

## Extension of the Kramers recurrence for mean power calculations for any $r$ for atomic hydrogen in classical mechanics

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

1987 J. Phys. A: Math. Gen. 20 2821

(<http://iopscience.iop.org/0305-4470/20/10/025>)

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 19:41

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

## Extension de la récurrence de Kramers au calcul des moyennes temporelles des puissances de $r$ , pour l'atome d'hydrogène en mécanique classique

A A Levy

Département de Physique, Université Paul-Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, France

Reçu le 10 février 1986, présentation définitive le 15 décembre 1986

**Résumé.** Cet article présente une extension (ou, plus exactement une préfiguration, dans le traitement classique) de la récurrence de Kramers qui est utilisée pour le calcul des moyennes des puissances de  $r$ , pour l'atome d'hydrogène en théorie de Schrödinger. En outre, des calculs exacts et directs pour toute puissance sont présentés pour la première fois.

**Abstract.** This paper presents an extension (or more exactly a prefiguration in classical treatment) of the Kramers recurrence used in quantum mechanics for mean power calculations of hydrogenoid atoms. Moreover, exact direct calculations for any power of  $r$  are dealt with for the first time.

### 1. Introduction

Le calcul des moyennes des puissances quelconques de  $r$ ,  $\langle nlm|r^s|nlm\rangle$ , pour les états stationnaires de l'atome d'hydrogène est un problème de base de la mécanique quantique fondamentale. Les auteurs [1] ne donnent en général des résultats que pour les toutes premières puissances  $s = -2, -1, 1, 2$ .

Pour un calcul analytique du cas général [2] on est conduit à des formules compliquées, utilisant notamment [3] le formulaire des intégrales de Gordon [4]. D'où l'idée de Kramers [5] de procéder par récurrence, en utilisant les propriétés [6] de l'équation radiale de Schrödinger. Par ailleurs, en considérant le traitement classique du problème [7], on est conduit en toute analogie au calcul des moyennes temporelles  $\langle\langle r^s \rangle\rangle = (1/T) \oint r^s(t) dt$  sur les orbites elliptiques de l'électron, parcourues périodiquement, à la période  $T$ . Là aussi, on ne dispose dans la littérature que des quelques premières moyennes. D'où l'idée présentée dans ce travail de procéder en ce domaine selon une récurrence qui préfigurerait donc, en mécanique classique, celle que Kramers a construite dans le traitement quantique.

L'intérêt de cette approche n'est pas tant au niveau des résultats (encore que moyennant une représentation intégrale des polynômes de Legendre, nous avons pu calculer en toute généralité des moyennes temporelles dont Hylleraas [7], Brillouin [7] n'ont donné que les quelques premières) qu'au niveau de la méthodologie générale qui exigeait en effet qu'un préalable classique soit élaboré, dont la récurrence de Kramers n'est plus alors que le pendant quantique. Nous présentons, au § 2, une construction personnelle de la récurrence de Kramers, fondée sur des bases purement opératoires (utilisant les propriétés des commutateurs et le concept de 'dérivée

quantique') de façon à pouvoir construire, au § 4, en toute similarité, un traitement classique, fondé, lui, sur la notion homologue pré-quantique, de crochet de Poisson. Aux §§ 3, 5, enfin, un calcul inédit, direct, généralisant celui de Brillouin permet de connaître une moyenne temporelle «*r*» quelconque.

**2. Recurrence de Kramers en théorie de Schrödinger**

Considérant une particule de masse *m* dans le champ central d'énergie potentielle *U(r)*, l'Hamiltonien s'écrit  $\hat{H} = \hat{T} + U$ , avec  $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ ,  $\hat{p}^2 = \hat{p}_r^2 + \hat{L}^2/r^2$ ,  $\hat{p}_r = -i\hbar (\partial/\partial r + 1/r)$ ,  $\hat{L}$  désignant l'opérateur de moment cinétique.

Avec  $\hat{T}_r = \hat{p}_r^2/2m$  et  $\hat{U}_c = \hat{L}^2/2mr^2$ , on réécrit  $\hat{H} = \hat{T}_r + \hat{U}_{\text{eff}}$ , où  $\hat{U}_{\text{eff}} = U + \hat{U}_c$  est l'énergie potentielle 'effective'. On pourra dès lors exprimer l'énergie cinétique radiale,  $\hat{T}_r$ , sous la forme

$$\hat{T}_r = \hat{H} - \hat{U}_{\text{eff}}. \tag{1}$$

Utilisant le crochet, quantique, de Poisson, de deux grandeurs *f* et *g*, (auxquelles sont associés les opérateurs  $\hat{F}$  et  $\hat{G}$ ), défini depuis le commutateur de  $\hat{F}$  et  $\hat{G}$  par

$$\{f, g\}_Q = (i/\hbar)[\hat{F}, \hat{G}] \tag{2}$$

ainsi que la notion de 'dérivée quantique' d'une grandeur *f*:

$$(d/dt)_Q f = \{\hat{H}, \hat{F}\}_Q + \partial_t f \tag{3}$$

on formera celle de la grandeur particulière.

$$f = \frac{1}{2}[\hat{p}_r \hat{r}^{s+1} - \frac{1}{2}i\hbar(s+1)\hat{r}^s]. \tag{4}$$

Pour ce calcul on note que pour une fonction quelconque  $\phi(r)$

$$\{\hat{p}_r, \phi(r)\}_Q = (\partial/\partial r)\phi. \tag{5}$$

En particulier

$$\{\hat{p}_r, \hat{r}^{s+1}\}_Q = (s+1)\hat{r}^s. \tag{6}$$

Ce qui permet d'écrire la forme 'normale'

$$\hat{r}^{s+1}\hat{p}_r = \hat{p}_r\hat{r}^{s+1} + i\hbar(s+1)\hat{r}^s. \tag{7}$$

De sorte que si on prémultiplie par  $\hat{p}_r$ , on reconstituera  $\hat{p}_r^2$ , c'ad  $\hat{T}_r$ , que l'on pourra remplacer par l'expression (1).

On obtient en final en terme de  $\hat{T}_r$  et  $\hat{U}_{\text{eff}}$ :

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_Q f = (s+1)\hat{T}_r\hat{r}^s - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\hat{U}_{\text{eff}}\right)\hat{r}^{s+1} + \frac{\hbar^2}{8m}s(s^2-1)\hat{r}^{s-2}. \tag{8}$$

Ou encore, en terme de  $\hat{H}$  et  $\hat{U}_{\text{eff}}$ :

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_Q f = (s+1)\hat{H}\hat{r}^s - \frac{1}{2}\left(\left(r\frac{\partial}{\partial r}\hat{U}_{\text{eff}}\right) + 2(s+1)\hat{U}_{\text{eff}}\right)\hat{r}^s + \frac{\hbar^2}{8m}s(s^2-1)\hat{r}^{s-2}. \tag{9}$$

On note que  $\hat{U}_c$  est une fonction homogène de degré -2, en *r*, d'où:

$$(r\partial/\partial r)\hat{U}_c + 2(s+1)\hat{U}_c = 2s\hat{U}_c \tag{10}$$

tandis que si  $U$  est homogène de degré  $p$  on aura

$$(r \partial/\partial r)U + 2(s+1)U \equiv (2s+p+2)U. \tag{11}$$

De sorte que l'identité (9) se réécrit, sous l'hypothèse (11),

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_Q f = (s+1)\hat{H}\hat{r}^s - \frac{1}{2}(2s+p+2)U\hat{r}^s - \frac{\hbar^2 s}{2m} \left(\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} - \frac{s^2-1}{4}\right)\hat{r}^{s-2}. \tag{12}$$

Pour le potentiel coulombien  $U = -Ze^2/r$ , on a  $p = -1$  de sorte que l'identité (12) devient en ce cas:

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_Q f = (s+1)\hat{H}\hat{r}^s + \frac{1}{2}Ze^2(2s+1)\hat{r}^{s-1} - \frac{\hbar^2 s}{2m} \left(\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} - \frac{s^2-1}{4}\right)\hat{r}^{s-2}. \tag{13}$$

La recurrence, donnée par Kramers sur la base des propriétés de l'équation radiale de Schrödinger (qui est une équation différentielle) va être obtenue, par nous, sur la base de cette simple identité operatorielle (13). Ce qui nous paraît une meilleure approche à l'économie de pensée: il suffit de prendre les valeurs moyennes des deux membres de (13) sur les états stationnaires  $|nlm\rangle$  de l'atome d'hydrogène.

Il vient, avec

$$a_z = \frac{a_0}{Z} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad E_n = -\frac{1}{2} \frac{mZ^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad a_n = n^2 a_z$$

$$0 = (s+1) \left\langle \left(\frac{r}{a_n}\right)^s \right\rangle - (2s+1) \left\langle \left(\frac{r}{a_n}\right)^{s-1} \right\rangle + s \left\langle \frac{[l(l+1) - (s^2-1)/4]^{1/2}}{n} \right\rangle^2 \left\langle \left(\frac{r}{a_n}\right)^{s-2} \right\rangle. \tag{14}$$

### 3. Premiers résultats en théorie de Schrödinger

Faisant  $s=0$ , on tire de la recurrence elle-même:

$$\langle 1/r \rangle = 1/a_n. \tag{15}$$

Résultat que l'on aurait pu obtenir en écrivant le théorème du viriel

$$\langle \hat{T} \rangle = -E \quad \text{ou} \quad \langle U \rangle = 2E_n.$$

Par ailleurs considérant la quantité

$$I_s = \frac{1}{(2l+2+s)!} \left\langle \left(\frac{2r}{na_z}\right)^s \right\rangle$$

on a pour elle la recurrence

$$0 = (s+1)(s+2l+2)I_s - 2n(2s+1)I_{s-1} - s(s-2l-1)I_{s-2}.$$

La substitution  $s \rightarrow -s-1$  montre alors que  $I_{-s-3} = I_s$ , autrement dit [2]:

$$\left\langle \left(\frac{r}{na_z}\right)^{-s-3} \right\rangle = \frac{1}{(l-\frac{1}{2}s)(l-\frac{1}{2}s+\frac{1}{2}) \dots (l+\frac{1}{2}s+1)} \left\langle \left(\frac{r}{na_z}\right)^s \right\rangle. \tag{16}$$

Ceci donne en particulier le nouveau résultat

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{na_z(l+\frac{1}{2})} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle.$$

D'où:

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{n^3 a_z^2} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \tag{17}$$

Les deux moyennes (15) et (16) ainsi calculées permettent l'explicitation progressive de la recurrence (14) soit vers le haut ( $s > 0$ ) soit vers le bas ( $s < 0$ ).

D'ailleurs, avec (16), l'explicitation vers le haut, suffit. On a pu obtenir dès lors une série de résultats [1] tirés de la recurrence (14) évitant ainsi les difficultés du calcul direct [2].

Signalons toutefois à cet égard qu'au moyen des intégrales de Gordon [4] nous sommes parvenus [3] à l'expression directe générale très simple:

$$\left\langle \left( \frac{r}{a_z} \right)^s \right\rangle = \frac{(s+1)!}{2^{s+1}} n^{s-1} \sum_{k=0}^{n_r} \frac{1}{k!} C_{s+k+1}^k C_{n_r}^k C_{s+2(l+1)}^{s-k+1} \tag{18}$$

avec  $n_r = n - (l+1)$ .

#### 4. Construction d'une recurrence de type Kramers en traitement classique

Epstein et Epstein [8] se sont contentés de noter que dans la recurrence (14) certains termes étaient dûs à la non commutativité de  $\hat{r}$  et  $\hat{p}_r$ , de sorte qu'en les négligeant, (14) restituait la recurrence classique. Nous pensons qu'au titre de la methodologie générale et pour la manipulation en parallèle des outils mathématiques propres à chacun des domaines classique et quantique on peut, sur le modèle proposé au § 2, construire cette recurrence classique.

A présent donc on utilisera le crochet de Poisson et la formule de dérivation de la mécanique hamiltonienne:

$$\frac{d}{dt} f = \{H, f\} + \partial_t f$$

à comparer à (3), pour l'Hamiltonien

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r) \qquad \text{où } \mathbf{p}^2 = p_r^2 + \mathbf{L}^2/r^2, p_r = m\dot{r} \text{ et } \mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}.$$

Considérant, ici, la simple grandeur  $f = \frac{1}{2} p_r r^{s+1}$ , à comparer à (4), on obtient aisément

$$\frac{d}{dt} f = (s+1) T_r r^s - \frac{1}{2} \left( r \frac{\partial}{\partial r} U_{\text{eff}} \right) r^s$$

à comparer à (8), avec  $T_r = p_r^2/2m$ ,  $U_{\text{eff}} = U + U_c$ ,  $U_c = \mathbf{L}^2/2mr^2$ .  $U_c$  étant homogène de degré  $-2$ , et supposant  $U$  homogène de degré  $p$ , on a

$$\frac{d}{dt} f \equiv (s+1) H r^s - \frac{1}{2} (2s + p + 2) U r^s - (s/2m) \mathbf{L}^2 r^{s-2}$$

à comparer à (12). Si  $U$  est coulombien, on aura en final:

$$\frac{d}{dt} f = (s+1) H r^s + \frac{1}{2} Z e^2 (2s+1) r^{s-1} - (s/2m) \mathbf{L}^2 r^{s-2} \tag{19}$$

à comparer à (13). On isole bien ainsi, en comparant (13) et (19), le terme d'origine spécifiquement quantique qui disparaît dans (19), confirmant la remarque d'Epstein et Epstein. Il suffit ensuite de prendre les moyennes temporelles (sur les orbites elliptiques associées à l'énergie  $E < 0$  et au moment angulaire  $L$ ) des deux membres de cette identité pour obtenir la recurrence cherchée:

$$0 \equiv (s+1)\langle\langle (r/a)^s \rangle\rangle - (2s+1)\langle\langle (r/a)^{s-1} \rangle\rangle + s(b/a)^2\langle\langle (r/a)^{s-2} \rangle\rangle \quad (20)$$

avec pour demi grands axes et excentricité:

$$a = \frac{Ze^2}{2|E|} \quad b = \frac{L}{\sqrt{2mE}}, \quad \varepsilon = \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right)^{1/2}.$$

Sur les orbites quantifiées de Bohr,  $a$  et  $b$  deviennent  $a_n = n^2 a_Z$ ,  $b_{n,n\theta} = n n_\theta a_Z$ , de sorte que (20) devient

$$0 = (s+1)\langle\langle (r/a_n)^s \rangle\rangle - (2s+1)\langle\langle (r/a_n)^{s-1} \rangle\rangle + s(n_\theta/n)^2\langle\langle (r/a_n)^{s-2} \rangle\rangle \quad (21)$$

à comparer à (14), l'absence des termes quantiques étant à présent pleinement justifiée.

### 5. Explicitation de la recurrence classique

De même, avec  $s = 0$ , (20) donne  $\langle\langle 1/r \rangle\rangle = 1/a$ . Egalement, il est aisé d'établir, avec la substitution  $s \rightarrow -s - 1$ , que

$$\langle\langle (r/b)^{-s-3} \rangle\rangle = \langle\langle (r/b)^s \rangle\rangle. \quad (22)$$

De sorte qu'en particulier:  $\langle\langle 1/r^2 \rangle\rangle = 1/b\langle\langle 1/r \rangle\rangle$ , soit donc  $\langle\langle 1/r^2 \rangle\rangle = 1/ab$ .

On dispose ainsi de résultats permettant d'expliciter la recurrence vers le haut ou vers le bas. En fait compte tenu de la recurrence entre polynomes de Legendre [9]

$$0 = (s+1)P_{s+1}(z) - (2s+1)zP_s(z) + sP_{s-1}(z) \quad s > 1$$

on a, en toute généralité:

$$\langle\langle r^s \rangle\rangle = \frac{b^{s+1}}{a} P_{s+1}\left(\frac{a}{b}\right) \quad s = -1, 0, 1, 2, \dots \quad (23)$$

D'où, avec (22):

$$\langle\langle r^{-s} \rangle\rangle = \frac{1}{ab^{s-1}} P_{s-2}\left(\frac{a}{b}\right) \quad s = 2, 3, 4, \dots \quad (24)$$

Avec  $P_0(z) = 1$ ,  $P_1(z) = z$ ,  $P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1)$ , etc, on retrouve immédiatement tous les résultats connus [7] sur les orbites non quantifiées,  $\langle\langle r \rangle\rangle = a(1 + \frac{1}{2}\varepsilon^2)$ ,  $\langle\langle r^2 \rangle\rangle = (1 + \frac{3}{2}\varepsilon^2)a^2$ ,  $\langle\langle 1/r \rangle\rangle = 1/a$ ,  $\langle\langle 1/r^2 \rangle\rangle = 1/ab$ , etc.

### 6. Calcul direct des moyennes (généralisation du calcul de Brillouin)

Avec l'anomalie excentrique  $\Psi$  définissant la représentation paramétrique [10] de l'ellipse de Kepler

$$r = a(1 - \varepsilon \cos \Psi)$$

$$\omega t = \Psi - \varepsilon \sin \Psi$$

on peut écrire, pour  $s > 0$ ,

$$\left\langle\left\langle\left(\frac{r}{a}\right)^s\right\rangle\right\rangle = \frac{1}{2\pi} \oint (1 - \varepsilon \cos \Psi)^{s+1} d\Psi$$

tandis qu'avec l'anomalie vraie [10], qui définit la représentation polaire de l'ellipse

$$p/r = 1 + \varepsilon \cos \theta$$

on peut écrire pour  $s < 0$

$$\left\langle\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle\right\rangle = \frac{1}{2\pi p^{s-2} ab} \int_0^{2\pi} (1 + \varepsilon \cos \theta)^{s-2} d\theta$$

en terme du 'paramètre'  $p = a(1 - \varepsilon^2)$ . Mais alors utilisant la représentation intégrale des polynomes de Legendre [11]

$$\int_0^{2\pi} (a + b \cos x)^n dx = 2\pi (a^2 - b^2)^{n/2} P_n\left(\frac{a}{(a^2 - b^2)^{1/2}}\right) \quad (a^2 < b^2) \quad (25)$$

on obtient immédiatement (23) et (24) qui généralisent les résultats de Brillouin et Hylleraas [7].

## 7. Conclusion

La lacune que présentait l'étude classique de ce problème est désormais comblée. Le rapprochement des deux traitements, classique et quantique, si différents en principe au plan conceptuel et, en pratique, au plan formel, a pu se faire moyennant un formalisme commun. C'est cela qui est important: au delà des manière d'operer, la correspondance profonde de la théorie classique et de la théorie quantique a pu être illustrée.

## References

- [1] Messiah A 1965 *Mécanique Quantique* vol 1 (Paris: Dunod) p 411
- [2] Bockasten K 1974 *Phys. Rev. A* **9** 1087
- [3] Levy A A 1969 *L'approximation Classique en Mécanique Quantique, Publication de l'Institut de Calcul Numérique de Toulouse* 16 p 156
- [4] Landau L D et Lifshitz E M 1966 *Mécanique Quantique* (Moscow: Mir) p 726
- [5] Kramers H A 1951 *Quantum Mechanics* (Amsterdam: North-Holland) p 251
- [6] Constantinescu F 1971 *Problems in Quantum Mechanics* (Oxford: Pergamon) p 82
- [7] Hylleraas E A 1970 *Mathematical Theoretical Physics* vol 2 (New York: Wiley-Interscience) p 251  
Brillouin L 1931 *L'Atome de Bohr* (Paris: PUF) p 294
- [8] Epstein J H et Epstein S T 1962 *Am. J. Phys.* **30** 266
- [9] Lebedev N N 1965 *Special Functions and Their Applications* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall) p 46
- [10] Marion J B 1965 *Classical Dynamics of Particles and Systems* (New York: Academic) p 284, 298
- [11] Gradshteyn I S et Ryzhik I M 1965 *Tables of Integrals, Series and Products* (New York: Academic) p 382