Physica **53** (1971) 154–156 © *North-Holland Publishing Co.*

LETTER TO THE EDITOR

SUR LA COMPLETUDE DE L'ENSEMBLE DES FONCTIONS PROPRES DE L'ATOME D'HYDROGENE RELATIVISTE

A. P. HAUTOT

Université de Liège, Institut de Physique, Sart Tilman, Belgique

Reçu 27 janvier 1971

Résumé

Nous indiquons comment le formalisme quaternionique permet de démontrer simplement que l'ensemble des états propres de l'atome d'hydrogène relativiste est complet. Il semble que cette précision faisait défaut jusqu'à présent.

Synopsis

It is shown how the use of the quaternionic formalism allows to prove that the set of proper states of the relativistic hydrogen atom is complete. It seems that this statement was missing up to now.

Dans un article antérieur[1]), nous avons indiqué une méthode quaternionique de séparation des variables qui s'applique avec succès à des problèmes fort divers. A titre d'example, nous avons examiné le traitement relativiste de l'atome d'hydrogène en montrant de quelle manière l'introduction des quaternions simplifiait considérablement le problème. Dans cet article complémentaire, nous envisageons la possibilité de démontrer que l'ensemble des solutions obtenues par cette méthode est complet. Il importe de noter qu'à notre connaissance, cette précision importante fait défaut dans tous les exposés traditionnels même les plus complets[2]), alors qu'il n'en est rien en théorie non relativiste[3]). Cela est sans doute dû à la difficulté qu'il y aurait à procéder à une telle démonstration dans le formalisme habituel qui est relativement mal adapté à de tels problèmes en théorie de Dirac.

Il convient préalablement de généraliser le théorème de Fourier aux fonctions quaternioniques. Cette généralisation ne pose aucun problème et peut s'énoncer en ces termes:

soit une suite Q_m ($m = 0, 1, 2, \dots$) de quaternions

– à carré intégrable:

$$\int Q_m \overline{Q_m^*} \, dx < \infty$$

– orthonormée:

$$\int Q_m \overline{Q_n^*} \, dx = (Q_m, Q_n) = \delta_{mn}$$

– complète:

$$\int R\,\overline{Q_m^*}\,\mathrm{d}x = 0 \qquad \text{pour tout } m \text{ entraîne} \qquad R = 0.$$

Si toutes ces hypothèses sont remplies, tout quaternion P à carré intégrable peut être développé en série de Fourier

$$P = \sum_0^\infty (P, Q_K)\, Q_K.$$

Lorsqu'on résout le problème relativiste de l'atome d'hydrogène par la méthode quaternionique[1]) on écrit la fonction d'onde sous la forme à variables séparées

$$\psi(r, \theta, \varphi, t) = \Phi_m(\varphi)\, \Theta_{l,m}(\theta)\, R_{n,l}(r).$$

Il est facile de voir que les suites de quaternions Φ_m et $\Theta_{l,m}$ sont des suites orthonormées (c'est évident pour Φ_m, cela a été a été démontré dans l'article déjà cité pour $\Theta_{l,m}$). De même il est facile de voir qu'elles sont complètes.

Par conséquent toute solution de $H\Psi = -(\hbar/\mathrm{i})\, \partial\Psi/\partial t$ peut toujours être développée en série des Φ_m et des $\Theta_{l,m}$:

$$\Psi = \sum_m \sum_l \Phi_m(\varphi)\, \Theta_{l,m}(\theta)\, P_l(r, t).$$

Introduisant cette expression dans l'équation de Dirac quaternionique[1]), il vient pour P_l l'équation:

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{c\hbar}{\mathrm{i}}\, k\, \frac{\partial P}{\partial r}\, i - \frac{m_0 c^2}{\mathrm{i}}\, Pk - \frac{Z\alpha c\hbar}{r}\, P - \frac{c\hbar}{r}(jl + k\mathrm{i})\, Pi. \quad (1)$$

Il est facile de voir que la forme de cette équation impose la forme suivante pour P où S_1 et S_2 sont des fonctions scalaires réelles de r:

$$P = [\tfrac{1}{2}(S_1 + \mathrm{i}S_2) + \tfrac{1}{2}i(S_1 - \mathrm{i}S_2)](1 - j).$$

On peut découpler l'éq. (1); on obtient pour S_1 (idem pour S_2) l'équation du second ordre

$$\left(z = -\frac{E + m_0c^2}{Z\alpha c\hbar}\, r; \qquad \gamma = \frac{m_0c^2 - E}{m_0c^2 + E}\right):$$

$$z^2(z-1)\, S_1'' + z(2z-3)\, S_1'$$
$$- [Z^2\alpha^2\,(z-1)^2\,(\gamma z + 1) + (l+1)\, z + (l^2 - 1)(z-1)]\, S_1 = 0,$$

qui se ramène au type de Sturm–Liouville si on la multiplie par $z/(z-1)^2$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[p(z)\, \frac{\mathrm{d}S_1}{\mathrm{d}z}\right] - q(z)\, S_1 = -\lambda\rho(z)\, S_1, \quad (2)$$

p, q et ρ étant continus dans l'intervalle de variation de z $(-\infty, 0)$.

Dès lors, le théorème de Weill[4,3] s'applique et la solution de (2) peut être développée:

$$S_1 = \sum_{\substack{n \\ \text{spectre} \\ \text{discret}}} C_n y_n(z) + \int_{\substack{\text{spectre} \\ \text{continu}}} C(\lambda)\, y(z, \lambda)\, \mathrm{d}\lambda.$$

Finalement la solution générale de (1) s'écrit sous la forme

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = \sum C_{nlm}\, \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar) E_n t}\, \psi_{nlm} + \int_{E_{\min}}^{\infty} C_{lm}(E)\, \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar) E t}\, \psi_{lm}(E)\, \mathrm{d}E,$$

où ψ_{nlm} et ψ_{lm} sont les fonctions caractérisant les états propres.

L'ensemble des solutions trouvées est donc complet puisque la solution la plus générale de (1) peut s'écrire comme combinaison linéaire des états propres.

REFERENCES

1) Hautot, A. P., Physica **48** (1970) 609.
2) Bethe, H., Handbuch der Physik, Band XXIV, 1; 311.
3) Kemble, E. C., The fundamental principles of quantum mechanics, Mac Graw-Hill Comp. (New York, 1937).
4) Weill, H., Math. Annalen **68** (1910) 220.