Le Wronskien de la fonction de Bessel modifiée multi-sphérique  $i_{l,N}$  et  $k_{l,N}$  prend la forme suivante :

$$W(i_{l,N}(\mu r'), k_{l,N}(\mu r')) = i_{l,N}(\mu r')k'_{l,N}(\mu r') - k_{l,N}(\mu r')i'_{l,N}(\mu r') = -\frac{1}{(\mu r')^{N-1}} \quad (3.117)$$

Depuis (3.117), (3.116) et (3.114) les constantes  $A(r')$  et  $B(r')$  sont données par les expressions suivantes

$$B(r') = -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu r') \quad (3.118)$$

$$A(r') = -(\mu)^{N-2} [k_{l,N}(\mu r') - \gamma i_{l,N}(\mu r')] \quad (3.119)$$

Alors

$$G^{l,3,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} \begin{cases} [k_{l,N}(\mu r') - \gamma i_{l,N}(\mu r')] i_{l,N}(\mu r); 0 \leq r \prec r' \leq a \\ i_{l,N}(\mu r') [k_{l,N}(\mu r) - \gamma i_{l,N}(\mu r)]; 0 \leq r' \prec r \leq a \end{cases} \quad (3.120)$$

Ce qui est utile de mentionner ici est que le cas de la sphère "dure" peut être retrouvé quand on met dans la dernière formule la limite  $V_0 = \infty$ ; dans ce cas la limite donne zéro ( $G^{l,3,3}(r, r') = 0$ ).

La constante  $\gamma$  sera calculée dans la sous-section suivante.

**En dehors de la sphère** [ $a \leq (r', r) \leq \infty$ ] La fonction de Green est la même que (3.77) mais avec une nouvelle constante  $\beta_1$  :

$$G^{l,4,4}(r, r') \equiv G^{l,2,2}(r, r') \quad (3.121)$$

$$G^{l,4,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \begin{cases} [\eta_{l,N}(kr) - \beta_1 j_{l,N}(kr)] j_{l,N}(kr'), & a \prec r \prec r' \\ [\eta_{l,N}(kr') - \beta_1 j_{l,N}(kr')] j_{l,N}(kr), & r' \prec r \prec \infty \end{cases}$$

Pour trouver les coefficients  $\gamma$  et  $\beta_1$  on utilise la continuité de la fonction de Green et la continuité de sa dérivée première en  $r = r' = a$  :

$$G^{l,3,3}(a_-, a) = G^{l,4,4}(a_+, a) \quad (3.122)$$

ou bien

$$\begin{aligned} & -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu a) [k_{l,N}(\mu a) - \gamma i_{l,N}(\mu a)] \\ & = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(ka) - \beta_1 j_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka) \end{aligned} \quad (3.123)$$

et

$$\frac{d}{dr} G^{l,3,3}(r, a) \Big|_{r=a_-} = \frac{d}{dr} G^{l,4,4}(r, a) \Big|_{r=a_+} \quad (3.124)$$

ou bien

$$\begin{aligned} & -(\mu)^{N-1} i_{l,N}(\mu a) [k'_{l,N}(\mu a) - \gamma i'_{l,N}(\mu a)] \\ & = -k^{N-1} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta'_{l,N}(ka) - \beta_1 j'_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka) \end{aligned} \quad (3.125)$$

Après quelques simplifications on obtient les coefficients  $\gamma$  et  $\beta_1$  comme les expressions suivantes

$$\gamma = \frac{2\mu (\mu a)^{1-N} j(ka) + k(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i(\mu a)\Omega(\mu, k)} \quad (3.126)$$



$$\beta_1 = \frac{k (ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i(\mu a) + j(ka)\Phi(\mu, k)}{j(ka)\Omega(\mu, k)} \quad (3.127)$$

où nous avons défini

$$\Omega(\mu, k) = k j'(ka) i(\mu a) - \mu j(ka) i'(\mu a) \quad (3.128)$$

et

$$\Phi(\mu, k) = k \eta'(ka) i(\mu a) - \mu \eta(ka) i'(\mu a) \quad (3.129)$$

Enfin, la fonction de Green à l'intérieur de la sphère (pour le cas  $0 < E < V_0$ ) est donnée respectivement (pour  $0 \leq r \leq r' \leq a$  et  $0 \leq r' \leq r \leq a$ ) par

$$G^{l,3,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} \times \quad (3.130)$$

$$\begin{cases} \left[ k_{l,N}(\mu r') - \frac{2\mu(\mu a)^{1-N} j(ka) + k(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i(\mu a)\Omega(\mu, k)} i_{l,N}(\mu r') \right] i_{l,N}(\mu r) \\ i_{l,N}(\mu r') \left[ k_{l,N}(\mu r) - \frac{2\mu(\mu a)^{1-N} j(ka) + k(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i(\mu a)\Omega(\mu, k)} i_{l,N}(\mu r) \right] \end{cases} \quad (3.131)$$

et en dehors de la sphère, la fonction de Green (pour  $a < r < r'$  et  $r' < r < \infty$ ) est respectivement

$$G^{l,4,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \times \quad (3.132)$$

$$\begin{cases} \left[ \eta_{l,N}(kr) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i(\mu a) + j(ka)\Phi(\mu, k)}{j(ka)\Omega(\mu, k)} j_{l,N}(kr) \right] j_{l,N}(kr') \\ \left[ \eta_{l,N}(kr') - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i(\mu a) + j(ka)\Phi(\mu, k)}{j(ka)\Omega(\mu, k)} j_{l,N}(kr') \right] j_{l,N}(kr) \end{cases}$$

**$r'$  à l'intérieur et  $r$  à l'extérieur de la sphère** ( $0 < r' \leq a \leq r \leq \infty$ ) : Dans ce cas, la fonction mixte de Green est donnée par

$$G^{l,4,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu r') [\eta_{l,N}(kr) - \lambda_1 j_{l,N}(kr)] \quad (3.133)$$

où  $\lambda_1$  est une constante à déterminer en utilisant la continuité de la fonction de Green en  $r = r' = a$ ;

$$\begin{aligned}
G^{l,4,3}(r, a)|_{r=a} &= G^{l,4,4}(r, a)|_{r=a} \\
&- (\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu a) [\eta_{l,N}(ka) - \lambda_1 j_{l,N}(ka)] \\
&= -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \left[ \eta_{l,N}(ka) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i(\mu a) + j(ka)\Phi(\mu, k)}{j(ka)\Omega(\mu, k)} j_{l,N}(ka) \right] j_{l,N}(ka)
\end{aligned} \tag{3.134}$$

ou, après quelques simplifications, la constante  $\lambda_1$  devient

$$\lambda_1 = \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + 2 \frac{\mu(\mu a)^{1-N}}{\Omega(\mu, k)} \tag{3.135}$$

On obtient alors la fonction de Green mixte pour le cas  $r' < a < r$

$$G^{l,4,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu r') \left[ \eta_{l,N}(kr) - \left( \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + 2 \frac{\mu(\mu a)^{1-N}}{\Omega(\mu, k)} \right) j_{l,N}(kr) \right] \tag{3.136}$$

**$r$  à l'intérieur et  $r'$  à l'extérieur de la sphère ( $0 \leq r \leq a \leq r' \leq \infty$ ) :** Dans ce cas, la fonction de Green est

$$G^{l,3,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(kr') - \theta_1 j_{l,N}(kr')] i_{l,N}(\mu r) \tag{3.137}$$

où  $\theta_1$  est une constante à déterminer en utilisant la continuité de la fonction de Green en  $r = r' = a$ ,

$$G^{l,3,4}(r, a)|_{r=a} = G^{l,3,3}(r, a)|_{r=a}$$

$$\begin{aligned}
& -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(ka) - \theta_1 j_{l,N}(ka)] i_{l,N}(\mu a) \\
& = -(\mu)^{N-2} \left[ k_{l,N}(\mu a) - \frac{2\mu(\mu a)^{1-N} j(ka) + k(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i(\mu a)\Omega(\mu, k)} i_{l,N}(\mu a) \right] i_{l,N}(\mu a)
\end{aligned} \tag{3.138}$$

ou, après quelques simplifications, la constante  $\theta_1$  devient

$$\theta_1 = \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{\Omega(\mu, k)} \tag{3.139}$$

Alors la fonction de Green mixte devient pour le cas  $r < a < r'$

$$\begin{aligned}
G^{l,3,4}(r, r') & = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \times \\
& \left[ \eta_{l,N}(kr') - \left( \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{\Omega(\mu, k)} \right) j_{l,N}(kr') \right] i_{l,N}(\mu r)
\end{aligned} \tag{3.140}$$

### 3.4.3 Application au cas des puits de potentiel fini

Ce problème est une question importante qui concerne les états liés ( $0 > E > -V_0$ ) en mécanique quantique.

Dans de nombreuses situations, le potentiel peut être utilisé sous la forme suivante

$$V(r, \theta_1, \dots, \theta_{N-1}) = \begin{cases} -V_0; 0 \leq r \leq a, \\ 0; r \geq a. \end{cases} \tag{3.141}$$

En utilisant la même méthode que ci-dessus, nous obtenons les fonctions de Green dans différentes régions comme suit

**A l'intérieur de la sphère ( $0 \leq (r, r') \leq a$ ) :**

Nous avons l'équation différentielle suivante

$$\frac{d^2}{dr^2}g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr}g_{l,N}(r) + \left[ \left( \frac{2m}{\hbar^2}E + V_0 \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right] g_{l,N}(r) = 0 \quad (3.142)$$

En utilisant la définition

$$\mu_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E + V_0$$

on trouve la fonction de Green comme

$$G^{l,5,5}(r, r') = \left( \frac{\pi}{2} \right)^{3-N} \mu_1^{N-2} \begin{cases} [\eta_{l,N}(\mu_1 r') - \alpha_5 j_{l,N}(\mu_1 r')] j_{l,N}(\mu_1 r), & 0 \leq r < r' \leq a \\ j_{l,N}(\mu_1 r') [\eta_{l,N}(\mu_1 r) - \alpha_5 j_{l,N}(\mu_1 r)], & r' < r \leq a \end{cases}$$

où  $\alpha_5$  sera donné plus tard.

### A l'extérieur de la sphère ( $a \leq (r; r') < \infty$ )

En dehors de la sphère, l'équation différentielle devient

$$\frac{d^2}{dr^2}g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr}g_{l,N}(r) + \left[ \left( \left( \frac{2m}{\hbar^2}E \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) \right] g_{l,N}(r) = 0 \quad (3.143)$$

donc la fonction de Green est donnée par

$$G^{l,6,6}(r, r') = - \left( \frac{\pi}{2} \right)^{3-N} k^{N-2} \begin{cases} [\eta_{l,N}(kr) - \beta_6 j_{l,N}(kr)] j_{l,N}(kr'), & a \leq r \leq r' \\ j_{l,N}(kr) [\eta_{l,N}(kr') - \beta_6 j_{l,N}(kr')], & r' \leq r \leq \infty \end{cases} \quad (3.144)$$

Après avoir appliqué les conditions aux limites du bord de la sphère comme ci-dessus, les coefficients  $\alpha_5$  et  $\beta_6$  sont donnés respectivement par

$$\alpha_5 = \frac{\alpha_5(N)}{\alpha_5(D)} \quad (3.145)$$

$$\beta_6 = \frac{\beta_6(N)}{\beta_6(D)} \quad (3.146)$$

où

$$\begin{aligned} \alpha_5(N) = & -2\mu_1(\mu_1 a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu_1 a) \times \\ & [k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)] \end{aligned} \quad (3.147)$$

$$\alpha_5(D) = j_{l,N}(\mu_1 a) [k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)] \quad (3.148)$$

Le spectre discret peut être calculée numériquement en résolvant l'équation transcendante  $\alpha_5(D) = 0$ .

Le cas du puits infini peut être retrouvé en faisant  $V_0 = \infty$ .

Les coefficients  $\beta_6(N)$ ,  $\beta_6(D)$  sont définis par

$$\begin{aligned} \beta_6(N) = & k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu_1 a) + j_{l,N}(ka) \times \\ & [k \eta'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 \eta_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)] \end{aligned} \quad (3.149)$$

$$\beta_6(D) = j_{l,N}(ka) [k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)] \quad (3.150)$$

**$r'$  à l'intérieur et  $r$  à l'extérieur de la sphère ( $0 < r' \leq a \leq r < \infty$ )**

Dans ce cas, la fonction mixte de Green est

$$G^{l,6,5}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu_1^{N-2} j_{l,N}(\mu_1 r') [\eta_{l,N}(kr) - \lambda_6 j_{l,N}(kr)] \quad (3.151)$$

où  $\lambda_6$  est

$$\lambda_6 = \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{[k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)]} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (3.152)$$

$r$  à l'intérieur et  $r'$  à l'extérieur de la sphère ( $0 < r \leq a \leq r' < \infty$ )

Dans ce cas la fonction mixte de Green est

$$G^{l,5,6}(r, r') = - \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} k^{N-2} [\eta_{l,N}(kr') - \theta_6 j_{l,N}(kr')] j_{l,N}(\mu_1 r) \quad (3.153)$$

où  $\theta_6$  est donné par

$$\theta_6 = \frac{2k (ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{[k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)]} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)}$$

# Conclusion

Dans ce travail nous avons présenté un traitement précis par la méthode de la fonction de Green de certains problèmes de la mécanique quantique non relativiste en espace à dimension élevée.

Dans le premier chapitre nous avons placé le travail dans le contexte des équations de physique mathématique. Nous avons passé par un certain nombre de concepts liés à ce sujet comme : la théorie générale des équations différentielles ordinaires, les équations aux dérivées partielles, les conditions aux limites, etc. Ensuite, nous avons exploré le concept de la fonction de Green et présenté les différentes méthodes pour obtenir des fonctions de Green pour les équations différentielles du deuxième ordre, puis nous nous sommes intéressés à la fonction de Green en physique classique. Pour cela nous avons illustré deux exemples : un pour le cas statique et l'autre pour le cas dynamique.

Dans le deuxième chapitre nous avons abordé le sujet de la fonction de Green en mécanique quantique où nous avons trouvé nécessaire de passer par quelques notions de base de la mécanique quantique. Ensuite nous avons donné une description explicite du concept propagateur et fonctions de Green pour l'équation de Schrodinger, la relation avec l'opérateur d'évolution, etc. Nous avons ainsi fait connaissance avec certains objets mathématiques, d'une utilisation très courante en physique, (notamment en physique théorique moderne) et qui se révèlent très importants pour l'étude d'un grand nombre de problèmes.

Dans le troisième chapitre, nous avons calculé la fonction de Green relative à l'équation de Schrodinger indépendante du temps dans la coordonnée sphérique de dimension  $N$ . La partie potentielle dans le hamiltonien est un opérateur continu par morceaux obéissant à une symétrie sphérique. Nous avons utilisé avec succès la technique pour résoudre l'équation différentielle (l'équation de Bessel). Nous avons, à l'aide de cette technique (technique

de la fonction de Green) récupéré la fonction de Green pour deux problèmes : le premier est lié à un potentiel égal à une constante positive  $V_0$  à l'intérieur de la sphère de rayon "a" et un opérateur nul en dehors de cette sphère. Le second est lié à un potentiel égal à une constante négative ( $0 > V_0$ ) sur la sphère de rayon "a" et égal à zéro en dehors de cette sphère. Pour chaque problème, nous avons calculé explicitement la fonction de Green dans différentes régions de l'espace et pour les cas  $E > V_0$ ;  $E < V_0$ . Nous avons respecté les conditions aux limites des problèmes. Les spectres discrets de l'opérateur hamiltonien ont été également dérivés dans le cas de potentiels de puits finis et infinis.

Comme perspective, on peut étendre cette méthode à l'étude d'autres problèmes de potentiel (multi saut, potentiel inverse du carré, autre forme, etc.) et appliquer le résultat obtenu pour le calcul des sections efficaces utiles dans les problèmes de physique nucléaire et atomique et moléculaire. Plus important, comme perspective est d'étudier le cas où le problème étudié n'est pas le siège d'une symétrie sphérique auquel cas la fonction de Green dépendrait des angles finaux et initiaux. Ce cas peut être très intéressant en physique moléculaire.



# Bibliographie

- [1] D. M. Cannell, George Green : An Enigmatic Mathematician. The American Mathematical Monthly, Vol.106, 1999.
- [2] Mariana M Odashima, Beatriz G Prado, E Vernek, Pedagogical introduction to equilibrium Green's functions : condensed-matter examples with numerical implementations, Revista Brasileira de Ensino de Fisica, vol. 39, 2017
- [3] Mehdi Delkhosh, Mohammad Delkhosh, Mohsen Jamali, Green's Function and its Applications, Journal of Basic and Applied Scientific Research, 2012.
- [4] L. Challis and F. Sheard, The Green of Green's Functions, Physics Today, vol. 56, 2003.
- [5] Dean G. Duffy, Green's Functions with Applications, CRC Press, 2001.
- [6] Gary F. Roach, Green's Functions, Cambridge University Press, 1982.
- [7] G. Barton, Elements of Green's Functions and Propagation : Potentials, Diffusion, and Waves, (Oxford : Clarendon), 1989 .
- [8] E.N. Economou, Green's Functions in Quantum Physics, Springer, Berlin, 2006.
- [9] Jeff Schueler, Green's Functions and Their Applications to Quantum Mechanics, <https://sites.math.washington.edu/>, June 2, 2011.
- [10] B. Benali, Recherche de l'opérateur de Green pour quelques problèmes de physique mathématiques par la méthode des perturbations, Thèse de doctorat, univ Biskra, 2014.
- [11] Andy Royston, Notes on the Dirac Delta and Green Functions, 2008.

- [12] Ricardo Oliver Hein Hoernig, Green's functions and integral equations for the Laplace and Helmholtz operators in impedance half-spaces, [math]. Ecole Polytechnique X, France, <pastel-00006172>, 2010.
- [13] Angel Alastuey, Marc Magro, Pierre Pujol, Physique et outils mathématiques : méthodes et exemples, EDP Sciences / CNRS éditions, 2008.
- [14] Shi-Hai Dong, Wave Equations in Higher Dimensions, New York : Springer, 2011.
- [15] Sergio Giardino, Angular invariant quantum mechanics in arbitrary dimension, Revista Brasileira de Ensino de Fisica, 2013.
- [16] M. F. Andrade, Exact Green's function for rectangular potentials and its application to quasi-bound states, Physics Letters A, 378 (2014), no. 21,1461-1468. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2014.03.042>
- [17] M.A.M. de Aguiar, Exact Greens function for the step and square-barrier potentials, Phys. Rev. A. 48 (1993), 2567-2573. <https://doi.org/10.1103/physreva.48.2567>
- [18] Y. A. Melnikov, Green's function of a thin circular plate with elastically supported edge, Eng. Anal. Bound. Elem., 25 (2001), 669-676. [https://doi.org/10.1016/s0955-7997\(01\)00067-4](https://doi.org/10.1016/s0955-7997(01)00067-4).
- [19] B. Benali, B. Boudjedaa and M. T. Meftah, Green Function on a Quantum Disk for the Helmholtz Problem, Acta Phys. Polon. A, 124 (2013), no. 1, 636-640. <https://doi.org/10.12693/aphyspola.124.636>
- [20] B. Benali and M. T. Meftah, Explicit quantum Green's function on a piecewise continuous symmetrical spherical potential, Rep. Math. Phys., 74 (2014), 73-87. [https://doi.org/10.1016/s0034-4877\(14\)60058-6](https://doi.org/10.1016/s0034-4877(14)60058-6)
- [21] S. Kukla, Helmholtz eigenvalue problem in elliptical shaped domains, Sci. Res. Inst. Math. Computer Sci., 9 (2010), no. 1, 77-82.
- [22] S. Kukla, Method of fundamental solutions for Helmholtz eigenvalue problems in elliptical domains, Sci. Res. Inst. Math. Computer Sci., 11 (2009), no. 1, 85-90.
- [23] S. K. Adhikari, Quantum scattering in two dimensions, Am. J. Phys., 54 (1986), 362-367. <https://doi.org/10.1119/1.14623>

- [24] I. M. Nemenman A. S. Silbergleit, Explicit Greens function of a boundary value problem for a sphere and trapped flux analysis in Gravity Probe B experiment, *J. Appl. Phys.*, 86 (1999), no. 1, 614-624. <https://doi.org/10.1063/1.370775>
- [25] R. Layeghnejad, M. Zare and R. Moazzemi, Dirac particle in a spherical scalar potential well, *Phys. Rev. D*, 84 (2011), 125026. <https://doi.org/10.1103/physrevd.84.125026>
- [26] Secloka Lazare Guedezounme, Antonin Danvide Kanfon and Dine Ousmane Samary, Spherically symmetric potential in noncommutative spacetime with a compactified extra dimensions, *The European Physical Journal C*, 76 (2016), no. 9. <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-016-4359-3>
- [27] R. Szmytkowski, Closed form of the generalized Greens function for the Helmholtz operator on the two-dimensional unit sphere, *J. Math. Phys.* 47 (2006), 063506. <https://doi.org/10.1063/1.2203430>
- [28] R. Szmytkowski, Closed forms of the Greens function and the generalized Greens function for the Helmholtz operator on the N-dimensional unit sphere, *J. Phys. A*, 40 (2006), 995-1009. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/40/5/009>
- [29] T. R. P. Carames and E. R. Bezerra de Mello, Spherically symmetric vacuum solutions of modified gravity theory in higher dimensions, *The European Physical Journal C*, 64 (2009), 113-121. <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-009-1115-y>
- [30] K. J. Oyewumi, Exact Analytical Solutions of the Schrodinger Equation for Some Molecular Potentials in N Dimensions, International Chair in Mathematical Physics and Applications ICMIPA-UNESCO Chair, University of Abomey-Calavi, Republic of Benin, 2007.
- [31] K. J. Oyewumi, F. O. Akinpelu, and A. D. Agboola, Exactly Complete Solutions of the Pseudoharmonic Potential in N-Dimensions, *International Journal of Theoretical Physics* April 2008, Volume 47, Issue 4, pp 1039–1057
- [32] Sami M. Al-Jaber, Hydrogen Atom in N Dimensions, *International Journal of Theoretical Physics* April 1998, Volume 37, Issue 4, pp 1289–1298

- [33] T.Das, A Laplace transform approach to find the exact solution of the N-dimensional Schrodinger equation with Mie-type potentials and construction of Ladder operator-  
sarXiv : 1406.6282v1[quant-ph], (2014).
- [34] Akpan N.Ikot, Oladunjoye A.Awoga, and Akaninyene D.Antia, Bound state solutions of D-dimensional Schrodinger equation with Eckart potential plus modified deformed Hylleraas potential, arXiv :1203.6779 [math-ph] 2012.
- [35] Huaiyu Wang, Mathematics for Physicists , Tsinghua University, China, [https ://doi.org/10.1142/10191](https://doi.org/10.1142/10191) | May 2017
- [36] Prem K. Kythe, Green's Functions and Linear Dierential Equations : Theory, Applications, and Computation, Chapman & Hall/CRC, 2011.
- [37] Selçuk S. Bayin, Mathematical Methods in Science and Engineering, John Wiley, 2006.
- [38] Xavier Bagnoud, Méthodes Mathématiques de la Physique, Université de Fribourg, 2010.
- [39] Frederick.W, Byron. Jr and R.W. Fuller Mathematics of Classical and Quantum Physics, Reprint of the Addison-Wesley Publishing Company, 1969.
- [40] J. A. DeSanto, Scalar Wave Theory Green's Functions and Applications, Verlag Berlin Heidelberg, 1992.
- [41] Philippe-André Martin, François Rothen, Problèmes à N-corps et champs quantiques, Presses polytechniques et universitaires romandes, 1990.
- [42] Patrick Driessen, Cours d'initiation à la physique quantique : La methode du propagateur de Feynman, [https ://www.saphybru.com/2002](https://www.saphybru.com/2002).
- [43] Michel Le Bellac, Physique quantique, 2e édition, CNRS éditions, 2007.
- [44] Sadri Hassani, Mathematical Physics A Modem Introduction to Its Foundations, Springer-Verlag New York Berlin : Heidelber, 2002.
- [45] J. Avery, Hyperspherical Harmonics : Applications in Quantum Theory, Kluwer Academic, Boston, MA, 1989.
- [46] M. Fabre de la Ripelle, Green Function and Scattering Amplitudes in Many-Dimensional Space, Few-Body Syst. 14, 1 (1993).

- [47] S.M.Blinder, Propagators from integral representations of Green's function for the N-dimensional free particle,harmonic oscillatorand Colomb problems, J.Math.Phys, Vol.25, No.4, 1984
- [48] Harald. J.W.Muller-Kirsten, Introduction to Quantum Mechanics Schrodinger Equation and Path Integral, World Scientific Pulishing, 2006
- [49] John C. Inkson, Many-Body Theory of Solids : An Introduction, Plenum press, New york, 1983.
- [50] Seth T. Rittenhouse, N. P. Mehta, and Chris H. Greene, Green's functions and the adiabatic hyperspherical method, Physical Review, A 82, 022706, 2010
- [51] V. L. Bakhrakh, S. I. Vetchinkin, and S. V. Khristenko, Green's function of a Multidimensional Isotropic Harmonic oscillator, Academy of Sciences of the USSR, from Teoreticheskaya Matematicheskaya Fizika, Vol. 12, No. 2, 1972.
- [52] Marcus A. M. de Aguiar, Exact Green's function for the step and squarebarrier potentials, Physical Review, A.48.2567, 1993
- [53] Sihong Shao, Wei Cai, Huazhong Tang, Accurate Calculation of the Green's function of Schrodinger Equation in a Block Layered Potential, Journal of Computational Physics, 2005
- [54] Yuri A. Melnikov, Max Y. Melnikov, Green's Functions Construction and Applications, Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, Berlin/Boston, 2012.
- [55] Michael D.Greenberg, Applications of Green's Functions in Science and Engineering, Dover edition, 2015.
- [56] Egon Marx, Causal Green Function in Relativistic Quantum Mechanics, International Journal of Theoretical Physics, Vol. 26, No. 8, 1987
- [57] Alexander I. Pegarkov, Matrix Technique for Nonperturbative Green Function of Time-Independent Schrodinger Equation, Acta Applicandae Mathematicae 84 : 163–191, 2004.
- [58] Frank Burgbacher, Claus Lammerzahl, Alfredo Macias, Is there a stable hydrogen atom in higher dimensions? Journal of Mathematical Physics Volume 40, N 2, February 1999.

- [59] Rossana Tazzioli, Green's Function in Some Contributions of 19th Century Mathematicians, *Historia Mathematica* : 28, <http://doi:10.1006/hmat.2001.2315/2001>.
- [60] H. Vic Dannon, Circular and Spherical Delta Functions, *Gauge Institute Journal*, January, 2012.
- [61] Anzor Khelashvili, Teimuraz Nadareishvili, On the Boundary Conditions for the Radial Schrodinger Equation, *Bull. Georg. Natl. Acad. Sci*, vol. 5, no. 2, 2011.
- [62] Melnikov Yu. A. Construction of Green's Functions for the Two-Dimensional Static Klein-Gordon Equation, *J. Part. Diff. Eq.*, Vol. 24, No. 2, pp. 114-139, May 2011.
- [63] M Acila, B Benali and M T Meftah, The Green function for the step potential via an exact summation of the perturbation series, *J. Phys. A : Math. Gen.* 39 (2006) 1357–1366. <http://doi:10.1088/0305-4470/39/6/009>.
- [64] Smirnov V, *Cours de Mathématiques Supérieures*, (Moscow : Mir), vol IV ,1975
- [65] Martin Bures, *Quantum Physics With Extra Dimensions*, Thèse de doctorat, Masaryk University, Brno, June 2015
- [66] T. Rother, M. Kahnert, A. Doicu and J. Wauer, Surface Green's Function of the Helmholtz Equation in Spherical Coordinates, *Progress In Electromagnetics Research*, PIER 38, 47–95, 2002
- [67] Wang Weike, Nonlinear Evolution Systems and Green's Function, *Acta Mathematica Scientia*, 30B(6) : 2051–2063. <http://actams.wipm.ac.cn> .2010
- [68] Difallah M. and Meftah M.T, Green function of Quantum Liouville Problem via Exact Summation of perturbation series, *Annales des Sciences et Technologie* Vol. 5, N° 2, Octobre 2013
- [69] Howard S. Cohl and Joel E. Tohline, A Compact Cylindrical Green's Function Expansion For The Solution of Potential Problems, *The Astrophysical Journal*, 527 :86-101, December 1999
- [70] Pérez-Arancibia C. Duran M, On the Green's function for the Helmholtz operator in an impedance circular cylindrical waveguide, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 2010, 235, 244-262.

- [71] M. Krasnov, A. Kisselev, G. Makarenko, Equations intégrales ; Edition Mir (1976)
- [72] V. Vladimirov, V.Mikhailov, M. Chabounine, KH. Karimova, Y. Sidorov, A. Vacharine : Recueil de problèmes d'équations de Phys. Math. Edition Mir Moscou (1977), (chapII-section5, chapIII-section6)
- [73] J. Dupraz : La théorie des distributions et ses applications, Ensta.Cepadues édition (2000).

# Quantum Green's Function in N-dimensional Space with Spherically Piecewise Continuous Potentials

M. Begui

Faculty of Sciences, University of Hamma Lakhdar, El-oued, 39000, Algeria

M. T. Meftah

Faculty of Mathematics and Sciences Matter, and LRPPS Laboratory,  
University of Kasdi Merbah, Ouargla, 30000, Algeria

B. Ben Ali

Faculty of Sciences, University of Hamma Lakhdar, El-oued, 39000, Algeria

Copyright © 2017 M. Begui, M.T. Meftah and B. Ben Ali. This article is distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

## Abstract

The aim of this work is to provide the radial part of the Green's function for the Schroedinger operator defined on N-dimensional space. The potential part in the Hamiltonian is a piecewise continuous operator. We have considered two kinds of potentials: the first of them is a positive constant  $V_0$  inside a sphere ( $x_1^2 + \dots + x_N^2 = a^2$ ) and zero outside this sphere whereas the second is a negative constant  $V_0$  inside the sphere and null outside (a finite well potential). For the first kind of potential, we have calculated the Green's function in two cases of energy:  $E > V_0$  and  $E < V_0$ . For the second kind of potential, we have discussed the discrete spectrum of the Hamiltonian operator.

**PACS:** 03.75.Lm, 03.65.Db, 02.30.Gp, 02.30.Sa

**Keywords:** Schroedinger equation, Green's function, radial equation, spherical Bessel functions



## 1 Introduction

The Green's functions were successfully applied to solving various problems of mathematical physics. George Green (1793- 1841) was the first scientist who established the basic concepts of Green's function and created a mathematical theory of electricity and magnetism. His work was focused on solving Laplace's and Poisson's equations with various boundary conditions. In fact Green's functions theory, is a very usefull for other scientists in many applications in physics and engineering. Such investigations are due to Riemann and Helmholtz in acoustics, Lipschitz in electrodynamics, Franz Neumann in magnetic induction, Betti in heat theory and elasticity, quantum mechanics, cosmology etc.... In quantum mechanics the problems related to the step and barrier potentials in one dimension space have been the subject of the first courses according to different boundary conditions, but for the cases of higher dimensions few things are done, especially in the Green's function formalism. The application of Green's function method to solve this kind of problems requires the knowledge of Green's function for the Helmholtz equation [1]. Green's functions of the Helmholtz equation in regular regions are well known. In references [2] and [3], the Green's function for Schrödinger equation with one-dimension rectangular potentials and with the step and square-barrier potentials in one dimensional space was solved exactly. In [4], the Green's function has been studied for the thin circular Kirchhof Poisson-plate. The Green's function has been also studied by [5] in two dimensions for a piecewise continuous potential and by [6] in three dimensions for a piecewise continuous potential possessing a spherical symmetry. In [7]-[8] the Green's function has been analyzed for the elliptic domain. The quantum problem relative to scattering in two dimensions was also treated asymptotically in [9]. Using the approximative methods, [[10]-[11]] have treated the Green's function problem. Spherically symmetric vacuum solutions of modified gravity theory in higher dimensions [12]. The Schrödinger equation of the spherical symmetry quantum models such as the hydrogen atom problem has been solved in higher dimensions [13]. Closed forms of the Greens function and the generalized Greens function for the Helmholtz operator on the N-dimensional unit sphere, which corresponds to angular part of the Helmholtz operator was been derived [[14],[15]]. Our work treats the radial part of such operator augmented by an interacting potential operator which is piecewise continuous.

Starting by the section 2, we give a brief review of the Schrödinger equation in N dimensionnal spherical coordinates and the construction of the Green's functions in the case where the interaction part in the Schrödinger equation is a piecewise continuous potential. In scction 3 we apply the theory for an axi-symmetric potential defined as a positive constant inside the sphere and zero outside the sphere for the case  $E > V_0$ . The case  $0 < E < V_0$  is presented

in the section 4. We calculate the Green's function by using the continuity of the solution and its first derivative on the frontier. In section 5. the case of the spherical well potential is discussed when we study the problem with the negative potential inside the sphere and zero outside the sphere. Here, we have also used the continuity of the solution and its derivative to obtain the associate Green's function. Finally, we conclude this work in section 6.

## 2 Construction of Green's function :

The time independent Schrödinger equation for a particle of mass  $m$ , subjected to a potential  $V$ , in  $N$ -dimensional space has the form

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_N\psi_{nlm} + V\psi_{nlm} = E\psi_{nlm} \quad (1)$$

where  $\Delta_N$  is the Laplacian in the spherical coordinates  $(r, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N-1})$  such that  $r = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_N^2}$  is the radial coordinate.

$$\Delta_N = \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{\Lambda_N^2(\Omega_N)}{r^2} \quad (2)$$

The second term of (2) is the multidimensional space centrifugal term.  $\Omega_N$  represents the angular coordinates. In this line, the operator  $\Lambda_N^2$  yields hyperspherical harmonics as its eigenfunction. This helps us to write the wave function as

$$\psi_{nlm}(r, \Omega_N) = R_{nl}(r)Y_l^m(\Omega_N) \quad (3)$$

where  $R_{nl}(r)$  is the radial part of the equation (1) and  $Y_l^m(\Omega_N)$  is the angular part called hyperspherical harmonics.  $Y_l^m(\Omega_N)$  obeys the eigenvalue equation

$$\Lambda_N^2 Y_l^m(\Omega_N) = l(l + N - 2)Y_l^m(\Omega_N), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

We note here that in the case of unit sphere ( $a=1$ ), [14]-[15] has derived the angular Green's function. Substituting (3) into (1) and making use of (4), and applying the variable separation method, the  $N$ -dimensional hyperradial equation becomes

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} (r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l(l + N - 2)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (5)$$

where  $E$  is the energy eigenvalue and  $l$  is the orbital angular momentum quantum number  $l = 0, 1, 2, \dots$

This equation can be solved by the Green's function method. We consider the potential  $V(r, \theta = \theta_1, \dots, \theta_{N-1})$  has the form

$$V(r, \theta) = \begin{cases} V_1 & \text{if } 0 < r < a \\ V_2 & \text{if } r > a \end{cases} \quad (6)$$

and the corresponding Schrodinger equation is

$$\left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] G(r, r') = \delta^{(N)}(\vec{r}) \quad (7)$$

The term with N-dimensional delta-function can be written as

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \frac{1}{|J|} \delta(r) \delta(\theta_1) \dots \delta(\theta_{N-1}) \quad (8)$$

where  $J$  is the Jacobian

$$|J| = \left| \frac{\partial (x_1 x_2 \dots x_N)}{\partial (r \theta_1 \theta_2 \dots \theta_{N-1})} \right| = r^{N-1} \sin \theta_1^{N-2} \dots \sin \theta_{N-2} \quad (9)$$

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \frac{1}{r^{N-1} \sin \theta_1^{N-2} \dots \sin \theta_{N-2}} \delta(r) \delta(\theta_1) \dots \delta(\theta_{N-1}) \quad (10)$$

By taking the radial part (after integration on the angles  $\theta_1, \dots, \theta_{n-1}$ ), we have

$$\delta^{(N)}(\vec{r}) = \frac{1}{r^{N-1}} \delta(r) \quad (11)$$

Inserting (6) and (11) in (7), we find for  $0 < r < a$  and  $r > a$  respectively

$$\begin{cases} \left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1) \right] G(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{r^{N-1}} \\ \left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2) \right] G(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{r^{N-1}} \end{cases} \quad (12)$$

The latter equations are the departure of our investigation in this work.

### 3 Application of the case $V_1 = V_0 > 0, V_2 = 0, E > V_0$

#### 3.1 Outside the sphere $r, r' > a$

We note by  $G^{l,2,2}$  the Green's function outside the sphere. In this case the second equation of (12) is

$$\left[ \frac{1}{r^{N-1}} \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right] G^{l,2,2}(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{r^{N-1}} \quad (13)$$

or equivalently after some algebraic calculations

$$\frac{d}{dr}(r^{N-1} \frac{d}{dr} G^{l,2,2}(r, r')) + \left[ \left( \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) r^{N-1} \right] G^{l,2,2}(r, r') = \delta(r-r') \quad (14)$$

By taking for lightening  $G^{l,2,2}(r, r') \equiv g_{l,N}(r)$ , we can write the equation (14) for  $r \neq r'$  as the following form

$$\frac{d^2 g_{l,N}(r)}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} g_{l,N}(r) + \left( \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) g_{l,N}(r) = 0 \quad (15)$$

By making the changes  $z = kr$ , and  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  then  $g_{l,N}(r)$  satisfies to the following equation

$$\frac{d^2}{dz^2} g_{l,N}(z) + \frac{(N-1)}{z} \frac{d}{dz} g_{l,N}(z) + \left[ \left( 1 - \frac{l(l+N-2)}{z^2} \right) \right] g_{l,N}(z) = 0 \quad (16)$$

which is a multi spherical Bessel equation of order  $l$ . The corresponding linear independent solutions are  $j_{l,N}(z)$  and  $\eta_{l,N}(z)$  defined by

$$j_{l,N}(z) = \left( \frac{\pi}{2z} \right)^{\frac{N-2}{2}} J_{l+\frac{N-2}{2}}(z) \quad (17)$$

$$\eta_{l,N}(z) = \left( \frac{\pi}{2z} \right)^{\frac{N-2}{2}} Y_{l+\frac{N-2}{2}}(z) \quad (18)$$

We can write a more general solution of equation (16) as

$$g_{l,N}(r) = A j_{l,N}(kr) + B \eta_{l,N}(kr). \quad (19)$$

where the constants A and B must be choosen with respect to the specific studied problem. Therefore, with the use of the equation (19), the solution of the equation (16) can be immediately written as

$$G^{l,2,2}(r, r') = \begin{cases} C(r') [\eta_{l,N}(kr) - \beta j_{l,N}(kr)], & a < r < r' \\ D(r') j_{l,N}(kr), & r' < r < \infty \end{cases} \quad (20)$$

In this expression of the Green's function, we see the combinaison of two waves, one escapes the sphere  $\eta_{l,N}(kr)$  and an other comes from infinity  $-\beta j_{l,N}(kr)$ . The constants  $C$ ,  $D$  and  $\beta$  must be determined by using the boundary conditions. The same thing may be said about the factor  $D(r')$  as we will see below when we determine it. The first condition demands that  $G^{l,2,2}(r, r')$ , as function of  $r$  ( $r'$  is fixed), must be continuous at  $r = r'$

$$G^{l,2,2}(r'_+, r') - G^{l,2,2}(r'_-, r') = 0 \quad (21)$$

or, when we use the equation (20), we find

$$-C(r')\eta_{l,N}(kr') + [D(r') + \beta C(r')]j_{l,N}(kr') = 0 \quad (22)$$

The second condition demands that the first derivative at  $r = r'$  must possess a jump, that is to say

$$\frac{d}{dr}G^{l,2,2}(r'_+, r') - \frac{d}{dr}G^{l,2,2}(r'_-, r') = \frac{1}{r'^{N-1}} \quad (23)$$

or equivalently

$$-C(r')\eta'_{l,N}(kr') + (D(r') + \beta C(r'))j'_{l,N}(kr') = \frac{1}{kr'^{N-1}} \quad (24)$$

where  $j'_{l,N}(x)$ ,  $\eta'_{l,N}(x)$  are the first derivative with respect  $x$  of  $j_{l,N}(x)$ ,  $\eta_{l,N}(x)$ . By combining equations (22) and (24), we obtain

$$C(r')\eta'_{l,N}(kr') - (D(r') + \beta C(r'))j'_{l,N}(kr') = -\frac{1}{kr'^{N-1}} \quad (25)$$

By using the fact that the Wronskian of the multi spherical Bessel's functions  $j_{l,N}$  and  $\eta_{l,N}$  is equal to

$$\begin{aligned} & W(j_{l,N}(kr'), \eta_{l,N}(kr')) \\ &= j_{l,N}(kr')\eta'_{l,N}(kr') - \eta_{l,N}(kr')j'_{l,N}(kr') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} \frac{1}{(kr')^{N-1}} \end{aligned} \quad (26)$$

we check the coefficients  $C$  and  $D$  to be equal to

$$C(r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(kr') \quad (27)$$

and

$$D(r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(kr') - \beta j_{l,N}(kr')] \quad (28)$$

As we have mentioned above, the coefficient  $D(r')$  is a sum of two waves, one escaping the sphere and one going from infinity. Then the Green's function, outside the sphere, is given by

$$\begin{aligned} & G^{l,2,2}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \\ & \begin{cases} [\eta_{l,N}(kr) - \beta j_{l,N}(kr)]j_{l,N}(kr'), & a \leq r \leq r' \\ [\eta_{l,N}(kr') - \beta j_{l,N}(kr')]j_{l,N}(kr), & r' \leq r \leq \infty \end{cases} \end{aligned} \quad (29)$$

We have determined the coefficients  $C$  and  $D$ . The remaining coefficient  $\beta$  will be calculated in the next subsection.

### 3.2 Inside the sphere:

Inside the sphere  $0 < (r, r') < a$ , we have to use the first equation of (12)

$$\left[ \frac{d}{dr} \left( r^{N-1} \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right] G(r, r') = \frac{\delta(r - r')}{r^{N-1}} \quad (30)$$

which has two independent solutions  $\eta_{l,N}(\mu r)$  and  $j_{l,N}(\mu r)$ . The corresponding Green's function can be written as

$$G^{l:1,1}(r, r') = \begin{cases} A(r') j_{l,N}(\mu r), & 0 \leq r \leq r' \leq a \\ B(r') [\eta_{l,N}(\mu r) - \alpha j_{l,N}(\mu r)], & r' \leq r \leq a \end{cases} \quad (31)$$

where  $\mu^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$ , and  $A, B, \alpha$  are constants that will be calculated at the next step. By using the continuity of the Green's function at  $r = r'$

$$G^{l:1,1}(r'_+, r') - G^{l:1,1}(r'_-, r') = 0 \quad (32)$$

that is to say

$$B(r') \eta_{l,N}(\mu r') - [A(r') + \alpha B(r')] j_{l,N}(\mu r') = 0 \quad (33)$$

and the discontinuity of the Green's function at  $r = r'$

$$\frac{d}{dr} G^{l:1,1}(r'_+, r') - \frac{d}{dr} G^{l:1,1}(r'_-, r') = \frac{1}{r'^{N-1}} \quad (34)$$

that is to say

$$B(r') \eta'_{l,N}(\mu r') - (A(r') + \alpha B(r')) j'_{l,N}(\mu r') = \frac{1}{\mu r'^{N-1}} \quad (35)$$

and the equations (26), (33) and (35), we get the constants  $A(r')$  and  $B(r')$  as the following

$$A(r') = \left( \frac{\pi}{2} \right)^{3-N} \mu^{N-2} [\eta_{l,N}(\mu r') - \alpha j_{l,N}(\mu r')] \quad (36)$$

and

$$B(r') = \left( \frac{\pi}{2} \right)^{3-N} \mu^{N-2} j_{l,N}(\mu r') \quad (37)$$

and after substituting them in (31) we find the Green's function inside the sphere

$$G^{l:1,1}(r, r') = \left( \frac{\pi}{2} \right)^{3-N} \mu^{N-2} \begin{cases} [\eta_{l,N}(\mu r') - \alpha j_{l,N}(\mu r')] j_{l,N}(\mu r), & 0 \leq r \leq r' \leq a \\ [\eta_{l,N}(\mu r) - \alpha j_{l,N}(\mu r)] j_{l,N}(\mu r'), & r' \leq r \leq a \end{cases} \quad (38)$$

To find the coefficients  $\alpha$  and  $\beta$  we use the continuity of the Green's function and the continuity of its first derivative at  $r = r' = a$

$$G^{l:1,1}(a_-, a) = G^{l:2,2}(a_+, a) \quad (39)$$

or

$$\begin{aligned} & \mu^{N-2} [\eta_{l,N}(\mu a) - \alpha j_{l,N}(\mu a)] j_{l,N}(\mu a) \\ &= -k^{N-2} [\eta_{l,N}(ka) - \beta j_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka) \end{aligned} \quad (40)$$

and

$$\left. \frac{d}{dr} G^{l:1,1}(r, a) \right|_{r=a_-} = \left. \frac{d}{dr} G^{l:2,2}(r, a) \right|_{r=a_+} \quad (41)$$

that is to say

$$\begin{aligned} & \mu^{N-1} [\eta'_{l,N}(\mu a) - \alpha j'_{l,N}(\mu a)] j_{l,N}(\mu a) \\ &= -k^{N-1} [\eta'_{l,N}(ka) - \beta j'_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka) \end{aligned} \quad (42)$$

After simplifications, we get the coefficient  $\alpha$  as

$$\alpha = \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} (\frac{\pi}{2})^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} \quad (43)$$

where we have defined

$$V(k, \mu) = k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu a) - \mu j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu a) \quad (44)$$

In the same way, we find the coefficient  $\beta$  equal to

$$\beta = \frac{k(ka)^{1-N} (\frac{\pi}{2})^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} \quad (45)$$

where we have defined

$$U(k, \mu) = k \eta'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu a) - \mu \eta_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu a) \quad (46)$$

Summarizing, the Green's function inside the sphere is given by the following expression for  $0 \leq r < r' \leq a$

$$\begin{aligned} & G^{l:1,1}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} (\eta_{l,N}(\mu r')) \\ & - \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} (\frac{\pi}{2})^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} j_{l,N}(\mu r') j_{l,N}(\mu r) \end{aligned} \quad (47)$$

and interchanging  $r$  with  $r'$ , we get the following expression for the Green's function inside the sphere for  $r' < r \leq a$

$$G^{l:1,1}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} (\eta_{l,N}(\mu r) - \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} j_{l,N}(\mu r)) j_{l,N}(\mu r')$$
(48)

and outside the sphere for  $a < r < r'$

$$G^{l:2,2}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} (\eta_{l,N}(kr) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} j_{l,N}(kr)) j_{l,N}(kr')$$
(49)

and for  $r' < r < \infty$

$$G^{l:2,2}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(kr') j_{l,N}(kr) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} j_{l,N}(kr') j_{l,N}(kr)]$$
(50)

### 3.3 The case $0 < r' < a < r < \infty$ ( $r'$ inside and $r$ outside the sphere)

In this case the Green's function writes as

$$G^{2,1}(l : r, r') = \mu^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu r') [\eta_{l,N}(kr) - \lambda j_{l,N}(kr)]$$
(51)

where  $\lambda$  is a constant to be determined using the continuity of Green's function at  $r = r' = a$  :

$$G^{2,1}(l : r, a)|_{r=a} = G^{2,2}(l : r, a)|_{r=a}$$
(52)

Then

$$\mu^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu a) [\eta_{l,N}(ka) - \lambda j_{l,N}(ka)] = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \left[ \eta_{l,N}(ka) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) U(k, \mu)}{j_{l,N}(ka) V(k, \mu)} j_{l,N}(ka) \right] j_{l,N}(ka)$$



this leads to get the constant

$$\lambda = \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (53)$$

Then we obtain the Green's function (mixed)

$$G^{2,1}(l : r, r') = \mu^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \left( \eta_{l,N}(kr) - \left( \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \right) j_{l,N}(kr) \right) j_{l,N}(\mu r') \quad (54)$$

### 3.4 The case $0 < r < a < r' < \infty$ ( $\mathbf{r}$ inside and $\mathbf{r}'$ outside the sphere):

Similarly to the above, the Green's function writes as

$$G^{1,2}(l : r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu r) [\eta_{l,N}(kr') - \theta j_{l,N}(kr')] \quad (55)$$

where  $\theta$  is a constant to be determined using the continuity of Green's function at  $r = r' = a$  :

$$G^{1,2}(l : r, a) \Big|_{r=a} = G^{1,1}(l : r, a) \Big|_{r=a} \quad (56)$$

Then

$$\begin{aligned} & -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu a) [\eta_{l,N}(ka) - \theta j_{l,N}(ka)] \\ & = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu^{N-2} (\eta_{l,N}(\mu a) \\ & - \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)}{j_{l,N}(\mu a) V(k, \mu)} j_{l,N}(\mu a)) j_{l,N}(\mu a) \end{aligned} \quad (57)$$

This leads to the following constant

$$\theta = \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (58)$$

Then the mixed Green's function ( $r < a < r'$ ) becomes

$$G^{1,2}(l : r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} j_{l,N}(\mu r) \left[ \eta_{l,N}(kr') - \left( \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{V(k, \mu)} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \right) j_{l,N}(kr') \right] \quad (59)$$

## 4 Application of the case $V_1 = V_0 > 0, V_2 = 0, 0 < E < V_0$

In this case  $\mu$  becomes purely imaginary number  $\mu' = i\mu$ , and the phenomena of quantum tunneling can be checked.

$$\mu' = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} = i\mu \quad (60)$$

### 4.1 Inside the sphere $[0 \leq (r', r) \leq a]$

here we have  $[0 \leq (r', r) \leq a]$  and the second equation of (12) becomes

$$\frac{d^2 g_{l,N}(r)}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} g_{l,N}(r) - \left( \frac{2m}{\hbar} (V_0 - E) + \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) g_{l,N}(r) = 0$$

$$\frac{d^2 g_{l,N}(r)}{dr^2} + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} g_{l,N}(r) + \left( (i\mu)^2 - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) g_{l,N}(r) = 0 \quad (61)$$

which is the modified multi spherical Bessel equation of order  $l$  that admit two independent solutions  $i_{l,N}(\mu r)$  and  $k_{l,N}(\mu r)$  which as

$$i_{l,N}(\mu r) \equiv j_{l,N}(i\mu r) \quad (62)$$

$$k_{l,N}(\mu r) \equiv \eta_{l,N}(i\mu r) \quad (63)$$

Then, with the same way we find the Green's function, in this case, as follows

$$G^{l,3,3}(r, r') = \begin{cases} A(r') i_{l,N}(\mu r); & 0 \leq r < r' \leq a \\ B(r') [k_{l,N}(\mu r) - \gamma i_{l,N}(\mu r)]; & 0 \leq r' < r \leq a \end{cases} \quad (64)$$

where  $\gamma$  is a constant that will be calculated later. Using the boundary conditions at  $r = r'$  we find

$$G^{l,3,3}(r'_+, r') - G^{l,3,3}(r'_-, r') = 0 \quad (65)$$

or equivalently

$$B(r') k_{l,N}(\mu r') - [A(r') + B(r') \gamma] i_{l,N}(\mu r') = 0 \quad (66)$$

and by using the discontinuity of the first derivative of  $G^{l,3,3}$  at  $r = r'$  we find

$$\frac{d}{dr} G^{l,3,3}(r'_+, r') - \frac{d}{dr} G^{l,3,3}(r'_-, r') = \frac{1}{r'^{N-1}} \quad (67)$$

$$B(r')k'_{l,N}(\mu r') - [A(r') + B(r')\gamma]i'_{l,N}(\mu r') = \frac{1}{\mu r'^{N-1}} \quad (68)$$

The Wronskian of the multi spherical modified Bessel function  $i_{l,N}$  and  $k_{l,N}$  take the following form:

$$W(i_{l,N}(\mu r'), k_{l,N}(\mu r')) = i_{l,N}(\mu r')k'_{l,N}(\mu r') - k_{l,N}(\mu r')i'_{l,N}(\mu r') = -\frac{1}{(\mu r')^{N-1}} \quad (69)$$

From (67),(69) and (70) the constants  $A(r')$  and  $B(r')$  are given by the following expressions

$$B(r') = -(\mu)^{N-2}i_{l,N}(\mu r') \quad (70)$$

$$A(r') = -(\mu)^{N-2} [k_{l,N}(\mu r') - \gamma i_{l,N}(\mu r')] \quad (71)$$

then

$$G^{l,3,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} \begin{cases} [k_{l,N}(\mu r') - \gamma i_{l,N}(\mu r')]i_{l,N}(\mu r); 0 \leq r \leq r' \leq a \\ i_{l,N}(\mu r')[k_{l,N}(\mu r) - \gamma i_{l,N}(\mu r)]; 0 \leq r' \leq r \leq a \end{cases} \quad (72)$$

It is worth to mention here that the case of the "hard" sphere can be recovered when we put in the last formula the limit  $V_0 = \infty$  in that case the limit gives zero ( $G^{l,3,3}(r, r') = 0$ ). The constant  $\gamma$  will be calculated in the next subsection.

## 4.2 Outside the sphere ( $a \leq (r', r) \leq \infty$ )

The Green's function is the same as (30) but with a new constant  $\beta_1$  :

$$G^{l,4,4}(r, r') \equiv G^{l,2,2}(r, r') \quad (73)$$

$$G^{l,4,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \begin{cases} [\eta_{l,N}(kr) - \beta_1 j_{l,N}(kr)]j_{l,N}(kr'), & a \leq r \leq r' \\ [\eta_{l,N}(kr') - \beta_1 j_{l,N}(kr')]j_{l,N}(kr), & r' \leq r \leq \infty \end{cases}$$

To find the coefficients  $\gamma$  and  $\beta_1$  we use the continuity of the Green's function and the continuity of its first derivative at  $r = r' = a$  :

$$G^{l,3,3}(a_-, a) = G^{l,4,4}(a_+, a) \quad (74)$$

then

$$\begin{aligned}
& -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu a) [k_{l,N}(\mu a) - \gamma i_{l,N}(\mu a)] \\
= & -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(ka) - \beta_1 j_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka)
\end{aligned} \tag{75}$$

and

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dr} G^{l,3,3}(r, a) \Big|_{r=a_-} = \frac{d}{dr} G^{l,4,4}(r, a) \Big|_{r=a_+} \\
& -(\mu)^{N-1} i_{l,N}(\mu a) [k'_{l,N}(\mu a) - \gamma i'_{l,N}(\mu a)] = \\
& -k^{N-1} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta'_{l,N}(ka) - \beta_1 j'_{l,N}(ka)] j_{l,N}(ka)
\end{aligned} \tag{76}$$

$$\tag{77}$$

After some simplifications we get the coefficients  $\gamma$  and  $\beta_1$  as the following expressions

$$\gamma = \frac{2\mu(\mu a)^{1-N} j_{l,N}(ka) + k_{l,N}(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i_{l,N}(\mu a)\Omega(\mu, k)} \tag{78}$$

$$\beta_1 = \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka)\Phi(\mu, k)}{j_{l,N}(ka)\Omega(\mu, k)} \tag{79}$$

where we have defined

$$\Omega(\mu, k) = k j'_{l,N}(ka) i(\mu a) - \mu j_{l,N}(ka) i'_{l,N}(\mu a) \tag{80}$$

and

$$\Phi(\mu, k) = k \eta'_{l,N}(ka) i_{l,N}(\mu a) - \mu \eta_{l,N}(ka) i'_{l,N}(\mu a) \tag{81}$$

Finally, Green's function inside the sphere (for the case  $0 < E < V_0$ ) is given respectively for  $0 \leq r \leq r' \leq a$  and  $0 \leq r' \leq r \leq a$  by

$$\begin{aligned}
& G^{l,3,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} \\
& \left\{ \begin{aligned}
& [k_{l,N}(\mu r') - \frac{2\mu(\mu a)^{1-N} j_{l,N}(ka) + k_{l,N}(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i_{l,N}(\mu a)\Omega(\mu, k)} i_{l,N}(\mu r')] i_{l,N}(\mu r); \\
& i_{l,N}(\mu r') [k_{l,N}(\mu r) - \frac{2\mu(\mu a)^{1-N} j_{l,N}(ka) + k_{l,N}(\mu a)\Omega(\mu, k)}{i_{l,N}(\mu a)\Omega(\mu, k)} i_{l,N}(\mu r)]
\end{aligned} \right.
\end{aligned} \tag{82}$$

and outside the sphere, the Green's function is for  $a < r < r'$  and  $r' < r < \infty$  respectively

$$\begin{aligned}
& G^{l,4,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \\
& \left\{ \begin{aligned}
& (\eta_{l,N}(kr) - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka)\Phi(\mu, k)}{j_{l,N}(ka)\Omega(\mu, k)} j_{l,N}(kr)) j_{l,N}(kr') \\
& (\eta_{l,N}(kr') - \frac{k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka)\Phi(\mu, k)}{j_{l,N}(ka)\Omega(\mu, k)} j_{l,N}(kr')) j_{l,N}(kr)
\end{aligned} \right.
\end{aligned} \tag{83}$$

### 4.3 $\mathbf{r}'$ inside and $\mathbf{r}$ outside the sphere ( $0 < r' \leq a \leq r \leq \infty$ ) :

In this case the mixed Green's function is given by

$$G^{l,4,3}(r, r') = -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu r') [\eta_{l,N}(kr) - \lambda_1 j_{l,N}(kr)] \quad (84)$$

where  $\lambda_1$  is a constant to be determined using the continuity of Green's function at  $r = r' = a$ ,

$$\begin{aligned} G^{l,4,3}(r, a) \Big|_{r=a} &= G^{l,4,4}(r, a) \Big|_{r=a} \\ -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu a) [\eta_{l,N}(ka) - \lambda_1 j_{l,N}(ka)] &= -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \\ \left[ \eta_{l,N}(ka) - \frac{k_{l,N}(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3} i_{l,N}(\mu a) + j_{l,N}(ka) \Phi(\mu, k)}{\Omega(\mu, k)} \right] & j_{l,N}(ka) \end{aligned} \quad (85)$$

or, after some simplifications, the constant  $\lambda_1$  becomes

$$\lambda_1 = \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + 2 \frac{\mu (\mu a)^{1-N}}{\Omega(\mu, k)} \quad (86)$$

Then we obtain the mixed Green's function for the case  $r' < a < r$

$$\begin{aligned} G^{l,4,3}(r, r') &= -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu r') \\ \left[ \eta_{l,N}(kr) - \left( \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + 2 \frac{\mu (\mu a)^{1-N}}{\Omega(\mu, k)} \right) j_{l,N}(kr) \right] & \end{aligned} \quad (87)$$

### 4.4 $\mathbf{r}$ inside and $\mathbf{r}'$ outside the sphere ( $0 \leq r \leq a \leq r' \leq \infty$ ):

In this case the Green's function is

$$G^{l,3,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(kr') - \theta_1 j_{l,N}(kr')] i_{l,N}(\mu r) \quad (88)$$

where  $\theta_1$  is a constant to be determined using the continuity of the Green's function at  $r = r' = a$ ,

$$\begin{aligned} G^{l,3,4}(r, a) \Big|_{r=a} &= G^{l,3,3}(r, a) \Big|_{r=a} \quad (89) \\ -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} [\eta_{l,N}(ka) - \theta_1 j_{l,N}(ka)] i_{l,N}(\mu a) &= -(\mu)^{N-2} i_{l,N}(\mu a) \\ \left[ k_{l,N}(\mu a) - \frac{2\mu (\mu a)^{1-N} j_{l,N}(ka) + k_{l,N}(\mu a) \Omega(\mu, k)}{i_{l,N}(\mu a) \Omega(\mu, k)} i_{l,N}(\mu a) \right] & \end{aligned}$$

or, after some simplifications, the constant  $\lambda_1$  becomes

$$\theta_1 = \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{\Omega(\mu, k)} \quad (90)$$

Then the mixed Green's functions becomes for the case  $r < a < r'$

$$G^{l,3,4}(r, r') = -k^{N-2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} i_{l,N}(\mu r) \left[ \eta_{l,N}(kr') - \left( \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} + \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{\Omega(\mu, k)} \right) j_{l,N}(kr') \right] \quad (91)$$

## 5 Quantum Green's function for spherical well potential

This problem is an important question which concerns the bounded states ( $0 > E > -V_0$ ) in quantum mechanics. In many situations the potential can be used in the following form

$$V(r, \theta_1, \dots, \theta_{N-1}) = \begin{cases} -V_0; 0 \leq r \leq a, \\ 0; r \geq a. \end{cases} \quad (92)$$

Using the same method as above, we obtain the Green's functions in different regions as it follows

### 5.1 Inside the sphere ( $0 \leq (r, r') \leq a$ ) :

We have the following differential equation

$$\frac{d^2}{dr^2} g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} g_{l,N}(r) + \left( \left( \frac{2m}{\hbar^2} E + V_0 \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) g_{l,N}(r) = 0 \quad (93)$$

Using the definition  $\mu_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E + V_0$ , we find the Green's function as

$$G^{l,5,5}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu_1^{N-2} \begin{cases} [\eta_{l,N}(\mu_1 r') - \alpha_5 j_{l,N}(\mu_1 r')] j_{l,N}(\mu_1 r), & 0 \leq r < r' \leq a \\ j_{l,N}(\mu_1 r') [\eta_{l,N}(\mu_1 r) - \alpha_5 j_{l,N}(\mu_1 r)], & r' < r \leq a \end{cases} \quad (94)$$

where  $\alpha_5$  will be given later.

## 5.2 Outside the sphere ( $a \leq (r, r') < \infty$ )

Outside the sphere the differential equation becomes

$$\frac{d^2}{dr^2} g_{l,N}(r) + \frac{(N-1)}{r} \frac{d}{dr} g_{l,N}(r) + \left[ \left( \left( \frac{2m}{\hbar^2} E \right) - \frac{l(l+N-2)}{r^2} \right) \right] g_{l,N}(r) = 0 \quad (95)$$

therefore the Green's function is given by

$$G^{l,6,6}(r, r') = - \left( \frac{\pi}{2} \right)^{3-N} k^{N-2} \begin{cases} [\eta_{l,N}(kr) - \beta_6 j_{l,N}(kr)] j_{l,N}(kr'), & a \leq r \leq r' \\ j_{l,N}(kr) [\eta_{l,N}(kr') - \beta_6 j_{l,N}(kr')], & r' \leq r \leq \infty \end{cases} \quad (96)$$

After using the boundary conditions at the edge of the sphere as above, the coefficients  $\alpha_5$  and  $\beta_6$  are respectively given by

$$\alpha_5 = \frac{\alpha_5(N)}{\alpha_5(D)} \quad (97)$$

$$\beta_6 = \frac{\beta_6(N)}{\beta_6(D)} \quad (98)$$

where

$$\alpha_5(N) = -2\mu_1(\mu_1 a)^{1-N} \left( \frac{\pi}{2} \right)^{N-3} j_{l,N}(ka) + \eta_{l,N}(\mu_1 a) \left[ k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a) \right] \quad (99)$$

$$\alpha_5(D) = j_{l,N}(\mu_1 a) \left[ k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a) \right] \quad (100)$$

The discrete spectrum can be computed numerically when solving the transcendental equation  $\alpha_5(D) = 0$ . The case of the infinite well can be recovered by making  $V_0 = \infty$ .

The coefficients  $\beta_6(N), \beta_6(D)$  are defined by

$$\beta_6(N) = k(ka)^{1-N} \left( \frac{\pi}{2} \right)^{N-3} j_{l,N}(\mu_1 a) + j_{l,N}(ka) \left[ k \eta'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 \eta_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a) \right] \quad (101)$$

$$\beta_6(D) = j_{l,N}(ka) \left[ k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a) \right] \quad (102)$$

### 5.3 $\mathbf{r}'$ inside and $\mathbf{r}$ outside the sphere ( $0 < r' \leq a \leq r < \infty$ )

In this case the mixed Green's function is

$$G^{l,6,5}(r, r') = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} \mu_1^{N-2} j_{l,N}(\mu_1 r') [\eta_{l,N}(kr) - \lambda_6 j_{l,N}(kr)] \quad (103)$$

where  $\lambda_6$  is

$$\lambda_6 = \frac{-2\mu(\mu a)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{\left[k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)\right]} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (104)$$

### 5.4 $\mathbf{r}$ inside and $\mathbf{r}'$ outside the sphere ( $0 < r \leq a \leq r' < \infty$ )

In this case the mixed Green's function is

$$G^{l,5,6}(r, r') = -\left(\frac{\pi}{2}\right)^{3-N} k^{N-2} [\eta_{l,N}(kr') - \sigma_6 j_{l,N}(kr')] j_{l,N}(\mu_1 r) \quad (105)$$

where  $\sigma_6$  is given by

$$\sigma_6 = \frac{2k(ka)^{1-N} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{N-3}}{\left[k j'_{l,N}(ka) j_{l,N}(\mu_1 a) - \mu_1 j_{l,N}(ka) j'_{l,N}(\mu_1 a)\right]} + \frac{\eta_{l,N}(ka)}{j_{l,N}(ka)} \quad (106)$$

## 6 Conclusion

In this work we have calculated the Green's function relative to the time-independent Schrödinger equation in N dimensionnal spherical coordinate. The potential part in the Hamiltonian is a piecewise continuous operator obeying to a spherical symetry. We have used successfully the technique of solving the differential equation (the Bessel's equation). We have, with the help of this technique, retrieved the Green's function of two problems: the first one is related to a potential equal a positive constant  $V_0$  inside a N-dimensional sphere of radius "a" and a zero operator outside this sphere. The second is related to a potential equal a negative constant ( $-V_0$ ) on the sphere of radius "a" and equal zero outside this sphere. For each problem, we have calculated explictely the Green's function in different regions of the space and for the cases  $E > V_0, E < V_0$ . We have respected the boundary conditions of the problems. The discrete spectra of the Hamiltonian operator have been also derived in the case of finite and infinite well potentials.



**Acknowledgements.** We wish to acknowledge the support of LRPPS laboratory and its director, by offering us the encouragement, and some technical materials for developing this work.

## References

- [1] D.G. Duffy, *Green's Functions with Applications*, Chapman Hall/CRC, Boca Raton, 2001.
- [2] M. F. Andrade, Exact Green's function for rectangular potentials and its application to quasi-bound states, *Physics Letters A*, **378** (2014), no. 21, 1461-1468. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2014.03.042>
- [3] M.A.M. de Aguiar, Exact Greens function for the step and square-barrier potentials, *Phys. Rev. A.*, **48** (1993), 2567-2573. <https://doi.org/10.1103/physreva.48.2567>
- [4] Y. A. Melnikov, Green's function of a thin circular plate with elastically supported edge, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, **25** (2001), 669-676. [https://doi.org/10.1016/s0955-7997\(01\)00067-4](https://doi.org/10.1016/s0955-7997(01)00067-4)
- [5] B. Benali, B. Boudjedaa and M. T. Meftah, Green Function on a Quantum Disk for the Helmholtz Problem, *Acta Phys. Polon. A*, **124** (2013), no. 1, 636-640. <https://doi.org/10.12693/aphyspola.124.636>
- [6] B. Benali and M. T. Meftah, Explicit quantum Green's function on a piecewise continuous symmetrical spherical potential, *Rep. Math. Phys.*, **74** (2014), 73-87. [https://doi.org/10.1016/s0034-4877\(14\)60058-6](https://doi.org/10.1016/s0034-4877(14)60058-6)
- [7] S. Kukla, Helmholtz eigenvalue problem in elliptical shaped domains, *Sci. Res. Inst. Math. Computer Sci.*, **9** (2010), no. 1, 77-82.
- [8] S. Kukla, Method of fundamental solutions for Helmholtz eigenvalue problems in elliptical domains, *Sci. Res. Inst. Math. Computer Sci.*, **11** (2009), no. 1, 85-90.
- [9] S. K. Adhikari, Quantum scattering in two dimensions, *Am. J. Phys.*, **54** (1986), 362-367. <https://doi.org/10.1119/1.14623>
- [10] I. M. Nemenman A. S. Silbergleit, Explicit Greens function of a boundary value problem for a sphere and trapped flux analysis in Gravity Probe B experiment, *J. Appl. Phys.*, **86** (1999), no. 1, 614-624. <https://doi.org/10.1063/1.370775>

- [11] R. Layeghnejad, M. Zare and R. Moazzemi, Dirac particle in a spherical scalar potential well, *Phys. Rev. D*, **84** (2011), 125026.  
<https://doi.org/10.1103/physrevd.84.125026>
- [12] T. R. P. Carames and E. R. Bezerra de Mello, Spherically symmetric vacuum solutions of modified gravity theory in higher dimensions, *The European Physical Journal C*, **64** (2009), 113-121.  
<https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-009-1115-y>
- [13] Secloka Lazare Guedeounme, Antonin Danvide Kanfon and Dine Ousmane Samary, Spherically symmetric potential in noncommutative space-time with a compactified extra dimensions, *The European Physical Journal C*, **76** (2016), no. 9. <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-016-4359-3>
- [14] R. Szmytkowski, Closed form of the generalized Greens function for the Helmholtz operator on the two-dimensional unit sphere, *J. Math. Phys.*, **47** (2006), 063506. <https://doi.org/10.1063/1.2203430>
- [15] R. Szmytkowski, Closed forms of the Greens function and the generalized Greens function for the Helmholtz operator on the N-dimensional unit sphere, *J. Phys. A*, **40** (2006), 995-1009.  
<https://doi.org/10.1088/1751-8113/40/5/009>

**Received: April 29, 2017; Published: June 10, 2017**