

Sturmian technique for the discrete spectrum of the Schrodinger equation

This article has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text article.

1980 J. Phys. A: Math. Gen. 13 3605

(<http://iopscience.iop.org/0305-4470/13/12/010>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 129.252.86.83

The article was downloaded on 31/05/2010 at 04:41

Please note that [terms and conditions apply](#).

Technique Sturmienne pour le spectre discret de l'équation de Schroedinger

J P Gazeau

Laboratoire de Chimie Physique,† 11, rue Pierre et Marie Curie, F 75231 Paris Cedex 05, France

Reçu le 7 janvier 1980, en forme définitive le 29 février 1980

Resumé. On associe à l'opérateur de Schroedinger $H = p^2/2m + V$ un opérateur compact autoadjoint $A[(-2mE)^{1/2}]$ paramétrisé par l'énergie $E < 0$. En imposant que toute valeur propre de A soit égale à l'unité, on obtient formellement le spectre discret de H . La détermination effective de celui-ci s'accomplit au moyen de l'approximation de A par des matrices finies hermitiennes, calculées dans la base dite 'Coulombienne Sturmienne'.

Cette méthode est illustrée par quelques exemples déjà traités (potentiel de Yukawa, potentiels $-r^{-\alpha}$, $0 < \alpha < 2$, potentiels à plusieurs centres), et certaines extensions sont envisagées.

Abstract. We associate a compact self-adjoint operator $A[(-2mE)^{1/2}]$, parametrised by the energy $E < 0$, with the Schroedinger operator $H = p^2/2m + V$. By setting all eigenvalues of A equal to unity, the discrete spectrum of H is obtained formally. It is determined by means of the approximation of A using finite hermitian matrices which are calculated in the so-called Coulomb Sturmian basis.

The method is illustrated by a few examples previously reported (Yukawa potential, $(-r^{-\alpha})$ potentials, $0 < \alpha < 2$, multiple-centre potentials) and possible extensions are discussed.

1. Introduction

La technique Sturmienne a pour but la détermination du spectre discret de l'Hamiltonien d'une particule dont l'énergie potentielle V doit satisfaire à certaines conditions de 'petitesse' par comparaison avec l'énergie cinétique $p^2/2m$. Elle s'appuie essentiellement sur le fait que l'opérateur $A(E) = (p^2/2m - E)^{-1}V$ est compact lorsque ces conditions sont réalisées (Schwinger 1961, Scadron *et al* 1964). Elle consiste à approcher $A(E)$ par des matrices $A^f(E)$ de rang fini f , calculées par rapport à une base convenablement choisie, et à considérer le spectre en énergie comme limite, pour f tendant vers l'infini, des racines en E des équations:

$$\det[I - A^f(E)] = 0.$$

Cette approche, pourtant simple, et très efficace dans la plupart des cas, semble mal connue ou rarement mise en pratique, malgré certaines publications dont nous signalons les plus récentes (Bang et Gareev 1978, Monkhorst et Jeriorski 1979).

† Laboratoire 'Matière et Rayonnement' associé au Centre National de la Recherche Scientifique.

L'objet de ce travail est de présenter la technique Sturmienne sous un angle particulier et avec un certain 'parti pris'. Tout d'abord, nous rendons symétrique l'opérateur $A(E)$ et le considérons comme fonction du paramètre $p_0 = (-2mE)^{1/2}$, de préférence à E . Nous précisons la validité de la technique compte tenu du potentiel V . Le 'parti pris' est 'Coulombien', donc unifiant, en ce sens que nous faisons usage exclusivement de la base Coulombienne Sturmienne (Epstein 1926, Rotenberg 1962) quel que soit le potentiel V étudié. La raison en est simple. Le potentiel Coulombien est le seul pour lequel l'équation Sturmienne correspondante est complètement soluble en termes d'expressions analytiques bien connues (polynômes de Laguerre, harmoniques sphériques, etc), même si on lui ajoute un potentiel proportionnel à r^{-2} .

Nous faisons ensuite référence à un certain nombre de travaux publiés récemment, démontrant l'efficacité de la méthode.

Les deux derniers paragraphes de l'article sont pour leurs parts consacrés à des extensions, exigeant certaines modifications: les potentiels se comportant à l'origine comme r^{-2} , les potentiels de confinement, l'opérateur de Schroedinger pour n particules, $n \geq 2$. Ces extensions constituent un apport que nous croyons original et peuvent être immédiatement exploitables.

2. Operateur 'Sturmien' $A(p_0)$

L'équation de Schroedinger pour les états liés d'une particule de masse m en interaction avec un champ extérieur $V(\mathbf{r})$, s'écrit après introduction du paramètre 'impulsion liée' $p_0 = (-2mE)^{1/2}$:

$$(p_0^2 + p^2 + 2mV)\psi = 0. \quad (1)$$

A l'équation ci dessus est formellement équivalente celle qui suit:

$$[I + (p_0^2 + p^2)^{-1/2} 2mV (p_0^2 + p^2)^{-1/2}] (p_0^2 + p^2)^{1/2} \psi = 0. \quad (2)$$

La racine carrée de $(p_0^2 + p^2)$ se conçoit aisément du fait de la stricte positivité de cet opérateur pour p_0 réel > 0 .

Nous désignerons par $A(p_0)$ l'opérateur, symétrique, fonction du paramètre p_0 :

$$A(p_0) = -(p_0^2 + p^2)^{-1/2} 2mV (p_0^2 + p^2)^{-1/2}, \quad (3)$$

et nous définirons une nouvelle fonction ϕ :

$$\phi = (1/\sqrt{2} p_0) (p_0^2 + p^2)^{1/2} \psi, \quad (4)$$

de telle sorte que l'équation (2) représente une équation aux valeurs propres particulière pour $A(p_0)$:

$$(I - A(p_0))\phi = 0, \quad (5)$$

celle pour laquelle on impose la condition de 'quantification' de l'énergie:

$$\text{valeur propre } a(p_0) = 1. \quad (6)$$

Les racines positives en p_0 de l'équation (6) doivent fournir les énergies des états liés correspondant à l'équation (1).

L'équivalence de l'équation (1) avec les équations (5) et (6) dépend évidemment de l'interaction V en tant qu'opérateur de multiplication dans l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3) \equiv \mathcal{H}$ des fonctions de carré intégrable ψ .

Le minimum que l'on doit exiger de ce dernier est qu'il possède la propriété ' $R + L_\epsilon^\infty$ ', c'est-à-dire qu'il satisfasse à l'exigence suivante:

$$\forall \epsilon > 0, \quad V = V_{1\epsilon} + V_{2\epsilon} \quad \text{où } \sup_{|r|} |V_{2\epsilon}(r)| < \epsilon,$$

et $V_{1\epsilon}$ obéit à la condition de Rollnik (Schwinger 1961, Simon 1971b):

$$\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{|V_{1\epsilon}(\mathbf{r}_1)| |V_{1\epsilon}(\mathbf{r}_2)|}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2} < +\infty \tag{7}$$

exigence des plus raisonnables du point de vue de la Physique. A titre d'indication, les potentiels centraux $r^{-\alpha}$, $0 < \alpha < 2$, appartiennent à la classe $R + L_\epsilon^\infty$.

3. Compacité et approximation par operateurs de rang fini

Pour des interactions V de la classe $R + L_\epsilon^\infty$ nous avons à notre disposition le résultat suivant (Simon 1971a, ch III) qui valide la transformation de l'équation de Schroedinger (1) en les équations (5) et (6), opération que nous intitulerons technique 'Sturmienne'.

Nous désignerons par $Q[p^2 + 1]$ l'espace des vecteurs ψ tels que:

$$\int d\mathbf{p} |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 (p^2 + 1) < +\infty,$$

où $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ est la transformée de Fourier de $\psi(\mathbf{r})$.

Proposition 1. Soit V un potentiel possédant la propriété $R + L_\epsilon^\infty$. Alors $\psi \in Q[p^2 + 1]$ satisfait à l'équation de Schroedinger $(H - E)\psi = 0$, $E < 0$, si et seulement si

$$\phi = (\sqrt{2} p_0)^{-1} (p_0^2 + p^2)^{1/2} \psi$$

appartient à \mathcal{H} et satisfait à l'équation Sturmienne:

$$(I - A(p_0))\phi = 0.$$

Soit $a_q(p_0)$ une valeur propre de $A(p_0)$ et ϕ_q un vecteur propre correspondant. Alors si $(-V)$ définit un opérateur positif, il existe une et seulement une solution réelle positive p_{0q} à l'équation $a_q(p_0) = 1$ (Schwinger 1961).

Et un vecteur d'état lié $\psi_{p_{0q}}$ correspondant à ϕ_q peut être obtenu par l'équation (4) en imposant à ce dernier d'avoir la norme:

$$\|(p_{0q}^2 + p^2)^{-1/2} \phi_q\| = 1/\sqrt{2} p_{0q}. \tag{8}$$

Comme V possède la propriété $R + L_\epsilon^\infty$, l'opérateur $A(p_0)$ a l'élégance d'être compact (Simon 1971b) et analytique comme fonction à valeur opérateurs de la variable p_0 dans le demi-plan complexe ouvert $\mathbb{D} = \{p_0 \in \mathbb{C}, \text{Re } p_0 > 0\}$. Nous pouvons

en conséquence tirer profit du théorème d'analyticité de Fredholm (Reed et Simon 1978):

Proposition 2. La compacité de l'opérateur $A(p_0)$ entraîne l'alternative suivante: soit $[I - A(p_0)]^{-1}$ n'existe pour aucun $p_0 \in \mathbb{D}$, soit $[I - A(p_0)]^{-1}$ existe pour tout $p_0 \in \mathbb{D} - S$, où S est un sous-ensemble discret de \mathbb{D} , auquel cas $[I - A(p_0)]^{-1}$ est méromorphe dans \mathbb{D} , analytique dans $\mathbb{D} - S$, les résidus aux pôles étant des opérateurs de rang fini. Et si $p_0 \in S$, $A(p_0)\phi = \phi$ a une solution non nulle dans \mathcal{H} .

L'ensemble discret S est en correspondance biunivoque avec celui constitué des énergies des états liés.

D'autre part, l'essence d'un opérateur compact réside dans le fait qu'il est limite en norme d'une suite d'opérateurs de rang fini. Ainsi, l'opérateur $A(p_0)$, compact autoadjoint pour $p_0 > 0$, peut être approché en norme par une suite de matrices hermitiennes de rang croissant $f: A^f(p_0)$, définies par:

$$(A^f(p_0))_{\mu\mu'} = (\phi_\mu, A(p_0)\phi_{\mu'}) \quad (9)$$

où $\{\phi_\mu\}$ est une certaine base orthonormée dans $L^2(\mathbb{R}^3)$. Et les éléments de S sont approchés avec une précision arbitraire par les racines réelles en p_0 de la suite d'équations séculaires:

$$\det[\delta_{\mu\mu'} - (A^f(p_0))_{\mu\mu'}] = 0 \quad 1 \leq \mu, \mu' \leq f, 1 \leq f < +\infty, \quad (10)$$

chaque augmentation du rang f faisant apparaître de nouvelles racines localisées dans un certain voisinage de zéro.

L'approche numérique consistera donc à étudier la convergence des suites de racines $\{p_{0q}^{(f)}\}$ des équations (10) au besoin en utilisant de puissantes méthodes d'accélération de la convergence (Brezinski 1977, ch III).

Par la même occasion, il sera possible de calculer les coordonnées $C_\mu^f(p_{0q}^{(f)})$ des vecteurs propres ϕ_μ^f des opérateurs $A^f(p_{0q}^{(f)})$, correspondant à la valeur propre 1, exprimés dans la base $\{\phi_\mu\}$, compte tenu de la contrainte (8). Les vecteurs d'état $\psi_{p_{0q}^{(f)}}$ qui sont déduits de l'équation (4) ne forment généralement pas un ensemble orthogonal, pour un f donné. Toutefois ces fonctions sont 'quasi-orthogonales' au sens suivant:

$$\lim_{f \rightarrow +\infty} (\psi_{p_{0q}^{(f)}}^f, \psi_{p_{0q'}^{(f)}}^f) = \delta_{qq'}. \quad (11)$$

4. Le 'bon choix' de la base: la base Coulombienne Sturmienne

Il reste à sélectionner une base $\{\phi_\mu\}$ aisément manipulable dans l'exécution des calculs correspondant à un échantillonnage varié d'interactions V . Il semble à l'expérience que la base 'Coulombienne Sturmienne' est la mieux adaptée, c'est-à-dire l'ensemble des fonctions

$$\phi_{klm}(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{2} p_0)(p_0^2 + p^2)^{1/2} \psi_{klm}(\mathbf{r}),$$

satisfaisant à l'équation:

$$\left(I - (p_0^2 + p^2)^{-1/2} \frac{2p_0 \hbar(k+l+1)}{r} (p_0^2 + p^2)^{-1/2} \right) \phi_{klm}(\mathbf{r}) = 0 \quad (12)$$

ou, ce qui revient au même:

$$(p_0^2 + p^2)\psi_{klm}(\mathbf{r}) = [2p_0\hbar(k+l+1)/r]\psi_{klm}(\mathbf{r}). \quad (12)'$$

Les fonctions $\phi_{klm}(\mathbf{r})$ sont justement vecteurs propres de l'opérateur $A(p_0)$ construit à l'aide du potentiel Coulombien $V(\mathbf{r}) = -g/r$, la condition de 'quantification' de l'énergie (6) étant remplacée ici par la 'quantification' de la constante de couplage:

$$g = (p_0\hbar/m)(k+l+1). \quad (13)$$

Les entiers k, l, m peuvent prendre les valeurs suivantes:

$$0 \leq k < +\infty, \quad 0 \leq l < +\infty, \quad |m| \leq l \quad (14)$$

(k est relié au nombre quantique principal n par la relation $n = k + l + 1$).

Par la suite, l'indice μ signifiera exclusivement un triplet d'indices (k, l, m).

Les fonctions ψ_μ , quant à elles, ont une expression familière:

$$\psi_{klm}(\mathbf{r}) = N_{kl}(2p_0/\hbar)^{l+3/2}r^l e^{-(p_0/\hbar)r} L_k^{2l+1}(2p_0r/\hbar) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (15)$$

où les Y_{lm} sont les harmoniques sphériques normalisées à l'unité (Edmonds 1957, p 21) et les L_k^{2l+1} sont les polynômes de Laguerre généralisés (Magnus *et al* 1966, § 5.5).

Le système des vecteurs ϕ_μ est complet du fait de la nature spécifique de l'opérateur $A(p_0)$ apparaissant dans l'équation (12) et les constantes N_{kl} sont choisies (à un facteur de phase près) de telle sorte que le système en question soit orthonormé:

$$N_{kl} = \frac{(-1)^k}{\sqrt{2}} \left(\frac{k!}{\Gamma(k+2l+2)(k+l+1)} \right)^{1/2}. \quad (16)$$

Autrement dit:

$$\delta_{\mu\mu'} = (\phi_\mu, \phi_{\mu'}) = \left(\psi_\mu, \frac{p_0^2 + p^2}{2p_0^2} \psi_{\mu'} \right) = \left(\psi_\mu, \frac{\hbar}{p_0} \frac{k+l+1}{r} \psi_{\mu'} \right). \quad (17)$$

On constate alors le fait remarquable:

$$\|\psi_\mu\|^2 = 1. \quad (18)$$

Ce qui implique une sorte de théorème du Viriel pour les 'états Sturmien's':

$$(\psi_\mu, p^2 \psi_\mu) = p_0^2, \quad \left(\psi_\mu, \frac{1}{r} \psi_\mu \right) = \frac{p_0}{\hbar(k+l+1)}. \quad (19)$$

Nous donnons en annexe 1 l'expression générale du produit scalaire $(\psi_{\mu'}, \psi_\mu)$.

Revenant à notre motivation initiale, calculer les éléments de matrice de l'opérateur $A(p_0)$ par rapport à la base particulière ci-dessus revient à la détermination, plus ou moins aisée selon les cas, des éléments de matrice de l'interaction V par rapport aux fonctions ψ_μ .

En effet, une simple manipulation utilisant l'hermiticité de l'opérateur $(p_0^2 + p^2)^{1/2}$ montre que:

$$\begin{aligned}
 (\phi_\mu, A(p_0)\phi_{\mu'}) &= -(m/p_0^2)(\psi_\mu, V\psi_{\mu'}) \\
 &= N_{kl}N_{k'l'} \int_0^{+\infty} d\rho \rho^{l+l'+2} e^{-\rho} L_k^{2l+1}(\rho) L_{k'}^{2l'+1}(\rho) \\
 &\quad \times \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \left(-\frac{m}{p_0^2} V\left(\frac{\hbar}{2p_0}\rho, \theta, \varphi\right) \right).
 \end{aligned} \tag{20}$$

5. Tests de la methode Sturmienne

Le problème de la détermination des états liés pour certains potentiels attractifs a déjà été abordé selon une autre approche très analogue à celle qui vient d'être présentée. Nous y avons utilisé le fait, remarquable en lui-même, que l'espace des ϕ est isomorphe par une transformation de 'Fourier-Fock' \mathcal{F}_{p_0} à $L^2(\text{SU}(2))$ (Fock 1935, Gazeau 1978, non publiée, Gazeau 1979). Les harmoniques hypersphériques $Y_{nlm}(\xi)$, $\xi \in S^3 \approx \text{SU}(2)$, correspondent par cet isomorphisme aux fonctions ϕ_{klm} , $k = n - l - 1$, décrites dans le paragraphe précédent. L'intérêt d'utiliser la représentation $L^2(\text{SU}(2))$ réside essentiellement dans la possibilité de dévoiler aisément la structure algébrique de l'opérateur $A(p_0)$ en termes de théorie des groupes: plus exactement, nous explicitons son correspondant $\mathcal{F}_{p_0} A(p_0) \mathcal{F}_{p_0}^{-1}$ agissant sur $L^2(\text{SU}(2))$ comme 'superposition linéaire' d'opérateurs de représentation d'un certain groupe, ce qui est, en langage de mathématiciens, la manifestation d'une propriété de 'complétude'.

Toutefois, nous renvoyons le lecteur intéressé aux publications de l'auteur et de ses collaborateurs citées en référence. L'utilisateur désireux d'aller au plus pressé numériquement pourra exploiter certains résultats de ces divers travaux (où à $A(p_0)$ correspond soit νN^{-1} (Gazeau 1978, non publiée, Gazeau 1979), soit $\nu \Sigma$ (Gazeau et Maquet 1979), soit νA_s (Dumont-Lepage *et al* 1980)).

C'est donc en suivant la voie Sturmienne que le potentiel de Yukawa $-g e^{-\mu r}/r$ a été étudié par Gazeau et Maquet (1979), et des résultats extrêmement précis (la convergence étant ici très rapide) ont été obtenus pour différentes valeurs du moment angulaire l et du paramètre type du problème: $K = mg/\mu \hbar^2$. Dans un autre travail (Dumont-Lepage *et al* 1980), les énergies des états liés dans des potentiels puissances inverses de r :

$$V_\alpha(r) = -gr^{-\alpha}, \quad \alpha > 0,$$

ont été obtenues pour différentes valeurs de l , du paramètre $K = 2mg\hbar^{-2}$ et pour α variant dans le domaine de valeurs $0 < \alpha < 2$, domaine pour lequel V a la propriété $R + L_\epsilon^\infty$ (Simon 1971a). La convergence est très bonne dans l'intervalle $0 < \alpha < \frac{3}{2}$ et de plus en plus lente lorsque α s'approche de la borne supérieure 2, ce qui nécessite l'emploi de méthodes d'accélération de la convergence (Brezinski 1977, ch III).

Par la suite (Dumont-Lepage et Gazeau 1979, non publiée), les énergies des états liés pour les potentiels à deux centres:

$$V(\mathbf{r}) = -g_1/r - g_2/|\mathbf{r} - \mathbf{a}|$$

ont été étudiées en fonction de g_1/g_2 et de $|a|$, sans qu'il se pose de problème particulier concernant la convergence.

L'extension de la méthode Sturmienne à des potentiels dont l'expression analytique est moins triviale peut rendre le calcul de l'élément de matrice $(\psi_\mu, V\psi_\mu)$ déduit de l'équation (20) assez inextricable. Toutefois, la connaissance de ce dernier pour le potentiel de Yukawa $e^{-\mu r}/r$ (Gazeau et Maquet 1979) comme pour le 'potentiel' e^{ikr}/r (Gazeau 1978, non publiée) permet de le calculer pour des potentiels dont l'original de Laplace ou la transformée de Fourier sont connus.

6. Extension de la méthode Sturmienne à des potentiels qui ne possèdent pas la propriété $R + L_\epsilon^\infty$

6.1. Le cas limite 'centrifuge' r^{-2}

Supposons que l'interaction V ait le comportement suivant à l'origine:

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = c \quad (\forall \theta, \varphi). \tag{21}$$

Nous poserons:

$$l(l+1) + 2mc/\hbar^2 = \lambda(\lambda+1) \tag{22}$$

en imposant la condition: $\lambda > -\frac{1}{2}$ pour tout $l \geq 0$, c'est-à-dire:

$$c > -\frac{1}{4}(\hbar^2/2m). \tag{23}$$

On peut alors montrer que l'opérateur Sturmien modifié:

$$A(p_0; c) = -(p_0^2 + p^2 + 2mc/r^2)^{-1/2} 2m(V - c/r^2)(p_0^2 + p^2 + 2mc/r^2)^{-1/2} \tag{24}$$

reste compact si $V - c/r^2$ est dans $R + L_\epsilon^\infty$. La technique d'approximation par opérateurs de rang fini est encore valide. Toutefois, pour qu'elle soit exécutable en pratique, c'est-à-dire pour que l'on obtienne une relation analogue à l'équation (20), il est nécessaire de remplacer la base Coulombienne Sturmienne $\{\phi_\mu\} \equiv \{\phi_{klm}\}$ par la suivante:

$$\phi_{\lambda;\mu}(r) = (1/\sqrt{2} p_0)(p_0^2 + p^2 + 2mc/r^2)^{1/2} \psi_{\lambda;\mu}(r),$$

où:

$$\psi_{\lambda;\mu}(r) = N_{k\lambda} (2p_0/\hbar)^{\lambda+3/2} r^\lambda e^{-(p_0/\hbar)r} L_k^{2\lambda+1}(2p_0 r/\hbar) Y_{lm}(\hat{r}) \tag{25}$$

où $N_{k\lambda}$ se déduit de N_{kl} par le remplacement de l par λ dans l'équation (16).

Remarquons aussi que pour des potentiels centraux, pour une valeur de (l, m) donnée, les propriétés d'analyticité en l des éléments de matrice (20) permettent de les prolonger naturellement dans le plan complexe (en remplaçant l par λ) en dehors des pôles $\lambda = -\frac{1}{2}, -1, -\frac{3}{2}, \dots$. Toutefois, il faudra s'astreindre à conserver la compacité de l'opérateur $A_\lambda(p_0)$ dont les éléments de matrice sont:

$$(A_\lambda(p_0))_{kk'} = N_{k\lambda} N_{k'\lambda} \times \int_0^{+\infty} d\rho \rho^{2\lambda+2} e^{-\rho} L_k^{2\lambda+1}(\rho) L_{k'}^{2\lambda+1}(\rho) \left(-\frac{m}{p_0^2} V\left(\frac{\hbar\rho}{2p_0}\right) + \frac{4mc}{\hbar^2 \rho^2} \right). \tag{26}$$

L'opérateur $A_\lambda(p_0)$ agit sur l'espace de Hilbert des fonctions de carré intégrable sur l'intervalle $[0, +\infty[$ pour la mesure $d\mu(r) = r^2 dr$.

6.2. Potentiels de confinement

Supposons que le potentiel $V(r)$ ait, en plus du comportement à l'origine (21), le comportement suivant à l'infini:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} r^{-\alpha} V(r) = g > 0, \quad \forall \theta, \varphi, \quad (27)$$

pour un certain $\alpha > 0$.

Effectuons le changement de variable:

$$r' = r^{(\alpha+2)/2}, \quad (28)$$

Alors, il est prouvé (Gazeau 1980) qu'il existe une transformation exprimant une certaine équivalence entre le problème de l'évaluation des valeurs propres $E > 0$ de l'équation de Schroedinger:

$$(p^2/2m + V(r) - E)\psi(r) = 0, \quad (29)$$

et la résolution d'une équation de Schroedinger duale, en la variable $r' \equiv (r', \theta, \varphi)$:

$$(p'^2/2m + V'(r') - E')\psi'(r') = 0, \quad (30)$$

où on impose à la 'valeur propre' $E' < 0$ d'être égale à:

$$E' = -[2/(2+\alpha)]^2 g. \quad (31)$$

La nouvelle 'fonction d'onde' ψ' est définie par:

$$\psi'(r') = [2/(2+\alpha)]^{1/2} r'^{-\alpha/2(2+\alpha)} \psi(r). \quad (32)$$

Le nouveau 'potentiel' V' est, quant à lui, défini par:

$$V'(r') = \frac{C'}{r'^2} + \left(\frac{2}{2+\alpha}\right)^2 \left(r'^{-2\alpha/(2+\alpha)} [V(r'^{2/(2+\alpha)}, \theta, \varphi) - E] - g - \frac{c}{r'^2}\right), \quad (33)$$

où C' est un opérateur agissant sur la partie angulaire:

$$C' = \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ (L^2 - \frac{1}{4}) \left[1 - \left(\frac{2}{2+\alpha}\right)^2 \right] + \frac{2mc}{\hbar^2} \left(\frac{2}{2+\alpha}\right)^2 \right\}. \quad (34)$$

L^2 est l'opérateur de Casimir du groupe $O(3)$, de vecteurs propres $\{Y_{lm}\}$ correspondant à la valeur propre $-l(l+1)$.

Introduisant les opérateurs Λ^2 et Λ'^2 respectivement de valeurs propres $-\lambda(\lambda+1)$ et $-\lambda'(\lambda'+1)$:

$$\Lambda^2 = L^2 - 2mc/\hbar^2, \quad \Lambda'^2 = L^2 - 2mC'/\hbar^2,$$

on a la relation:

$$(\Lambda'^2 - \frac{1}{4}) = [2/(2+\alpha)]^2 (\Lambda^2 - \frac{1}{4}) \quad (35a)$$

ou encore:

$$(\lambda' + \frac{1}{2}) = [2/(2+\alpha)](\lambda + \frac{1}{2}). \quad (35b)$$

Le comportement de V' à l'origine et à l'infini:

$$\lim_{r' \rightarrow 0} r'^2 V'(r') = C', \quad \lim_{r' \rightarrow +\infty} V'(r') = 0, \quad (36)$$

offre maintenant une possibilité d'utiliser la technique Sturmienne. Si le potentiel V est de telle sorte que $V' - C'r'^{-2}$ possède la propriété $R + L_e^\infty$ (en tant que fonction de r'), et si le spectre de $-\Lambda^2$ est strictement minoré par $-\frac{1}{4}$ ($\Leftrightarrow \lambda' > -\frac{1}{2}$), alors l'opérateur $A(p'_0; C')$, $p'_0/2m = [2/(2 + \alpha)]^2 g$, défini ci-dessous est compact.

$$\begin{aligned} A(p'_0, C') = & -(p'_0{}^2 + p'^2 + 2mC'/r'^2)^{-1/2} \\ & \times 2m \left[\left(\frac{2}{2 + \alpha} \right)^2 \left(r'^{-2\alpha/(2+\alpha)} [V(r'^{2/(2+\alpha)}, \theta, \varphi) - E] - g - \frac{c}{r'^2} \right) \right] \\ & \times (p'_0{}^2 + p'^2 + 2mC'/r'^2)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (37)$$

Il ne reste plus qu'à mettre en route l'approximation de $A(p'_0; C')$ par des opérateurs de rang fini en étudiant la convergence des racines en E des équations séculaires successives. La base utilisée est évidemment l'ensemble des fonctions $\phi_{\lambda'; klm}(r')$ du paragraphe précédent (équation (25)), de manière à ce que la relation (20) soit utilisable dans le calcul des éléments de matrice.

A titre d'exemple, considérons le potentiel de confinement suivant (Quigg et Rosner 1979, Gazeau 1980):

$$V(r) = gr^\alpha + cr^{-2}. \quad (38)$$

Il lui correspond par la relation (33) le potentiel:

$$V'(r') = -[2/(2 + \alpha)]^2 E r'^{-2\alpha/(2+\alpha)} + C' r'^{-2}. \quad (39)$$

Pour α variant entre 0 et $+\infty$, le nouvel exposant $2\alpha/(\alpha + 2)$ varie entre 0 et 2. Nous poserons

$$s = 2\alpha/(2 + \alpha) - 2 = -4/(2 + \alpha), \quad 0 < \alpha < +\infty \Leftrightarrow -2 < s < 0.$$

Pour une certaine valeur l du moment angulaire, c'est-à-dire à λ fixé par l'équation (22), donc à λ' fixé par l'équation (35b), le q -ième niveau d'énergie $E_q(s; l)$, d'une particule dans le potentiel de confinement V se déduit de l'équation (26):

$$E_q(s; l) = 4g \left(\frac{\hbar}{(2mg)^{1/2} |s|} \right)^{s+2} \frac{1}{\eta_q(s; \lambda')}. \quad (40)$$

$\eta_q(s; \lambda')$ est la q -ième valeur propre de la matrice numérique $\mathcal{E}(s, \lambda')$ dont l'expression est donnée en annexe 2. Cette matrice est compacte pour $-2 < s < 0$ et $\lambda' > -\frac{1}{2}$. L'approximation par des matrices finies permet d'en déterminer les valeurs propres avec une précision arbitraire (Dumont-Lepage *et al* 1980).

7. Extension au problème à plusieurs corps

Nous allons prendre comme indication l'exemple le plus simple, celui du problème aux valeurs propres de l'énergie pour un système de deux particules interagissant entre elles

et avec un champ extérieur:

$(H - E)\psi = 0$, où:

$$H = (p_1^2/2m_1 + V_1(\mathbf{r}_1)) \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes (p_2^2/2m_2 + V_2(\mathbf{r}_2)) + V_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

$$\psi \in L^2(\mathbb{R}^6) \approx \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \quad \mathcal{H}_i \approx L^2(\mathbb{R}^3). \quad (41)$$

$\mathbb{1}_i$ désigne ici l'opérateur identité sur \mathcal{H}_i . Posons:

$$E = E_1 + E_2 \quad \text{et} \quad E_i = -p_{0i}^2/2m_i, \quad i = 1, 2.$$

La question qui se pose naturellement est la suivante: pour quelle classe de potentiels V_1, V_2, V_{12} , est-il légitime d'aborder le problème (41) via l'équation suivante?

$$\mathcal{O}(p_{01}, p_{02})\phi = 0, \quad (42)$$

où:

$$\phi = \left(\prod_{i=1}^2 \frac{(p_{0i}^2 + p_i^2)^{1/2}}{\sqrt{2} p_{0i}} \right) \psi,$$

$$\mathcal{O}(p_{01}, p_{02}) = (\mathbb{1}_1 - A_1(p_{01})) \otimes (p_{02}^2 + p_2^2)^{-1} 2m_2 + 2m_1(p_{01}^2 + p_1^2)^{-1} \otimes (\mathbb{1}_2 - A_2(p_{02}))$$

$$+ \left(\prod_{i=1}^2 (p_{0i}^2 + p_i^2)^{-1/2} \right) 4m_1 m_2 V_{12} \left(\prod_{i=1}^2 (p_{0i}^2 + p_i^2)^{-1/2} \right),$$

avec:

$$A_i(p_{0i}) = -(p_{0i}^2 + p_i^2)^{-1/2} 2m_i V_i(p_{0i}^2 + p_i^2)^{-1/2}.$$

Ou, du moins, est-il de bon droit (cela serait déjà d'une grande importance) d'effectuer la détermination du spectre discret de H via l'étude de la convergence des racines en p_{01}, p_{02} , de la suite d'équations séculaires ci dessous?

$$\det[\mathcal{O}^f(p_{01}, p_{02})] = 0, \quad (43)$$

où

$$(\mathcal{O}^f(p_{01}, p_{02}))_{\sigma\sigma'} = (\mathcal{P}_\sigma\{\phi_{\mu_1} \otimes \phi_{\mu_2}\}, \mathcal{O}(p_{01}, p_{02})\mathcal{P}_{\sigma'}\{\phi_{\mu'_1} \otimes \phi_{\mu'_2}\}),$$

$$\sigma, \sigma' \leq f \leq f_1 f_2, \quad \mu_i, \mu'_i \leq f_i,$$

$\{\phi_{\mu_i}\}$ étant la base Coulombienne Sturmienne du § 4 et \mathcal{P}_σ une projection dans un secteur de l'espace engendré par les fonctions de base $\{\phi_{\mu_1} \otimes \phi_{\mu_2}\}_{\mu_i \leq f_i}$ correspondant à une éventuelle symétrie σ adaptée au problème physique sous-jacent (symétrie d'échange en particulier).

A l'évidence, l'opérateur $\mathcal{O}(p_{01}, p_{02})$ n'est pas compact. Nous devons nous attendre à ce qu'il soit toutefois borné pour des interactions V_1, V_2, V_{12} 'raisonnables physiquement'. C'est le cas, par exemple, lorsque ces potentiels satisfont à la condition, $R + L^\infty$ (Simon 1971a, ch II).

D'autre part, et c'est la différence essentielle avec le problème pour une particule, les équations (43) conduisent généralement à des courbes dans le plan (p_{01}, p_{02}) . Aussi est-il nécessaire d'adjoindre la condition supplémentaire à chaque ordre f d'approximation:

$$d\rho_0/d\theta_0 = 0, \quad 0 < \theta_0 < \pi/2. \quad (44)$$

ρ_0, θ_0 sont les coordonnées polaires du couple $(p_{01}/\sqrt{2m_1}, p_{02}/\sqrt{2m_2})$.

La condition (44), associée à l'équation (43), donne les valeurs optimales de l'énergie $E = -\rho_0^2$ à l'approximation considérée.

A titre d'exemple, considérons le cas le plus simple qui puisse se présenter, l'atome d'Hélium traité à la première approximation par des matrices de rang fini. Il s'agit d'annuler le premier élément de matrice de l'opérateur $\mathcal{C}(p_{01}, p_{02})$, pour

$$V_i = -2r_i^{-1}, \quad V_{12} = |r_1 - r_2|^{-1}$$

et $m_1 = m_2 = \hbar = 1$ (unités atomiques).

$(\phi_{000}(1)\phi_{000}(2), \mathcal{C}(p_{01}, p_{02})\phi_{000}(1)\phi_{000}(2))$

$$= \left(1 - \frac{2}{p_{01}}\right) \frac{1}{p_{02}^2} + \left(1 - \frac{2}{p_{02}}\right) \frac{1}{p_{01}^2} + \left(\frac{(p_{01} + p_{02})^2 + p_{01}p_{02}}{p_{01}p_{02}(p_{01} + p_{02})^3}\right) = 0. \quad (45)$$

La solution symétrique ($X = p_{01} = p_{02}$) est la seule pour laquelle la condition (44) est satisfaite. On obtient:

$$X = \frac{27}{16} = 1.6875.$$

Il lui correspond l'énergie:

$$E = -\frac{1}{2}X^2 = -2.8476.$$

La valeur ci-dessus représente une très bonne approximation de l'énergie de l'état fondamental de l'Hélium, qui se situe entre -2.90374 et -2.90372 (Weinstein et Stenger 1972, p 104).

En fait, elle fut déjà mise en évidence par le biais de méthodes purement variationnelles (Bethe et Salpeter 1957, p 149, Löwdin et Shull 1956, Holøien 1956).

Pour traiter les approximations suivantes, ces derniers auteurs employaient un ensemble complet de fonctions très apparenté à celui que nous proposons ici, toutefois mal adapté pour deux raisons. Les polynômes de Laguerre L_k^α mis en jeu étaient ceux pour lesquels $\alpha = 2l + 2$ et non $2l + 1$, ce qui écarte d'emblée la propriété d'orthogonalité (17) qui est pour nous essentielle. De plus, leur paramètre η ('constante d'échelle'), jouant le rôle de nos variables p_{01} et p_{02} , était le même pour chaque particule, ce qui est une considérable restriction par rapport à la liberté que nous avons de rechercher les solutions dans le plan (p_{01}, p_{02}) d'un couple d'équations algébriques et la possibilité d'interpréter physiquement *chacune* des composantes p_{01} et p_{02} pour une solution donnée.

L'auteur, en collaboration avec A Maquet, espère présenter très prochainement des résultats plus complets venant étayer une méthode qui s'avère d'ores et déjà fort prometteuse dans le traitement de problèmes de spectroscopie atomique et moléculaire, très classiques certes, mais où il est toujours d'actualité d'avoir par exemple à sa disposition des solutions analytiques approchées. Or, c'est tout à l'avantage de la méthode Sturmienne de les faire apparaître naturellement.

Si l'on considère enfin l'étendue du champ d'application d'une telle méthode, il est permis de se demander si elle n'est qu'une technique numérique de plus, à ajouter à un matériel déjà très sophistiqué et, dans des cas précis, souvent plus efficace, ou bien si elle n'est pas encore une manifestation du caractère fondamental en Physique du potentiel Coulombien.

Annexe 1. Produit scalaire $(\psi_{\mu'}, \psi_{\mu})$

$$(\psi_{\mu'}, \psi_{\mu}) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \left(\frac{1}{2} A_{kl} \delta_{k'k-1} + \delta_{kk'} + \frac{1}{2} A_{k'l} \delta_{k'k+1} \right)$$

$$A_{kl} \equiv \left(\frac{k(k+2l+1)}{(k+l+1)(k+l)} \right)^{1/2}.$$

De même, l'expression du produit scalaire $(\psi_{\lambda;\mu'}, \psi_{\lambda;\mu})$ où $\psi_{\lambda;\mu}$ est définie par l'équation (25), se déduit de l'expression précédente par la simple substitution:

$$A_{kl}, A_{k'l} \rightarrow A_{k\lambda}, A_{k'\lambda}.$$

Annexe 2. Matrice $\mathcal{E}(s; \lambda)$

Les éléments de cette matrice sont définis par:

$$(\mathcal{E}(s; \lambda))_{kk'} = 2N_{k\lambda} N_{k'\lambda} \int_0^{+\infty} d\rho e^{-\rho} L_k^{2\lambda+1}(\rho) L_{k'}^{2\lambda+1}(\rho) \rho^{2\lambda-s}.$$

Ils ont pour expression:

$$(\mathcal{E}(s; \lambda))_{kk'} = (-1)^{k+k'} \left(\frac{k!k'!}{(k+\lambda+1)(k'+\lambda+1)} \right)^{1/2}$$

$$\times [\Gamma(k+2\lambda+2)\Gamma(k'+2\lambda+2)]^{-1/2} \Gamma(2\lambda+1-s)$$

$$\times \sum_{\sigma=0}^{k \wedge k'} \frac{(2\lambda+1-s)_{\sigma} (s+1)_{k-\sigma} (s+1)_{k'-\sigma}}{\sigma! (k-\sigma)! (k'-\sigma)!},$$

$$k_{\geq} \equiv \sup_{\inf} (k, k'), \quad (a)_n \equiv \Gamma(a+n)/\Gamma(a).$$

References

- Bang J et Gareev F A 1978 *Physica Scr.* **18** 297
 Bethe H A et Salpeter E E 1957 *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Berlin: Springer Verlag)
 Brezinski C 1977 *Accélération de la Convergence en Analyse Numérique* (Berlin: Springer Verlag)
 Dumont-Lepage M C, Gani N, Gazeau J P et Ronveaux A 1980 *J. Phys. A: Math. Gen.* **13** 1243
 Edmonds A R 1957 *Angular Momentum in Quantum Mechanics* (Princeton, NJ: Princeton University Press)
 Epstein P S 1926 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **12** 630
 Fock W 1935 *Z. Phys.* **98** 145
 Gazeau J P 1978 *Thèse, Université Paris 6* (non publiée)
 — 1979 *Lett. Math. Phys.* **3** 385
 — 1980 *Phys. Lett. A* **75** 159
 Gazeau J P et Maquet A 1979 *Phys. Rev. A* **20** 727
 Holøien E 1956 *Phys. Rev.* **104** 1301
 Löwdin P O et Shull H 1956 *Phys. Rev.* **101** 1730
 Magnus W, Oberhettinger F et Soni R P 1966 *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics* (Berlin: Springer Verlag)
 Monkhorst H J et Jeriorski B 1979 *J. Chem. Phys.* **71** 5268
 Quigg C et Rosner L J 1979 *Phys. Rep.* **56** 167
 Reed H et Simon B 1978 *Methods of Modern Mathematical Physics* vol I, IV (New York: Academic)

- Rotenberg M 1962 *Ann. Phys.* **19** 262
Scadron M, Weinberg S et Wright J 1964 *Phys. Rev. B* **135** 202
Schwinger J 1961 *Proc. Natn. Acad. Sci. USA* **47** 122
Simon B 1971a *Quantum Mechanics for Hamiltonians Defined as Quadratic Forms* (Princeton, NJ: Princeton University Press)
—— 1971b *Commun. Math. Phys.* **21** 192
Weinstein A et Stenger W 1972 *Methods of Intermediate Problems for Eigenvalues* (New York: Academic)