

N° d'ordre:

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PAR

Anne CRUBELLIER

LABORATOIRE AIMÉ COTTON

C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

APPLICATION DE LA METHODE DE FACTORISATION
ET DE LA THEORIE DES GROUPE DE LIE A L'ETUDE
DES SYSTEMES QUANTIQUES EXACTEMENT SOLUBLES.

SOUTENUE LE 23 Avril 1974 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

P. JACQUINOT..... : Président

S. FENEUILLE..... }
C. COHEN-TANNOUJDI .. } Examineurs
H. BACRY..... }

A. KASTLER : Invité

TABLE DES MATIERES

1. <u>INTRODUCTION</u>	1
2. <u>ALGEBRES DE LIE</u>	9
2.1 Introduction	9
2.2 Séparation des variables	10
2.3 Algèbres abstraites	17
2.4 Méthode de factorisation et réalisations d'algèbres de Lie	20
2.5 Types de factorisation	26
2.5.1 Factorisation de type A	26
2.5.2 Factorisation de type B	30
2.5.3 Factorisation de type C	32
2.5.4 Factorisation de type D	34
2.5.5 Factorisations de type E et F	37
2.6 Utilisations indirectes de la méthode	39
2.6.1 Factorisation "artificielle"	40
2.6.2 Changements de variable	42
2.6.3 Exemples	43

3. <u>REPRESENTATIONS</u>	49
3.1 Introduction	49
3.2 Condition de normalisation et unitarité	52
3.3 Représentations des algèbres de Lie	
abstraites B_1 , $G(0,1)$ et \mathfrak{C}_3	54
3.3.1 Construction des espaces de représenta-	
tion et classification des	
représentations irréductibles	55
3.3.2 Condition d'unitarité - Algèbres réelles	61
3.4 Représentations des réalisations des algèbres	
de Lie B_1 , $G(0,1)$ et \mathfrak{C}_3	67
3.4.1 Construction des espaces de représenta-	
tions irréductibles unitaires des	
réalisations	68
3.4.2 Fonctions de base des représentations	
irréductibles unitaires des	
différentes réalisations	74
3.4.3 Représentations "partiellement"	
unitaires des différentes réalisations.....	77
3.5 Couplage de deux algèbres de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$	79
3.5.1 Produit direct de deux algèbres de Lie	
$\mathfrak{so}(2,1)$	81
3.5.2 Couplage de deux réalisations B de	
l'algèbre de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$	83

4. <u>OPERATEURS TENSORIELS ET ELEMENTS DE MATRICE</u>	89
4.1 Introduction	89
4.2 Opérateurs tensoriels des différentes réalisations	91
4.3 Principe du calcul des éléments de matrice d'opérateurs tensoriels	94
4.4 Exemple de calcul d'éléments de matrice : réalisation B	102
4.5 Elements de matrice entre fonctions de base de deux réalisations B différentes	107
5. <u>APPLICATION A DES CAS PHYSIQUES</u>	113
5.1 Introduction	113
5.2 Résumé et commentaires des articles présentés en annexe	117
5.2.1 Fonctions d'onde radiales relativistes des atomes hydrogénéoïdes	117
5.2.2 Fonctions d'onde radiales de l'oscil- lateur harmonique isotrope à trois dimensions	119
5.2.3 Problème de Kepler relativiste avec des charges magnétiques	120
5.2.4 Electron de Landau relativiste	121

5.3 Autres applications	122
5.3.1 Atome d'hydrogène non relativiste :	
intégrales non diagonales en énergie	122
5.3.2 Atome d'hydrogène non relativiste :	
coordonnées paraboliques	125
5.3.3 Electron dans un potentiel de Hulthén	129
5.3.4 Intégrales à deux corps : intégrales	
de Slater et de Marvin hydrogénoïdes	130
5.4 Conclusions et perspectives	136

Appendice 1 : Bases orthonormées des représentations irréductibles unitaires des différentes réalisations d'algèbres de Lie étudiées.

Appendice 2 : Fonctions de base normées des représentations "partiellement" unitaires des différentes réalisations d'algèbres de Lie étudiées.

Appendice 3 : Calcul de certains coefficients de Clebsch-Gordan du groupe $SO(2,1)$.

Appendice 4 .

Références.

Annexe I : Application de la méthode de factorisation et de la théorie des groupes au traitement relativiste des fonctions radiales hydrogénoïdes.

(A. Crubellier et S. Feneuille (1971) J. Phys.(Paris) 32, 405).

Annexe II : Non Compact Groups and the Harmonic Oscillator.

(A. Crubellier et S. Feneuille (1972) "The Structure of Matter", édité par B. G. Wybourne, University of Canterbury, New-Zealand).

Annexe III : Quaternionic solutions for the relativistic Kepler problem with magnetic charges.

(S. Feneuille et A. Crubellier (1972) J. Phys. A 5, 944).

Annexe IV : Application de la méthode de factorisation et de la théorie des groupes au problème de l'électron de Landau relativiste.

(A. Crubellier et S. Feneuille : accepté par J. Phys. A).

Annexe V : Application of the theory of Lie Algebras to exactly soluble quantum systems.

(A. Crubellier (1973) Proceedings of the second international conference on Group Theoretical Methods in Physics, édité par A. Janner, Université de Nijmegen, Pays-Bas).

1. INTRODUCTION

Dans le développement de la physique quantique, la théorie des groupes de Lie a joué très tôt un rôle privilégié (Weyl 1931, Wigner 1931, Van der Waerden 1932). Son emploi dans les différents domaines de la physique n'a pas cessé depuis lors de s'étendre et surtout de se diversifier. Actuellement, le rôle joué par les groupes de Lie dans l'étude des systèmes quantiques se présente sous des aspects variés, parmi lesquels on peut dégager quelques tendances assez différentes.

Il faut bien sûr rappeler d'abord l'importance des groupes d'invariance physique, qui traduisent les propriétés de symétrie du système, tels que le groupe des rotations pour les systèmes à symétrie sphérique ou le groupe de spin $SU(2)$. Plus récemment, de nombreux groupes de non-invariance ont été introduits. Ces groupes peuvent exprimer des symétries approchées ("brisées") : l'exemple le plus célèbre est sans doute celui du groupe $SU(3)$ qui conduit au modèle de l'octet pour les hadrons (Ne'eman 1961, Gell-Mann 1962) ; ils peuvent aussi permettre, sans référence à une symétrie approchée, de définir des bases d'états aux propriétés de symétrie bien définies : c'est le cas par exemple pour l'étude des systèmes à plusieurs particules, qu'ils soient

atomiques ou nucléaires, dans le cadre du modèle en couches (Racah 1949, Jahn 1950, Flowers 1952, Judd 1963, Elliot 1958, Feneuille 1967, Wybourne 1970).

Les systèmes quantiques exactement solubles constituent un domaine d'étude privilégié pour la théorie des groupes de Lie. Leurs spectres d'énergie et leurs fonctions d'onde, ainsi que leurs symétries d'invariance "dynamique" (liées à la forme mathématique particulière des équations), sont connus pour la plupart depuis longtemps (par exemple, pour l'atome d'hydrogène : Fock 1935, Bargmann 1936 ; pour l'oscillateur harmonique à trois dimensions : Jauch et Hill 1940, Baker 1956). Certains auteurs ont d'ailleurs tenté d'utiliser de telles symétries, comme symétries approchées, pour des systèmes plus complexes comme par exemple les atomes légers (Sinanoglu et Alper 1969, Rau 1970, Alper 1970, Chacon, Moshinsky, Novaro et Wulfman 1971). Ce n'est toutefois qu'assez récemment que les physiciens des particules élémentaires ont introduit, pour les systèmes quantiques exactement solubles, la notion de groupe dynamique (voir par exemple, pour l'oscillateur harmonique à N dimensions, Barut 1965 et, pour l'atome d'hydrogène, Musto 1966, Pratt et Jordan 1966, Kleinert 1968). Un groupe dynamique est un groupe de non-invariance tel que l'ensemble des états du système forme une unique représentation irréductible unitaire de ce groupe. C'est donc un groupe non compact qui possède des représentations irréductibles unitaires qui sont de dimension infinie. D'autres symétries non compactes, ne provenant pas nécessairement de la réduction de groupes dynamiques, ont été également introduites, par des voies assez

diverses, pour étudier différents systèmes exactement solubles (Goshen et Lipkin 1959, Bacry et Richard 1967, Moshinsky et Quesne 1971, Quesne et Moshinsky 1971, Moshinsky, Seligman et Wolf 1972, Boon et Seligman 1973 - ces quatre derniers articles utilisant le formalisme des transformations canoniques - Armstrong 1970, 1971 a et b, 1972, Yanagawa et Moriya 1970).

Il faut remarquer que ces études, qui ont en commun l'utilisation de groupes non-compacts, correspondent en fait à différents points de vue sur les systèmes exactement solubles. Ainsi, par exemple, les physiciens des particules élémentaires, s'ils ont parfois utilisé la symétrie dynamique de l'atome d'hydrogène pour calculer des probabilités de transition (Barut et Kleinert 1967, Barut et Rasmussen 1973), ont surtout cherché à en déduire des modèles pour les particules élémentaires : par exemple le groupe $SO(4,2)$ permet de construire une équation d'onde relativiste à nombre infini de composantes ayant un spectre de masse identique à celui de l'atome d'hydrogène (Fronsdal, 1967, Nambu 1967). Dans cette perspective, les points les plus importants sont la forme des équations et les spectres d'énergie. Un point de vue très différent de celui-ci consiste à étudier les systèmes exactement solubles non pour eux-mêmes, mais soit en interaction avec un potentiel extérieur, soit comme première approximation de systèmes plus complexes. Dans ce cas il est essentiel de bien connaître les fonctions d'onde et de pouvoir calculer des éléments de matrice (de transition ou de perturbation).

L'approche utilisée par Armstrong pour les fonctions radiales de l'atome d'hydrogène (Armstrong 1970) répond particulièrement bien à ces exigences. En effet cet auteur introduit une algèbre de Lie $SO(2,1)$ dont les opérateurs sont des opérateurs différentiels du premier ordre, ce qui permet d'obtenir aisément et explicitement les fonctions de base des représentations, qui sont liées aux fonctions d'onde radiales. Du point de vue de la théorie de la structure atomique, ceci est important puisque l'application de la théorie des groupes aux systèmes atomiques ne concernait jusqu'alors que la partie angulaire des fonctions d'onde ; les fonctions d'onde radiales étaient calculées comme solutions d'équations différentielles, ou encore les intégrales radiales étaient considérées comme des paramètres ajustables. L'élément le plus nouveau et le plus important réside dans le fait que la forme explicite simple des opérateurs de l'algèbre permet d'introduire, pour ce groupe non compact, la notion d'opérateur tensoriel. Cette notion a été et est très utilisée pour les groupes compacts, notamment en théorie de la structure atomique (Racah 1942, Judd 1963) et il est bien connu alors que l'utilisation d'opérateurs tensoriels associée à celle du théorème de Wigner-Eckart (Eckart 1930, Foster 1958, Wigner 1959) est extrêmement efficace pour le calcul d'éléments de matrice et la recherche de règles de sélection. Dans le cas du groupe non compact $SO(2,1)$ utilisé par Armstrong, ceci conduit à un résultat nouveau et séduisant : les intégrales radiales hydrogénoïdes diagonales en énergie de l'opérateur r^k sont simplement déduites de coefficients de Clebsch-Gordan de $SO(2,1)$, ce qui explique en particulier les règles de sélection de Pasternak et Sternheimer (1962).

Cette approche a été, depuis son introduction par Armstrong, reprise pour différents systèmes exactement solubles (Armstrong 1971 b et 1972, Cunningham 1972 a et b, Haskell et Wybourn 1972 et 1973), sans toutefois qu'il se dégage de méthode générale. Dans le présent travail nous montrons que la méthode de factorisation permet de généraliser cette approche à l'ensemble des systèmes quantiques exactement solubles. Dans le cas de l'équation radiale de l'atome d'hydrogène (Armstrong 1970), la possibilité d'introduire une algèbre de Lie est en effet liée à la propriété de factorisation de cette équation ; or tous les systèmes quantiques exactement solubles conduisent à des équations factorisables, pour lesquelles on dispose d'une méthode générale, initiée par Schrödinger (1940) et développée par Infeld et Hull (1951). Cette méthode consiste essentiellement à introduire, par le biais de la factorisation de l'équation initiale (équation différentielle du second ordre aux valeurs propres), des opérateurs différentiels du premier ordre (opérateurs "échelle"). Le rôle de ceux-ci est tout à fait analogue à celui d'opérateurs de déplacement d'une algèbre de Lie. Plus précisément, on peut montrer (Miller 1968) que la méthode de factorisation est équivalente à l'étude de certaines réalisations d'algèbres de Lie par des opérateurs différentiels à deux variables : grâce à l'introduction d'une variable auxiliaire, on peut en effet obtenir, à partir des opérateurs échelle, des opérateurs différentiels du premier ordre à deux variables qui forment une réalisation d'algèbre de Lie ; les fonctions de base des représentations de cette algèbre sont alors très simplement liées aux solutions de l'équation factorisable initiale.

Grâce à ce lien entre méthode de factorisation et théorie des groupes, l'étude d'un système physique dont l'équation de Schrödinger ou de Dirac conduit à une équation séparée factorisable se ramène à celle de la réalisation d'algèbre de Lie correspondante. En effet la condition de normalisation physique des fonctions d'onde est liée à la condition d'unitarité des représentations. De plus la définition d'opérateurs tensoriels vis à vis de cette réalisation et l'utilisation du théorème de Wigner-Eckart permettent de calculer des éléments de matrice entre fonctions d'onde à une variable et donc, finalement, des éléments de matrice d'opérateurs de transition ou de perturbation.

L'algèbre de Lie ainsi utilisée peut parfois, a posteriori, être reliée à une algèbre d'invariance ou à une sous-algèbre du groupe dynamique du système : dans ce cas la variable auxiliaire est en fait une variable physique. Cependant, cette situation n'est rencontrée que dans certains cas particuliers. La symétrie introduite n'appartient pas nécessairement à ces deux grandes catégories de symétries ; en général elle traduit seulement les propriétés de symétrie des équations (la présence de la variable auxiliaire contribue beaucoup à ce caractère purement "mathématique"). Dans le travail présenté ici, nous montrons qu'on peut donner une description systématique et concise de certains systèmes physiques (les systèmes quantiques exactement solubles), en utilisant la théorie des groupes de Lie pour tirer parti des propriétés mathématiques des équations. Cette étude a été essentiellement orientée vers des applications physiques ; les développements mathématiques nécessaires reposent en grande partie sur des ré-

sultats déjà connus et ils ont été en tout cas limités aux exigences des applications physiques attendues.

Dans la première partie, nous rappelons la correspondance, établie par Miller (1968), entre les équations factorisables et certaines réalisations d'algèbres de Lie. Nous montrons d'abord que les algèbres abstraites qu'on peut a priori introduire, pour des équations séparées provenant d'équations de Schrödinger ou de Dirac, sont les algèbres $G(a,b)$ de Miller ; nous décrivons ensuite comment l'expression explicite des opérateurs infinitésimaux de ces algèbres peut être obtenue à partir des opérateurs échelle de la méthode de factorisation et nous donnons la forme de ces opérateurs pour les différents types de factorisation. Nous montrons enfin que des équations autres que les équations factorisables de Infeld et Hull (1951) peuvent être étudiées, indirectement, par cette méthode (ce qui est important pour les applications physiques).

La seconde partie est consacrée à l'étude des fonctions de base des représentations des algèbres précédemment introduites. Le lien entre la condition de normalisation des fonctions d'onde et la condition d'unitarité des représentations est précisé : il est en général nécessaire d'étudier non seulement les représentations unitaires, mais, à moins que l'algèbre ne soit celle d'un groupe d'invariance, certaines représentations "partiellement" unitaires. Enfin nous étudions rapidement le couplage de deux réalisations de l'algèbre $SO(2,1)$ et notamment un couplage particulier (pour les réalisations de type B) qui est utile pour le calcul de certaines intégrales à deux corps (intégrales de Slater hydrogénoïdes par exemple).

Dans la troisième partie sont introduits les opérateurs tensoriels des différentes réalisations étudiées. Il est ensuite montré comment leurs éléments de matrice peuvent être calculés, en particulier lorsque le théorème de Wigner-Eckart ne peut pas être utilisé directement. Le calcul d'éléments de matrice est étendu au cas où les vecteurs bra et ket appartiennent à des représentations de deux réalisations différentes du type B de $SO(2,1)$; on obtient ainsi, par exemple, les intégrales radiales hydrogénoïdes non diagonales en énergie, intégrales qui ne sont pas accessibles par l'utilisation du théorème de Wigner-Eckart.

Enfin, la dernière partie contient l'étude d'un certain nombre d'exemples physiques. Nous n'avons pas cherché à donner une liste exhaustive de tels exemples et nous avons choisi d'illustrer les points essentiels des chapitres précédents. Pour certains de ces exemples une étude détaillée a été publiée et nous nous référons à ces articles, qui sont présentés en annexe.

CHAPITRE 2

ALGÈBRES DE LIE.

2.1 Introduction

L'introduction d'algèbres de Lie dans l'étude des systèmes quantiques exactement solubles est rendue possible par la correspondance qu'on peut établir entre les différents types d'équations factorisables et certaines réalisations d'algèbres de Lie. Cette correspondance a été étudiée par Miller (1958). Il est nécessaire toutefois de la situer dans le contexte de l'étude des systèmes quantiques exactement solubles décrite ici. En effet, notre but, qui est d'utiliser cette correspondance dans l'étude de certains systèmes physiques, est très différent de celui de Miller, qui est l'analyse des propriétés mathématiques des fonctions spéciales (fonctions hypergéométriques, hypergéométriques confluentes, fonctions de Bessel). C'est pourquoi, afin de bien montrer le lien entre l'équation physique et la réalisation d'algèbre de Lie qui lui est associée (en particulier le rôle de la variable auxiliaire), nous décrivons une méthode qui permet d'obtenir les opérateurs de l'algèbre à partir des opérateurs échelle de la méthode de factorisation.

Après un bref rappel sur la séparation des variables dans l'équation de Schrödinger et dans l'équation de Dirac, l'examen du rôle des nombres quantiques qui apparaissent dans les équations séparées nous permet de montrer que les algèbres de Lie abstraites (de dimension au plus égale à 4) qu'on peut a priori introduire sont les algèbres $G(a,b)$ de Miller. Le principe de la recherche des opérateurs infinitésimaux est ensuite décrit (avec des notations plus proches de celles d'Infeld et Hull (1951) que de Miller (1968)) et nous obtenons ainsi l'expression de ces opérateurs pour chaque type de factorisation. Enfin, en vue des applications, nous montrons que les réalisations d'algèbres de Lie ainsi obtenues sont indirectement liées à d'autres équations que les équations factorisables type et nous présentons quelques exemples.

2.2 Séparation des variables.

La séparation des variables d'une équation de Schrödinger à trois dimensions peut être décrite de façon tout à fait générale (voir, par exemple, Morse et Feshbach 1953).

La forme générale de l'équation est :

$$(\Delta + V(\vec{r}) - E_1) \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (2-2-1)$$

Elle est, par définition, séparable dans un système de coordonnées ξ_1, ξ_2, ξ_3 si on peut trouver toutes les solutions à partir de fonctions de la forme :

$$\Psi(\vec{r}) = \prod_{n=1,3} X_n(\xi_n) .$$

Le laplacien s'écrit, dans ce système de coordonnées :

$$\Delta = \sum_{n=1,3} \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \frac{\partial}{\partial \xi_n} \left(\frac{h_1 h_2 h_3}{h_n^2} \frac{\partial}{\partial \xi_n} \right),$$

$$\text{où } h_n = \left[\frac{\partial x}{\partial \xi_n}^2 + \frac{\partial y}{\partial \xi_n}^2 + \frac{\partial z}{\partial \xi_n}^2 \right]^{\frac{1}{2}},$$

x, y et z étant les coordonnées cartésiennes.

On montre que l'équation est séparable si les conditions suivantes sont réalisées :

$$\text{a) } \frac{h_1 h_2 h_3}{h_n^2} = f_n(\xi_n) g_n(\xi_p, \xi_q) \quad (p \text{ et } q \neq n) \quad (2-2-2)$$

$$\text{b) } V(\vec{r}) = \sum_{n=1,3} \frac{1}{h_n^2} v_n(\xi_n).$$

En effet, dans ce cas l'équation (2-2-1) prend la forme suivante :

$$\sum_{n=1,3} \frac{1}{h_n^2} \left\{ \frac{1}{X_n(\xi_n) f_n(\xi_n)} \frac{d}{d\xi_n} \left[f_n(\xi_n) \frac{dX_n(\xi_n)}{d\xi_n} \right] + v_n(\xi_n) \right\} = E_1,$$

et elle peut être résolue de la manière la plus générale en introduisant un déterminant (appelé déterminant de Stäckel) d'éléments Φ_{ij} qui possède les propriétés suivantes :

$$\text{a) } \Phi_{ni} \text{ est fonction de } \xi_n \text{ seulement} \quad (2-2-3)$$

$$\text{b) } \frac{1}{h_n^2} = \frac{M_n}{S}, \text{ où } M_n \text{ est le mineur de } \Phi_{n1} \text{ et } S \text{ la valeur}$$

du déterminant.

Les deux conditions sont compatibles si les conditions (2-2-2) sont réalisées ; on peut remplacer la seconde par :

$$M_n = \frac{g_n(\xi_p, \xi_q)}{f_p(\xi_p) f_q(\xi_q)}$$

$$S = \frac{h_1 h_2 h_3}{f_1(\xi_1) f_2(\xi_2) f_3(\xi_3)} .$$

Les propriétés du déterminant entraînent alors que :

$$\sum_{h=1,3} \frac{1}{h_n^2} \Phi_{ni}(\xi_n) = \sum_{n=1,3} \frac{M_n}{S} \Phi_{ni}(\xi_n) = \delta_{ii} ,$$

et les équations séparées sont obtenues en écrivant :

$$\frac{1}{X_n(\xi_n) f_n(\xi_n)} \frac{d}{d\xi_n} \left[f_n(\xi_n) \frac{d}{d\xi_n} X_n(\xi_n) \right] + v_n(\xi_n) = \sum_{i=1,3} E_i \Phi_{ni}(\xi_n).$$

E_1 est la valeur propre de l'équation (2-2-1), tandis que E_2 et E_3 sont les constantes de séparation de l'équation ; les spectres de ces trois constantes doivent être obtenus lors de la résolution des trois équations séparées.

Ceci n'est en fait possible que si la résolution peut se faire progressivement : par exemple si $\Phi_{31} = \Phi_{32} = \Phi_{21} = 0$. L'équation la plus complexe est alors :

$$\left\{ \frac{1}{f_1} \frac{d}{d\xi_1} \left(f_1 \frac{d}{d\xi_1} \right) + v_1 - E_1 \Phi_{11} - E_2 \Phi_{12} - E_3 \Phi_{13} \right\} X_1(\xi_1) = 0 , \quad (2-2-4)$$

mais le spectre de E_3 et celui de E_2 pour chaque valeur de E_3 sont supposés connus par des intégrations antérieures. Si l'on suppose de plus que le spectre de valeurs propres de E_2 est discret, l'ensemble des équations (2-2-4) correspondant à une valeur propre de E_3 peut se mettre sous la forme d'une famille d'équations différentielles du second ordre aux valeurs propres dépendant d'un paramètre

discret ; on peut d'ailleurs écrire ces équations sous la forme "standard" (ne contenant pas de dérivée première) :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + r(x,m) + \lambda \right] \varphi(x) = 0 . \quad (2-2-5)$$

Le même type d'équations est d'ailleurs obtenu à partir de la résolution de l'équation séparée en ξ_2 , si l'on suppose que le spectre de E_3 est discret. Dans tous les cas, λ est une des constantes de séparation du système (dont le spectre de valeurs propres est inconnu) et m est le nombre quantique qui indexe une autre constante de séparation dont le spectre est supposé connu et discret.

Il est important de noter que les changements de variable et de fonction, nécessaires pour mettre l'équation séparée sous la forme (2-2-5), entraînent que la condition de normalisation de la fonction d'onde s'écrit, en ce qui concerne $\varphi(x)$, sous la forme simple :

$$\int_D [\varphi(x)]^2 dx = 1 , \quad (2-2-6)$$

(D étant le domaine de la variable x).

Le problème de la séparation des variables dans l'équation de Dirac est plus complexe et il n'existe pas de méthode générale analogue à celle qui a été décrite pour l'équation de Schrödinger. Dans le formalisme de Dirac, la fonction d'onde relativiste est un spineur à 4 composantes et l'équation est un système de 4 équations différentielles du premier ordre couplées. Il faut séparer les variables dans les 4 composantes du spineur et dans les 4 équations ; sous sa forme générale, ce problème est très complexe et, en fait, la méthode

employée est différente dans chaque cas où il est effectivement résolu.

La méthode décrite par Feynmann et Gell-Mann (1958), qui consiste à remplacer l'équation différentielle du premier ordre pour un spineur à 4 composantes par une équation différentielle du second ordre pour un spineur à 2 composantes, simplifie parfois le problème. Cependant, les opérateurs qui permettent d'obtenir la fonction d'onde à 4 composantes à partir de ce spineur à 2 composantes sont des opérateurs différentiels et la méthode est surtout utile si l'on s'intéresse seulement au spectre d'énergie.

La méthode la plus générale semble être actuellement celle décrite par Hautot (1970), qui utilise la forme quaternionique de l'équation de Dirac. Au lieu d'utiliser comme forme mathématique pour la fonction d'onde un spineur à quatre composantes, on peut l'exprimer comme une fonction quaternionique :

$$u = u_1 + i u_2 + j u_3 + k u_4 .$$

On rappelle que les symboles i , j et k qui entrent dans la définition des quaternions satisfont aux relations suivantes :

$$ij = -ji = k$$

$$jk = -kj = i$$

$$ki = -ik = j$$

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1 .$$

Ainsi, dans toute cette partie, i n'est pas le nombre complexe habituellement représenté par ce symbole ; ce dernier est alors noté $\sqrt{-1}$.

On rappelle également que pour un quaternion q :

$$q = a + ib + jc + kd ,$$

le quaternion conjugué se note \bar{q} :

$$\bar{q} = a - ib - jc - kd ,$$

et le quaternion complexe-conjugué q^* :

$$q^* = a^* + ib^* + jc^* + kd^*$$

(où a^* par exemple est le complexe conjugué du nombre complexe a).

Enfin la partie scalaire de q se note $\text{Scal}(q)$:

$$\text{Scal}(q) = a .$$

La fonction d'onde quaternionique u est définie comme solution d'une équation quaternionique équivalente à l'équation de Dirac.

Ainsi, par exemple, si l'on considère une particule de spin $1/2$, de masse m et de charge e placée dans un champ électromagnétique défini par son quadripotentiel $(\vec{A}, \frac{\varphi}{c})$, l'équation de Dirac :

$$\left\{ c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) + \beta m c^2 e\varphi - E \right\} \Psi = 0$$

(où $\vec{\alpha}$ et β sont les matrices de Dirac et Ψ un spineur à 4 composantes), est remplacée par l'équation quaternionique suivante :

$$c(p_{\mathfrak{z}} - \frac{e}{c} A_{\mathfrak{z}}) u = u \left\{ -i(E + e\varphi) + j \sqrt{-1} mc^2 \right\} .$$

Dans cette équation $p_{\mathfrak{z}}$ et $A_{\mathfrak{z}}$ sont des opérateurs quaternioniques, définis par :

$$p_{\mathfrak{z}} = i p_x + j p_y + k p_z$$

$$A_{\mathfrak{z}} = i A_x + j A_y + k A_z .$$

Un avantage de ce formalisme est que la séparation des variables peut être effectuée sur la fonction d'onde elle-même et pas seulement sur ses composantes. On peut en effet chercher une solution u qui soit le produit (non commutatif) de fonctions quaternioniques à une variable :

$$u(\vec{r}) = x_1(\xi_1) x_2(\xi_2) x_3(\xi_3)$$

(alors que le produit analogue n'est pas défini pour les spineurs).

Les équations séparées sont alors des équations quaternioniques, équivalentes à des systèmes de 4 équations différentielles complexes du premier ordre couplées. Nous n'étudierons pas le problème de la résolution de ce système de façon générale ; celle-ci est décrite en détail pour certains exemples par Hautot (1970 et 1972) et dans deux des articles présentés en annexe (III et IV). On constate dans tous les cas que le système couplé est dégénéré et qu'il est équivalent à un ensemble de deux équations différentielles réelles du second ordre non couplées, qui peuvent être mises sous la forme (2-2-5). Cependant, la condition de normalisation de la fonction d'onde u , qui s'écrit :

$$\iiint \text{Scal} (\overline{u^*} u) dt = 1 ,$$

ne conduit pas en général, pour les solutions des équations finales, à des conditions aussi simples que (2-2-6).

2.3 Algèbres abstraites.

La séparation des variables dans une équation de Schrödinger ou de Dirac conduit donc, avec les hypothèses faites dans le paragraphe précédent, à des équations séparées du type (2-2-5) :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + r(x,m) + \lambda \right] \varphi(x) = 0 \quad .$$

Ces équations font intervenir deux constantes : m est le nombre quantique entier qui indexe une constante de séparation dont le spectre est connu et discret ; λ est la valeur propre inconnue (dont le spectre peut être discret ou continu) de l'équation.

Le type d'algèbre de Lie abstraite dont les solutions $\varphi_\lambda^m(x)$ de l'équation (2-2-5) forment des bases de représentations dépend essentiellement des valeurs possibles de λ pour un même m , ou des valeurs de m pour un même λ . En fait un seul cas est simple, étant donné qu'on ne connaît pas le spectre de λ ; c'est celui où, pour une valeur de λ , m prend un ensemble (fini ou non) de valeurs entières contiguës. Si l'on cherche alors une algèbre de Lie dont les fonctions $\varphi_\lambda^m(x)$ correspondant à une même valeur de λ forment une base de représentation, il est clair qu'elle doit contenir les opérateurs suivants :

- a) un opérateur, J_3 , dont les valeurs propres sont les valeurs de m
- b) deux opérateurs de déplacement, J_+ et J_- , qui relient les vecteurs dont les valeurs propres sont m à ceux dont les valeurs propres sont respectivement $m+1$ et $m-1$; une conséquence évidente de

cette propriété est que les relations de commutation entre J_3 et J_+ ou J_- sont :

$$[J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} . \quad (2-3-1)$$

L'utilisation d'une telle algèbre ne présente un intérêt réel que si l'on peut trouver une forme explicite pour les opérateurs ; cependant les relations de commutation (2-3-1) permettent à elles seules de trouver quelles peuvent être ces algèbres abstraites. En effet, une algèbre de Lie qui contient des opérateurs J_3 , J_+ et J_- vérifiant les relations (2-3-1) contient aussi le commutateur de J_+ et J_- :

$$K = [J_+, J_-] .$$

L'identité de Jacobi, écrite pour les quatre groupes de trois opérateurs, entraîne que :

$$[J_3, K] = 0 \quad (2-3-2)$$

$$[J_3, [J_{\pm}, K]] = \pm [J_{\pm}, K] \quad (2-3-3)$$

$$[J_+, [J_-, K]] = [J_-, [J_+, K]] . \quad (2-3-4)$$

Si l'on veut que l'algèbre soit engendrée par les quatre opérateurs J_3 , J_+ , J_- et K (sans d'ailleurs préjuger de leur indépendance linéaire), les trois dernières relations impliquent que :

$$[J_{\pm}, K] = \pm \alpha J_{\pm} , \quad (2-3-5)$$

α étant un nombre complexe quelconque. Si, de plus, on pose :

$$K' = K + \alpha J_3$$

les relations de commutation sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} [J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \\ [J_+, J_-] = K' - \alpha J_3 \\ [J_3, K'] = [J_{\pm}, K'] = 0 \end{array} \right. .$$

L'algèbre définie par ces relations de commutation est isomorphe à une algèbre $G(a,b)$ (Miller 1968). En effet celle-ci est engendrée par 4 opérateurs J_3, J_+, J_- et ε satisfaisant aux relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} [J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \\ [J_+, J_-] = 2a^2 J_3 - b \varepsilon \\ [J_3, \varepsilon] = [J_{\pm}, \varepsilon] = 0 \end{array} \right. , \quad (2-3-6)$$

où a et b sont des nombres complexes. Par conséquent, l'algèbre ci-dessus est isomorphe aux algèbres $G(a,b)$ telles que $2a^2 = -\alpha$; si K' n'est pas nul, b peut être quelconque ($\neq 0$), tandis que si K' est nul on a nécessairement $b=0$, et on doit ajouter à l'algèbre un opérateur E qui commute avec les trois autres. Il existe d'ailleurs des isomorphismes entre les algèbres $G(a,b)$ et trois cas seulement de valeurs de a et b sont à considérer :

a) Si a est différent de zéro, toutes les algèbres $G(a,b)$ sont isomorphes à $G(1,0)$. Il suffit pour le montrer de faire dans l'algèbre $G(a,b)$ le changement de base suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_{\pm}' = a^{-1} J_{\pm} \\ J_3' = J_3 - \frac{b a^{-2}}{2} \varepsilon \\ J' = \varepsilon \end{array} \right. \quad (2-3-7)$$

b) Les algèbres $G(0,b)$ sont toutes isomorphes à $G(0,1)$: il suffit pour le montrer de faire dans $G(0,b)$ le changement de base $\varepsilon' = b \varepsilon$.

c) Le dernier cas est celui de l'algèbre $G(0,0)$.

Aucune de ces algèbres n'est semi-simple : \mathcal{E} engendre évidemment un idéal propre abélien. $G(1,0)$ est d'ailleurs la somme directe de l'algèbre engendrée par \mathcal{E} et de l'algèbre simple B_1 (dans les notations de Cartan) engendrée par J_3 , J_+ et J_- . De la même façon, $G(0,0)$ est la somme directe de l'algèbre engendrée par \mathcal{E} et de celle engendrée par les trois autres opérateurs ; cette dernière, qui n'est pas non plus semi-simple puisque J_+ et J_- engendrent un idéal propre abélien, est appelée \mathcal{C}_3 par Miller (1968) (c'est la complexification de l'algèbre du groupe euclidien dans le plan, E_3).

Un des invariants de l'algèbre $G(a,b)$ est donné par Miller sous la forme :

$$C_{ab} = J_+ J_- + a^2 [J_3]^2 - a^2 J_3 - b J_3 \mathcal{E}. \quad (2-3-8)$$

C_{10} et C_{00} sont aussi des invariants respectivement de B_1 et \mathcal{C}_3 . C_{10} est d'ailleurs l'opérateur de Casimir de B_1 (Racah 1965). Les relations de commutations et les expressions de cet invariant dans le cas des algèbres de Lie B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{C}_3 , qui sont finalement les seules que nous étudions par la suite, sont rassemblées dans le tableau (1)*.

2.4 Méthode de factorisation et réalisations d'algèbres de Lie.

Le fait de considérer les solutions $\varphi_\lambda^m(x)$ des équations (2-2-5) comme des fonctions de base de représentations d'une algèbre de Lie $G(a,b)$ n'est réellement efficace que si l'on dispose d'une expression

* Les tableaux sont groupés à la fin de chaque chapitre.

explicite des opérateurs de l'algèbre dans cette représentation ; ou encore, de manière plus précise, si on peut trouver une réalisation de cette algèbre de Lie par des opérateurs définis sur un espace fonctionnel contenant les solutions de l'équation. C'est à cette seule condition, en effet, qu'une expression explicite des fonctions de base des représentations peut être obtenue à partir de l'algèbre ; c'est à cette seule condition également qu'on peut définir des opérateurs tensoriels.

Pour certaines des équations de la forme (2-2-5), il est possible de trouver des réalisations d'algèbres de Lie dont les bases de représentations sont non pas les solutions elles-mêmes, mais des fonctions qui leur sont étroitement liées : ce résultat, établi par Miller (1968), repose sur les propriétés des équations factorisables.

Tout d'abord, la méthode de factorisation (suggérée par Schrödinger (1940) et développée par Infeld et Hull (1951)) concerne des équations de la forme (2-2-5) :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + r(x,m) + \lambda \right] \varphi_\lambda^m(x) = 0 \quad .$$

D'autre part, le point fondamental de cette méthode est la recherche d'opérateurs "échelle", reliant les solutions de l'équation pour une même valeur de λ et pour des valeurs de m différant de 1, c'est-à-dire des opérateurs ${}^\pm H_m$ tels que * :

$${}^+H_m \varphi_\lambda^m(x) \propto \varphi_\lambda^{m-1}(x) \quad (2-4-1)$$

$${}^-H_{m+1} \varphi_\lambda^m(x) \propto \varphi_\lambda^{m+1}(x) \quad (2-4-2)$$

* Le signe \propto signifie ici : proportionnel à .

Dans ces conditions, les opérateurs ${}^+H_{m+1} {}^-H_{m+1}$ et ${}^-H_m {}^+H_m$ admettent $\varphi_\lambda^m(x)$ comme fonction propre. Il est naturel de supposer qu'ils sont égaux, à des constantes additives près, à :

$$Q_m = - \left[\frac{d^2}{dx^2} + r(x,m) \right]$$

dont $\varphi_\lambda^m(x)$ est évidemment une fonction propre. Ceci conduit à chercher ${}^\pm H_m$ sous la forme d'opérateurs différentiels du premier ordre.

Finalement, suivant la définition donnée par Infeld et Hull (1951) une équation de la forme (2-2-5) est factorisable si l'opérateur Q_m vérifie chacune des équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} {}^-H_m {}^+H_m = Q_m - L(m) \\ {}^+H_{m+1} {}^-H_{m+1} = Q_m - L(m+1) \end{array} \right. , \quad (2-4-3)$$

où $L(m)$ ne dépend pas de x . De plus le fait que l'équation (2-2-5) soit sous la forme standard entraîne que les opérateurs ${}^+H_m$ et ${}^-H_m$ sont nécessairement sous la forme :

$${}^\pm H_m = \pm \frac{d}{dx} + k(x,m) . \quad (2-4-4)$$

Les équations (2-4-3) sont d'ailleurs équivalentes à l'équation suivante :

$$k^2(x,m+1) - k^2(x,m) + \frac{d}{dx} k(x,m+1) + \frac{d}{dx} k(x,m) = L(m) - L(m+1) . \quad (2-4-5)$$

Pour toutes les fonctions $k(x,m)$ vérifiant cette équation (les seuls cas où l'on sache effectivement la résoudre conduisent aux six types de factorisation donnés par Infeld et Hull), les opérateurs ${}^+H_m$ et ${}^-H_{m+1}$ définis par les équations (2-4-4) ont les propriétés (2-4-1)

et (2-4-2). Ils jouent donc le rôle des opérateurs J_+ et J_- introduits dans le paragraphe précédent. Cependant, ils ne répondent pas exactement aux exigences définies au début de ce paragraphe : en effet, ils font intervenir explicitement le paramètre m , ce qui ne permettrait de définir les opérateurs J_+ et J_- que par leur action sur les solutions elles-mêmes. D'autre part, il faut rappeler ici que les relations de commutation (2-3-1) ne constituent le point de départ d'une algèbre $G(a,b)$ que si le commutateur $K = [J_+, J_-]$ vérifie les relations de commutation (2-3-2) et (2-3-5).

L'introduction d'une variable supplémentaire permet d'obtenir des opérateurs qui ne dépendent pas de m et dont l'action sur des fonctions très simplement dérivées des fonctions $\varphi_\lambda^m(x)$ est analogue à celle de ${}^+H_m$ et ${}^-H_{m+1}$ sur ces dernières. Soit τ la variable auxiliaire ; on introduit des fonctions à deux variables, $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$, qui sont liées aux solutions $\varphi_\lambda^m(x)$ par :

$$\Phi_\lambda^m(x, \tau) = e^{im\tau} \varphi_\lambda^m(x) .$$

L'opérateur $-i\partial_\tau$ admet les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ comme fonctions propres. On pose donc :

$$J_{\mathfrak{J}} = -i\partial_\tau \quad (2-4-6)$$

et alors :

$$J_{\mathfrak{J}} \Phi_\lambda^m(x, \tau) = m \Phi_\lambda^m(x, \tau) . \quad (2-4-7)$$

En outre, tout opérateur défini comme fonction de $J_{\mathfrak{J}}$ admet aussi les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ comme fonctions propres ; on a :

$$f(-i\partial_\tau) \Phi_\lambda^m(x, \tau) = f(m) \Phi_\lambda^m(x, \tau) .$$

Ceci permet de montrer que si l'on pose :

$$J_+ = e^{i\tau} [-\partial_x + k(x, -i\partial_\tau + 1)] , \quad (2-4-8)$$

où la fonction $k(x, m)$ définit des équations factorisables, l'action de J_+ sur les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ est donnée par :

$$J_+ \Phi_\lambda^m(x, \tau) = e^{i\tau} {}^{-H}_{m+1} \Phi_\lambda^m(x, \tau) .$$

L'opérateur ${}^{-H}_{m+1}$ n'agit pas sur la variable τ , donc :

$$J_+ \Phi_\lambda^m(x, \tau) = e^{i(m+1)\tau} {}^{-H}_{m+1} \Phi_\lambda^m(x) .$$

Finalement, d'après (2-4-2) :

$$J_+ \Phi_\lambda^m(x, \tau) \propto \Phi_\lambda^{m+1}(x, \tau) . \quad (2-4-9)$$

De façon tout à fait analogue, l'opérateur J_- est défini par :

$$J_- = e^{-i\tau} [+ \partial_x + k(x, -i\partial_\tau)] , \quad (2-4-10)$$

et son action sur les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ est, d'après (2-4-1), donnée par :

$$J_- \Phi_\lambda^m(x, \tau) \propto \Phi_\lambda^{m-1}(x, \tau) . \quad (2-4-11)$$

Il est facile de constater en utilisant les définitions de J_3 , J_+ et J_- que les relations de commutation (2-3-1) sont satisfaites.

Toutefois, ces trois opérateurs n'appartiennent à une algèbre de Lie

$G(a, b)$ que si les relations de commutation (2-3-2) et (2-3-5) sont

également vérifiées : or ceci dépend de la forme de la fonction

$k(x, m)$. Nous examinerons ce point pour chaque type de factorisation particulier, après avoir calculé le commutateur :

$$K = [J_+, J_-] .$$

Ce commutateur peut d'ailleurs, dans le cas général, être mis sous la forme :

$$K = k^2(x, -i\partial_\tau) - k^2(x, -i\partial_\tau + 1) - \partial_x[k(x, -i\partial_\tau)] - \partial_x[k(x, -i\partial_\tau + 1)] ,$$

et, si $k(x, m)$ vérifie l'équation (2-4-4), on obtient :

$$K = L(-i\partial_\tau + 1) - L(-i\partial_\tau) . \quad (2-4-12)$$

On a donc, dans tous les cas :

$$K \Phi_\lambda^m(x, \tau) \propto \Phi_\lambda^m(x, \tau) . \quad (2-4-13)$$

Par conséquent, si J_z , J_+ , J_- et K engendrent une algèbre de Lie, les relations (2-4-7), (2-4-9), (2-4-11) et (2-4-13) montrent que les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ forment, pour λ donné, une base de représentation de cette algèbre.

Si on appelle Ω l'invariant de l'algèbre dont l'expression est donnée par l'équation (2-3-8), les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ sont des fonctions propres de Ω ; soit ω la valeur propre associée, l'équation

$$\Omega \Phi_\lambda^m(x, \tau) = \omega \Phi_\lambda^m(x, \tau)$$

implique que les fonctions $\varphi_\lambda^m(x)$ sont solutions de l'équation suivante :

$$\Omega_m \varphi_\lambda^m(x) = \omega \varphi_\lambda^m(x) ,$$

où Ω_m est obtenu en remplaçant, dans l'expression de Ω , $-i\partial_\tau$ par m . Ω_m est un opérateur différentiel du second ordre en x et il est donc lié à Q_m par une relation linéaire ; ω et λ sont reliés par la même relation et, dans la suite, nous utiliserons de préférence, pour indexer les solutions, la valeur propre de ω .

2.5 Types de factorisation.

L'équation (2-4-5), qui est la condition pour qu'une fonction $k(x,m)$ définisse des équations factorisables, n'est pas soluble de manière générale. Ne sont connues que certaines solutions, celles qui, comme le montre Miller (1968), peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$k(x,m) = \sum_{t=-n'}^{t=n} k_t(x) m^t ,$$

où n et n' sont des entiers ≥ 0 .

Ces solutions conduisent finalement aux six types d'équations factorisables qui ont été définis par Infeld et Hull (1951). A partir de la fonction $k(x,m)$ associée à chacun de ces types de factorisation, il est possible de définir des opérateurs J_z , J_+ et J_- en utilisant les équations (2-4-6), (2-4-8) et (2-4-10) du paragraphe précédent ; le calcul du commutateur de J_+ et J_- (équation (2-4-12)) permet de savoir si ils appartiennent à une algèbre de Lie et quelle est cette algèbre.

2.5.1 Factorisation de type A.

La fonction $k(x,m)$ correspondant à ce type de factorisation est définie par :

$$k(x,m) = a(m+c) \cotg a(x+p) + \frac{d}{\sin a(x+p)} , \quad (2-5-1)$$

où a , c , d et p sont des nombres complexes quelconques. Les opérateurs J_z , J_+ et J_- associés sont donc :

$$J_3 = -i\partial_\tau$$

$$J_+ = e^{i\tau} \left[-\partial_x + a(-i\partial_\tau + c + 1) \cotg a(x+p) + \frac{d}{\sin a(x+p)} \right]$$

$$J_- = e^{-i\tau} \left[\partial_x + a(-i\partial_\tau + c) \cotg a(x+p) + \frac{d}{\sin a(x+p)} \right]$$

Puisque la fonction $L(m)$ est dans ce cas :

$$L(m) = a^2(m+c)^2,$$

on a, d'après (2-4-12) :

$$K = [J_+, J_-] = 2a^2 (-i\partial_\tau + c + \frac{1}{2}), \text{ soit :}$$

$$K = 2a^2 J_3 + a^2(2c+1). \quad (2-5-2)$$

Cette relation de commutation montre (voir équations (2-3-6)) que J_3 , J_+ et J_- appartiennent à une réalisation d'une algèbre de Lie $G(a,b)$ où a est le paramètre qui intervient dans l'équation (2-5-1) et où b est quelconque ; le quatrième opérateur, E , est une constante, définie par :

$$-b E = a^2 (2c+1).$$

Si on fait dans cette algèbre le changement de base (2-3-7), les opérateurs J'_3 , J'_+ et J'_- , définis par :

$$\begin{cases} J'_3 = J_3 + (c + \frac{1}{2}) \\ J'_\pm = \frac{1}{a} J_\pm \end{cases}, \quad (2-5-3)$$

engendrent une algèbre B_1 . On peut simplifier la forme des opérateurs de cette réalisation en leur faisant subir la transformation définie par :

$$\begin{cases} X'' = U X' U^{-1} \\ U = e^{i(c+\frac{1}{2})\tau} \end{cases} \quad (2-5-4)$$

qui conserve la structure de l'algèbre. On obtient :

$$\begin{cases} J''_3 = -i\partial_\tau \\ J''_\pm = \frac{1}{a} e^{\pm i\tau} \left[\pm \partial_x + a(-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2}) \cotg a(x+p) + \frac{d}{\sin a(x+p)} \right] \end{cases} \quad (2-5-5)$$

L'opérateur de Casimir de cette réalisation est :

$$\begin{aligned} \Omega'' &= J''_+ J''_- + (J''_3)^2 - J''_3, \text{ soit :} \\ \Omega'' &= \frac{1}{a^2} \left\{ -\partial_x^2 + \frac{a^2(-i\partial_\tau - \frac{1}{2})(-i\partial_\tau + \frac{1}{2}) + d^2 + 2ad(-i\partial_\tau) \cos a(x+p)}{\sin^2 a(x+p)} - \frac{a^2}{4} \right\}. \end{aligned}$$

Les résultats du paragraphe précédent montrent que les fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau) = e^{im\tau} \varphi_\lambda^m(x)$, où les fonctions $\varphi_\lambda^m(x)$ sont solutions des équations factorisables, sont des fonctions de base de représentations de la réalisation de l'algèbre $G(a, b)$ définie ci-dessus. Les fonctions de base des représentations de la réalisation de l'algèbre B_1 définie par (2-5-5) sont liées à celles de l'algèbre $G(a, b)$ par l'opérateur U ; au lieu des fonctions $\Phi_\lambda^m(x, \tau)$ interviennent les fonctions $e^{i(m+c+\frac{1}{2})\tau} \varphi_\lambda^m(x)$. Par conséquent, si on appelle ω la valeur propre de Ω'' liée à λ et si on pose $\mu = m+c+\frac{1}{2}$, on a :

$$\Omega''_\mu \varphi_\lambda^m(x) = \omega \varphi_\lambda^m(x),$$

où Ω''_μ est obtenu en remplaçant, dans l'expression de Ω'' , $-i\partial_\tau$ par μ . On trouve :

$$\lambda = a^2 \left(\omega + \frac{1}{4} \right).$$

On peut de plus supposer que :

$$0 \leq c < 1$$

et indexer finalement les solutions des équations factorisables par μ et ω . Ces dernières sont alors :

$$\Omega''_{\mu} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = \omega \varphi_{\omega}^{\mu}(x) \quad ,$$

c'est-à-dire :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{a^2(\mu^2 - \frac{1}{4}) + d^2 + 2ad \mu \cos a(x+p)}{\sin^2 a(x+p)} + a^2(\omega + \frac{1}{4}) \right] \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = 0 \quad (2-5-6)$$

Les conditions que doivent vérifier les paramètres a , d et q pour que ces équations soient réelles conduisent à distinguer trois cas pour lesquels la forme réelle des équations est différente :

- a) si a , d et q sont réels, les équations réelles sont évidemment (2-5-6) et on appelle A_1 la réalisation de B_1 définie par (2-5-5).
- b) si a et d sont imaginaires purs ($a=ia'$, $d=id'$ avec a' et d' réels) et si p est réel, la forme réelle des équations (2-5-6) est :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{a'^2(\mu^2 - \frac{1}{4}) + d'^2 + 2a'd' \operatorname{ch} a'(x+p)}{\operatorname{sh}^2 a'(x+p)} - a'^2(\omega + \frac{1}{4}) \right] \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = 0$$

et la réalisation associée, notée A_2 , prend la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} J''_{\frac{3}{2}} = -i d'_{\tau} \\ J''_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{ia'} \left[\mp \partial_x + a'(-i d'_{\tau} \pm \frac{1}{2}) \operatorname{coth} a'(x+p) + \frac{d'}{\operatorname{sh} a'(x+p)} \right] \end{array} \right. .$$

- c) le troisième cas est celui où a est imaginaire pur ($a=ia'$, a' réel), d réel et $p=p' - \frac{\pi}{2a}$, avec p' réel. La forme réelle des

équations (2-5-6) est :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{a'^2(\mu^2 - \frac{1}{4}) - d^2 + 2a'd \operatorname{sh} a'(x+p')}{\operatorname{ch}^2 a'(x+p')} - a'^2(\omega + \frac{1}{4}) \right] \varphi_\omega^\mu(x) = 0$$

La réalisation associée, $A_{\mathfrak{J}}$, est définie par :

$$\begin{cases} J_{\mathfrak{J}}'' = -i\partial_\tau \\ J_{\pm}'' = \frac{1}{ia'} \left[\mp \partial_x + a'(-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2}) \operatorname{th} a'(x+p') - \frac{d}{\operatorname{ch} a'(x+p')} \right] \end{cases} .$$

2.5.2 Factorisation de type B .

La fonction $k(x,m)$ correspondant à ce type de factorisation est:

$$k(x,m) = d e^{ax} - a(m+c) \quad (2-5-7)$$

où a , d et c sont des constantes complexes. Les opérateurs $J_{\mathfrak{J}}$, J_+ et J_- sont donc :

$$\begin{aligned} J_{\mathfrak{J}} &= -i\partial_\tau \\ J_+ &= e^{-i\tau} [-\partial_x + d e^{ax} - a(-i\partial_\tau + c + 1)] \\ J_- &= e^{-i\tau} [\partial_x + d e^{ax} - a(-i\partial_\tau + c)] \end{aligned}$$

La fonction $L(m)$ est dans ce cas :

$$L(m) = -a^2(m+c)^2 ,$$

et le commutateur de J_+ et J_- est :

$$K = -2a^2 J_{\mathfrak{J}} - a^2(2c+1) . \quad (2-5-8)$$

En utilisant des raisonnements analogues à ceux du paragraphe précédent (factorisation A), on montre que $J_{\mathfrak{J}}$, J_+ et J_- appartiennent à une réalisation d'algèbre de Lie $G(ia,b)$, où a est le paramètre

qui intervient dans l'équation (2-5-7), b est quelconque et E est un opérateur constant défini par :

$$b E = a^2(2c+1) .$$

On fait dans cette algèbre le changement de base (2-3-7), puis on lui fait subir la transformation (2-5-4). On obtient finalement une réalisation de l'algèbre B_1 définie par :

$$\begin{cases} J_3'' = -i\partial_\tau \\ J_\pm'' = \frac{1}{a} e^{\pm i\tau} [\partial_x \mp d e^{ax} \pm a(-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2})] \end{cases} \quad (2-5-9)$$

(dans cette expression, les opérateurs déplacement ont en outre été multipliés respectivement par $-i$ et i , ce qui ne modifie pas la structure de l'algèbre).

L'opérateur de Casimir de cette réalisation de B_1 est :

$$\begin{aligned} \Omega'' &= J_+'' J_-'' + (J_3'')^2 - J_3'' , \text{ c'est-à-dire :} \\ \Omega'' &= \frac{1}{a^2} \left\{ \partial_x^2 - d^2 e^{2ax} + 2ad(-i\partial_\tau) - \frac{a^2}{4} \right\} . \end{aligned}$$

Comme dans le cas de la factorisation A , les fonctions :

$$\Phi_\omega^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \varphi_\omega^\mu(x) ,$$

où les fonctions $\varphi_\omega^\mu(x)$ sont solutions de :

$$\Omega_\mu'' \varphi_\omega^\mu(x) = \omega \varphi_\omega^\mu(x) ,$$

c'est-à-dire de :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - d^2 e^{2ax} + 2ad \mu - a^2 \left(\omega + \frac{1}{4} \right) \right] \varphi_\omega^\mu(x) = 0 \quad (2-5-10)$$

forment des bases de représentations de la réalisation (2-5-9). L'équation (2-5-10) est identique à celle de Infeld et Hull avec :

$$\mu = m+c+\frac{1}{2}$$

$$\omega = -\frac{1}{a^2} \lambda - \frac{1}{4} \quad ;$$

elle n'est réelle que si a et d sont réels.

2.5.3 Factorisation de type C .

Ce type de factorisation est obtenu lorsque :

$$k(x,m) = \frac{m+c}{x} + \frac{bx}{4} \quad ,$$

où b et c sont des nombres complexes. Les opérateurs $J_{\mathcal{J}}$, J_{+} et J_{-} sont alors définis par :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_{\mathcal{J}} = -i\partial_{\tau} \\ J_{+} = e^{i\tau} \left[-\partial_x + \frac{-i\partial_{\tau} + c + 1}{x} + \frac{bx}{4} \right] \\ J_{-} = e^{-i\tau} \left[\partial_x + \frac{-i\partial_{\tau} + c}{x} + \frac{bx}{4} \right] \end{array} \right. ;$$

la fonction $L(m)$ est, dans ce cas :

$$L(m) = -bm + \frac{b}{4} \quad ,$$

et le commutateur de J_{+} et de J_{-} est donc :

$$K = -b I \quad ,$$

où I est l'opérateur identité. On peut distinguer, selon la valeur de b , deux cas, que Miller appelle respectivement factorisation de type C' et de type C'' :

- a) si b est différent de zéro, $J_{\mathcal{J}}$, J_{+} , J_{-} et $E=b I$ engendrent une réalisation de l'algèbre non semi-simple $G(0,1)$;
- b) si b est nul, $J_{\mathcal{J}}$, J_{+} et J_{-} engendrent une réalisation de

l'algèbre non semi-simple \mathcal{C}_3 . Ces résultats ne sont pas affectés si les opérateurs de l'algèbre sont transformés suivant (2-5-4). Ceci reste vrai si, de plus, on ajoute à l'opérateur J'_3 qui est obtenu par cette transformation et qui s'écrit :

$$J'_3 = -i\partial_\tau - c - \frac{1}{2} ,$$

la constante $c + \frac{1}{2}$. Les opérateurs J_3 , J_+ et J_- sont donc remplacés par :

$$\begin{cases} J''_3 = -i\partial_\tau \\ J''_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial_x + \frac{-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2}}{x} + \frac{bx}{4} \right] \end{cases} \quad (2-5-11)$$

L'invariant de l'algèbre qui est donné par la formule (2-3-8) peut s'écrire dans tous les cas (b différent de zéro ou non) :

$$\Omega'' = -\partial_x^2 + \frac{(-i\partial_\tau - \frac{1}{2})(-i\partial_\tau + \frac{1}{2})}{x^2} + \frac{b^2 x^2}{16} - \frac{b}{2} (-i\partial_\tau + 1) .$$

Comme pour les deux types précédents de factorisation, les fonctions :

$$\Phi_\omega^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \varphi_\omega^\mu(x) ,$$

où $\varphi_\omega^\mu(x)$ est solution de l'équation :

$$\Omega''_\mu \varphi_\omega^\mu(x) = \omega \varphi_\omega^\mu(x) , \quad (2-5-12)$$

forment des bases de représentations de la réalisation (qui est une réalisation de $G(0,1)$ ou de \mathcal{C}_3 suivant la valeur de b). L'équation (2-5-12) s'écrit, dans tous les cas (b différent de zéro ou non) :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{x^2} - \frac{b^2 x^2}{16} + \frac{b}{2}(\mu+1) + \omega \right] \varphi_\omega^\mu(x) = 0 \quad (2-5-13)$$

et elle devient identique à celle de Infeld et Hull si on effectue les remplacements suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} b \rightarrow 2b' \\ \mu \rightarrow m+c+\frac{1}{2} \\ \omega \rightarrow \lambda-2b'(c+\frac{3}{4}) \end{array} \right.$$

(on appelle ici b' le paramètre qui est noté b par ces auteurs) ; elle est réelle si b est réel.

2.5.4 Factorisation de type D .

La fonction $k(x,m)$ qui conduit à ce type de factorisation est définie par :

$$k(x,m) = \frac{bx}{2} + d \quad ,$$

où b et d sont des constantes complexes. Les opérateurs $J_{\mathcal{J}}$, J_{+} et J_{-} définis par les équations (2-4-6), (2-4-8) et (2-4-10) sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_{\mathcal{J}} = i\partial_{\tau} \\ J_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left(\frac{\mp}{+} \partial_x + \frac{bx}{2} + d \right) \end{array} \right. \quad (2-5-14)$$

La fonction $L(m)$ est, dans ce cas :

$$L(m) = -bm \quad ,$$

et le commutateur de J_{+} et J_{-} est par conséquent (équation (2-4-12)):

$$K = -b I \quad ,$$

où I est l'opérateur identité. Comme dans le cas de la factorisation C , on peut, suivant la valeur de b , distinguer deux types de factorisation D , appelés respectivement D' et D'' par Miller :

a) si b est différent de zéro, $J_{\mathcal{J}}$, J_{+} , J_{-} et $E=b I$ engendrent

une réalisation de l'algèbre $G(0,1)$;

b) si b est nul, J_3 , J_+ et J_- engendrent une réalisation de l'algèbre \mathfrak{g} .

L'invariant peut s'écrire dans les deux cas (équation (2-3-8)) :

$$\Omega = J_+ J_- - b J_3 \quad , \quad (2-5-15)$$

soit :

$$\Omega = -\partial_x^2 + \left(\frac{bx}{2} + d\right)^2 - b(-i\partial_\tau + \frac{1}{2}) \quad .$$

Les fonctions $\Phi_\omega^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \varphi_\omega^\mu(x)$, où les fonctions $\varphi_\omega^\mu(x)$ sont solutions de :

$$\Omega_\mu \varphi_\omega^\mu(x) = \omega \varphi_\omega^\mu(x) \quad (2-5-16)$$

sont des fonctions de base de représentations de la réalisation de $G(0,1)$ ou de \mathfrak{g} définie ci-dessus. L'équation (2-5-16) s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{bx}{2} + d\right)^2 + b\left(\mu + \frac{1}{2}\right) + \omega \right] \varphi_\omega^\mu(x) = 0 \quad . \quad (2-5-17)$$

Cette équation devient identique à l'équation de type D de Infeld et Hull (si l'on excepte le fait que leur paramètre b est le double du nôtre) quand on y fait les remplacements suivants :

$$\begin{cases} \mu \rightarrow m \\ \omega \rightarrow \lambda \end{cases} .$$

Signalons que si b est nul l'équation (2-5-17) prend une forme très simple et peut être résolue de manière classique. Ce cas ne sera donc plus considéré par la suite.

Si b n'est pas nul, les équations (2-5-17) dans lesquelles $b\mu + \omega$ a une valeur donnée sont toutes identiques et on peut, par

exemple, n'étudier que le cas où $\omega=0$. Il est d'ailleurs possible d'obtenir, à partir de la réalisation précédente de $G(0,1)$, une autre réalisation dont l'invariant est identiquement nul : on fait subir aux opérateurs de l'algèbre une transformation qui ne modifie pas la structure de l'algèbre et qui est définie par :

$$\begin{cases} X' = U X U^{-1} \\ U = \exp(-i \frac{\Omega}{b} \tau) \end{cases} ,$$

où Ω est l'invariant dont l'expression est donnée par l'équation (2-5-15). Les opérateurs de la nouvelle réalisation sont :

$$\begin{cases} J'_3 = J_3 + \frac{\Omega}{b} = \frac{1}{b} [-\partial_x^2 + (\frac{bx}{2} + d)^2 - \frac{b}{2}] \\ J'_\pm = J_\pm \\ E' = E \end{cases} \quad (2-5-18)$$

Les deux dernières égalités sont dues à ce que J_+ , J_- et E commutent avec Ω et ne contiennent pas d'opérateur différentiel agissant sur τ . L'invariant de cette réalisation de $G(0,1)$ est :

$$\begin{aligned} \Omega' &= J'_+ J'_- - E' J'_3 \\ &= J_+ J_- - b(J_3 + \frac{\Omega}{b}) \\ &= J_+ J_- - bJ_3 - \Omega \end{aligned} .$$

Etant donnée l'expression de Ω (équation (2-5-15)), Ω' est donc identiquement nul. De plus, dans les équations (2-5-18) qui définissent la réalisation, la variable τ est manifestement superflue ; les équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_{\mathfrak{Z}}'' = \frac{1}{b} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{bx}{2} + d\right)^2 - \frac{b}{2} \right] \\ J_{\mathfrak{I}}'' = \mp \frac{d}{dx} + \frac{bx}{2} + d \\ E'' = b I \end{array} \right. \quad (2-5-19)$$

définissent une réalisation de $G(0,1)$ par des opérateurs différentiels à une seule variable (mais du premier et du second ordre). Les solutions de l'équation (2-5-17) forment des bases de représentations de cette dernière réalisation. Si on pose : $\mu' = \mu + \frac{\omega}{b}$ et $\varphi_{\omega}^{\mu}(x) = \varphi_0^{\mu'}(x)$, l'équation (2-5-17) est identique à :

$$J_{\mathfrak{Z}}'' \varphi_0^{\mu'}(x) = \mu' \varphi_0^{\mu'}(x) .$$

2.5.5. Factorisation de types E et F .

Pour ces deux types de factorisation, contrairement aux autres, la méthode décrite dans le paragraphe 2-4 ne permet pas d'introduire des réalisations d'algèbres de Lie. En effet, les fonctions $k(x,m)$ qui conduisent respectivement aux équations factorisables de type E et de type F sont :

$$k_E(x,m) = m a \cotg a(x+p) + \frac{q}{m}$$

$$k_F(x,m) = \frac{m}{x} + \frac{q}{m} ,$$

où a , p et q sont des nombres complexes quelconques. Les fonctions $L(m)$ associées sont respectivement :

$$L_E(m) = a^2 m^2 - \frac{q^2}{m}$$

$$L_F(m) = -\frac{q^2}{m^2} .$$

Par conséquent si, pour chacun de ces types de factorisation, on

définit les opérateurs J_3 , J_+ et J_- les équations (2-4-6), (2-4-8) et (2-4-10), les commutateurs K de J_+ et J_- , dont l'expression est donnée par (2-4-12) sont respectivement :

$$K_E = 2a^2(-i\partial_\tau + \frac{1}{2}) - q^2[(-i\partial_\tau + 1)^{-2} - (-i\partial_\tau)^{-2}]$$

$$K_F = -q^2[(-i\partial_\tau + 1)^{-2} - (-i\partial_\tau)^{-2}] .$$

Dans les deux cas l'opérateur K ne satisfait pas aux relations de commutation (2-3-2) et (2-3-5) ; par conséquent (voir paragraphe 2-3), les opérateurs J_3 , J_+ et J_- définis ci-dessus n'appartiennent pas à une réalisation d'algèbre de Lie de dimension inférieure ou égale à 4. On peut d'ailleurs montrer qu'ils n'appartiennent à aucune algèbre de Lie de dimension finie.

Toutefois, comme le montrent Infeld et Hull (1951), il est possible, par des changements de variable et de fonction, de transformer les équations factorisables de type E et F en des équations qui sont respectivement de type A et B ; on peut alors utiliser les réalisations de l'algèbre B_1 qui sont introduites pour ces équations. Ces transformations sont étudiées dans le paragraphe 2.6 .

Les résultats précédents peuvent être résumés de la façon suivante :

Aux équations factorisables de type A, B, C et D sont associées des réalisations d'algèbres de Lie par des opérateurs différentiels du premier ordre à deux variables . La correspondance est la suivante:

$$\begin{aligned}
 A, B &\longleftrightarrow B_1 \\
 C', D' &\longleftrightarrow G(0,1) \\
 C'', D'' &\longleftrightarrow \mathcal{C}_3.
 \end{aligned}$$

Ces équations factorisables peuvent être mises sous la forme :

$$\Omega_\mu \varphi_\omega^\mu(x) = \omega \varphi_\omega^\mu(x), \quad (2-5-20)$$

où Ω_μ est obtenu à partir d'un invariant de l'algèbre, et les fonctions $e^{i\mu\tau} \varphi_\omega^\mu(x)$ sont des fonctions de base de représentations de l'algèbre. Ces équations factorisables (mises sous la forme (2-5-20)) et les réalisations d'algèbres correspondantes se trouvent dans le tableau (2).

2.6 Utilisations indirectes de la méthode.

Dans la perspective de ce travail, c'est-à-dire l'étude des systèmes quantiques exactement solubles, il est essentiel de savoir si les équations factorisables de type A, B, C et D sont les seules équations du type (2-2-5) (équations à une variable provenant d'équations de Schrödinger ou de Dirac séparables) pour l'étude desquelles on peut introduire et utiliser des réalisations d'algèbres de Lie. Le but de ce paragraphe est d'indiquer quelques méthodes permettant de relier ces quatre types d'équations à d'autres équations de la forme (2-2-5) ; on peut alors utiliser, dans l'étude d'équations autres que ces quatre équations factorisables, les réalisations d'algèbres de Lie introduites précédemment. Plus précisément, nous montrons comment les solutions de certaines équations de la forme (2-2-5) peuvent être déduites de celles d'équations factorisables A, B, C ou D, et donc

liées à des fonctions de base de représentations des réalisations d'algèbres de Lie correspondantes. Toutefois les valeurs propres de J_3 et Ω associées à ces fonctions de base sont en général reliées aux nombres quantiques de l'équation initiale de façon assez compliquée. Parmi les méthodes examinées ici, deux rentrent dans le cadre de la factorisation "artificielle" de Infeld et Hull ; la troisième repose sur l'utilisation de changements de variable. Quelques exemples, qui illustrent l'emploi de ces méthodes et qui sont importants pour les applications, sont décrits plus en détail.

2.6.1 Factorisation "artificielle".

La factorisation "artificielle", introduite par Infeld et Hull afin d'élargir le domaine d'application de la méthode de factorisation, fournit exactement ce que nous cherchons ici : des procédés permettant de trouver des équations autres que les équations factorisables type dont les solutions peuvent être déduites de celles d'équations factorisables. Nous décrivons ici deux des possibilités introduites par Infeld et Hull.

a) Soit une équation factorisable de type A, B, C ou D, écrite sous la forme (2-5-20) :

$$\Omega_{\mu} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = \omega \varphi_{\omega}^{\mu}(x) \quad , \quad (2-6-1)$$

on considère l'équation suivante (qui n'est pas factorisable) :

$$[\Omega_{\mu} + f(\mu)] \varphi_{\lambda}^{\mu}(x) = \lambda \varphi_{\lambda}^{\mu}(x) \quad , \quad (2-6-2)$$

où $f(\mu)$ est indépendant de x . Il est clair que les valeurs

propres de l'équation (2-6-2) se déduisent de celles de (2-6-1) par :

$$\lambda = \omega + f(\mu) \quad ;$$

les solutions correspondantes sont :

$$\psi_{\lambda}^{\mu}(x) = \varphi_{\lambda-f(\mu)}^{\mu}(x) \quad .$$

Par conséquent les fonctions $e^{i\mu\tau} \psi_{\lambda}^{\mu}(x)$ sont des fonctions de base de représentations de la réalisation d'algèbre de Lie associée à l'équation (2-6-1) ; cependant la correspondance entre les nombres quantiques λ et μ de l'équation et les valeurs propres des opérateurs de l'algèbre n'est pas aussi simple que pour l'équation (2-6-1) : μ est bien la valeur propre de J_3 , mais la valeur propre de Ω est $\lambda - f(\mu)$.

b) Soit q un paramètre intervenant dans l'expression de l'opérateur Ω_{μ} de l'équation (2-6-1). On obtient une équation différentielle en remplaçant dans l'expression de Ω_{μ} le paramètre q par une fonction de μ ; on écrit cette équation :

$$\overline{\Omega}_{\mu} \overline{\varphi}_{\omega}^{\mu}(x) = \overline{\omega} \overline{\varphi}_{\omega}^{\mu}(x) \quad . \quad (2-6-3)$$

Les valeurs propres et fonctions propres de cette équation pour chaque valeur de μ sont déduites de celles de l'équation (2-6-1) en y remplaçant le paramètre q par la fonction $f(\mu)$. Les fonctions $e^{i\mu\tau} \overline{\varphi}_{\omega}^{\mu}(x)$ sont des fonctions de base de représentations d'une réalisation d'algèbre de Lie qui est déduite de celle associée à l'équation (2-6-1) en y remplaçant, pour chaque valeur de μ , q par $f(\mu)$: il s'agit donc d'une réalisation différente pour chaque valeur de μ .

2.6.2 Changements de variable.

Soit une équation factorisable de type A , B , C ou D , écrite sous la forme (2-6-1) ; on peut faire un changement de variable, défini par :

$$x = f(y) ,$$

et une transformation de l'espace des fonctions, définie par :

$$\varphi(x) = U(y) \psi(y) .$$

Chaque opérateur X de la réalisation d'algèbre de Lie associée à l'équation (2-6-1) est alors remplacé par :

$$X' = U^{-1} X U ,$$

et les relations de commutation restent les mêmes. Les fonctions :

$$\Psi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \psi_{\omega}^{\mu}(y) = e^{i\mu\tau} U^{-1} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) ,$$

où $\varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ est solution de (2-6-1), sont des fonctions de base de représentations de cette nouvelle réalisation d'algèbre de Lie et les fonctions $\psi_{\omega}^{\mu}(y)$ sont solutions de :

$$U^{-1} \Omega_{\mu} U \psi_{\omega}^{\mu}(y) = \omega \psi_{\omega}^{\mu}(y) . \quad (2-6-4)$$

Il est possible de choisir U(y) de manière que l'équation (2-6-4) ne fasse pas intervenir de dérivée première. Il suffit de prendre :

$$U(y) = \left[\frac{df(y)}{dy} \right]^{\frac{1}{2}} .$$

Dans ce cas, si l'équation (2-6-1) s'écrit, de façon plus détaillée :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + R(x, \mu) + \omega \right] \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = 0 ,$$

l'équation (2-6-4) s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{3[f''(y)]^2}{4[f'(y)]^2} + \frac{1}{2} \frac{f'''(y)}{f'(y)} + [f'(y)]^2 \{R[f(y), \mu] + \omega\} \right] \psi_{\omega}^{\mu}(y) = 0 .$$

Il arrive que cette équation soit de la forme (2-2-5), c'est-à-dire :

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} + r(y, m) + \lambda \right] Y_{\lambda}^m(y) ;$$

ceci signifie qu'on peut établir entre λ et m , d'une part, et ω et μ , d'autre part, une correspondance, qui s'écrit de façon générale :

$$\begin{cases} \mu = f(\lambda, m) \\ \omega = g(\lambda, m) \end{cases} . \quad (2-6-5)$$

Les fonctions $e^{i[f(\lambda, m)]\tau} Y_{\lambda}^m(y)$ sont des fonctions de base de représentations de la réalisation d'algèbre de Lie qui agit sur la variable y . Toutefois les valeurs propres de J_3 et de Ω ne sont pas m et λ mais des fonctions, plus ou moins compliquées, de ces nombres (équations (2-6-5)).

2.6.3 Exemples.

Les procédés décrits précédemment, qui permettent d'obtenir de nouvelles équations à partir des équations factorisables A , B , C ou D , peuvent être employés séparément ou simultanément et les cas auxquels ils peuvent s'appliquer sont variés. L'utilisation de tels procédés est ici seulement illustrée par deux exemples, qui sont par ailleurs importants pour l'application de la méthode à des cas physiques.

Le premier cas est celui des équations factorisables de type F , que nous écrivons ici :

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{m(m+1)}{y^2} + \frac{2q}{y} + \lambda \right] Y_{\lambda}^m(y) = 0 \quad . \quad (2-6-7)$$

Nous avons montré (paragraphe 2.5.5) qu'on ne peut pas introduire une réalisation d'algèbre de Lie associée à cette équation en suivant la méthode utilisée pour les autres types d'équations factorisables. Cependant une équation analogue à (2-6-7) peut être déduite de l'équation factorisable de type B ; la réalisation de l'algèbre de Lie B_1 associée à cette dernière est donc aussi, indirectement, associée à l'équation (2-6-7). En effet, si dans l'équation factorisable de type B :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - d^2 e^{2ax} + 2ad\mu e^{ax} - a^2\left(\omega + \frac{1}{4}\right) \right] \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = 0 \quad ,$$

on fait les changements de variable et de fonction définis par :

$$\begin{cases} x = \frac{1}{a} \text{Log } y \\ \varphi(x) = U(y) \phi(y) \\ U(y) = y^{-\frac{1}{2}} \quad , \end{cases}$$

on obtient l'équation suivante :

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{\omega}{y^2} + 2 \frac{d}{a} \frac{\mu}{y} - \frac{d^2}{a^2} \right] \phi_{\omega}^{\mu}(y) = 0 \quad . \quad (2-6-8)$$

On remplace ensuite dans cette équation le paramètre $\frac{d}{a}$ par une fonction de μ (cf. paragraphe 2.6.1 b)) qui est $f(\mu) = \frac{q}{\mu}$, où q est la constante qui intervient dans l'équation (2-6-7). On obtient alors

l'équation suivante :

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{\bar{\omega}}{y^2} + \frac{2q}{y} - \frac{q^2}{\mu^2} \right] \bar{\psi}_{\bar{\omega}}^{\mu}(y) = 0 \quad (2-6-9)$$

Cette équation est identique à l'équation (2-6-7), pourvu que :

$$\begin{cases} \bar{\omega} = m(m+1) \\ \mu^2 = -\frac{q^2}{\lambda} \end{cases},$$

ce qui n'est d'ailleurs possible que si λ est négatif. En utilisant à la fois les résultats des paragraphes 2.6.1 b) et 2.6.2, on montre que les fonctions $\exp(i \frac{q}{\sqrt{-\lambda}} \tau) Y_{\lambda}^m(y)$ sont des fonctions de base de représentation d'une réalisation de l'algèbre de Lie B_1 qui est différente pour chaque valeur de λ ; les opérateurs de cette algèbre sont :

$$\begin{cases} J_3 = -i\partial_{\tau} \\ J_{\pm} = e^{\pm i\tau} [y \partial_y \pm \sqrt{-\lambda} y \mp i\partial_{\tau}] \end{cases}.$$

Le passage de l'équation (2-6-8) à l'équation (2-6-7) peut être interprété un peu différemment. On peut introduire une variable z_{μ} , dont la définition est différente pour chaque valeur de μ , en posant :

$$y = \frac{q}{\mu} \frac{a}{d} z_{\mu}.$$

L'équation (2-6-8) devient alors :

$$\left[\frac{d^2}{dz_{\mu}^2} - \frac{\omega}{z_{\mu}^2} + 2 \frac{q}{z_{\mu}} - \frac{q^2}{\mu^2} \right] F_{\omega}^{\mu}(z_{\mu}) = 0$$

Les solutions de l'équation (2-6-7) sont donc déduites de celles de l'équation (2-6-8) grâce à :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_{\lambda}^m(y) = \psi_{\omega}^{\mu} \left(\frac{qa}{\mu d} y \right) \\ \omega = m(m+1) \\ \mu^2 = -\frac{q^2}{\lambda} \end{array} \right. , \quad (2-6-10)$$

Les fonctions $e^{i\mu\tau} \psi_{\omega}^{\mu}(y)$ étant des fonctions de base d'une seule réalisation de B_1 , définie par :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_3 = -i\partial_{\tau} \\ J_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left[y \partial_y \mp \frac{d}{a} y \mp i\partial_{\tau} \right] \end{array} \right.$$

On peut même, étant donnée la forme de la relation (2-6-10), introduire une réalisation de B_1 dont les fonctions de base sont $e^{i\mu\tau} Y_{\lambda}^m(y)$. Cependant, ceci nécessite l'emploi d'opérateurs dilatation D_{α} , définis par :

$$D_{\alpha} f(x) = f(\alpha x)$$

et l'intérêt d'une telle algèbre est surtout formel ; il est discuté dans la dernière partie, à propos d'une équation factorisable de type F particulière : l'équation radiale de l'atome d'hydrogène.

Le second cas est celui des équations factorisables B et C'. Comme l'ont montré Infeld et Hull, toute équation de type B peut être transformée en une équation de type C' et réciproquement : par conséquent, à chacun de ces deux types d'équations sont associées à la fois une réalisation d'algèbre de Lie B_1 et une réalisation de $G(0,1)$ (l'une directement, l'autre indirectement). On écrit respectivement les équations factorisables de type B et C' sous la

forme :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - d^2 e^{2ax} + 2ad\mu e^{ax} - a^2\left(\omega + \frac{1}{4}\right) \right] \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = 0$$

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - \frac{\mu'^2 - \frac{1}{4}}{y^2} - \frac{b^2}{16} y^2 + \frac{b}{2}(\mu'+1) + \omega' \right] \psi_{\omega'}^{\mu'}(y) = 0$$

Les changements de variables et de fonction utilisés pour transformer ces équations sont :

$$\begin{cases} x = \frac{2}{a} \text{Log } y \\ \varphi(x) = y^{-\frac{1}{2}} \psi(y) \end{cases} ,$$

ou les changements inverses. Ceci étant, les deux équations sont équivalentes si :

a) les paramètres qui interviennent dans les deux équations sont liés par :

$$b = 8 \frac{d}{a} ;$$

b) les nombres quantiques de ces deux équations sont reliés par les relations suivantes (où Φ est défini par $\omega = \Phi(\Phi+1)$) :

$$\begin{cases} \Phi = \frac{\mu'-1}{2} \\ \mu = \frac{\omega'}{b} + \frac{\mu'+1}{2} \end{cases} ,$$

ou les relations inverses :

$$\begin{cases} \frac{\omega'}{b} = \mu - \Phi - 1 \\ \mu' = 2\Phi + 1 \end{cases} .$$

Finalement les solutions des équations factorisables de type B ou

C' interviennent à la fois dans des fonctions de base de représentations d'une réalisation de B_1 et dans celles d'une réalisation de $G(0,1)$. Les valeurs propres correspondantes des opérateurs J_3 et Ω sont évidemment différentes selon qu'il s'agit de l'algèbre B_1 ou $G(0,1)$; ces valeurs propres sont réunies dans le tableau suivant:

algèbre équation	B_1	$G(0,1)$
B	$\Omega : \Phi(\Phi+1)$ $J_3 : \mu$	$\Omega' : b(\mu-\Phi-1)$ $J_3' : 2\Phi+1$
C'	$\Omega : \frac{\mu'^2-1}{2}$ $J_3 : \frac{\omega'}{b} + \frac{\mu'+1}{2}$	$\Omega' : \omega'$ $J_3' : \mu'$

1. RELATIONS DE COMMUTATION ET INVARIANTS
 DES ALGÈBRES DE LIE B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{C}_3 .

$$\begin{aligned}
 B_1 \quad [J_3, J_{\pm}] &= \pm J_{\pm} \\
 [J_+, J_-] &= 2J_3 \\
 \Omega &= J_+ J_- + (J_3)^2 - J_3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G(0,1) \quad [J_3, J_{\pm}] &= \pm J_{\pm} \\
 [J_+, J_-] &= -E \\
 [J_3, E] &= [J_{\pm}, E] = 0 \\
 \Omega &= J_+ J_- - E J_3
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{C}_3 \quad [J_3, J_{\pm}] &= \pm J_{\pm} \\
 [J_+, J_-] &= 0 \\
 \Omega &= J_+ J_-
 \end{aligned}$$

2. EQUATIONS FACTORISABLES ET ALGEBRES DE LIE ASSOCIEES.

Type de factorisation	Equations	Algebre de Lie associee	Operateurs de base	Nom de la realisation
A	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{a^2(\mu - \frac{1}{4}) + d^2 + 2ad\mu \cos a(x+p)}{\sin^2 a(x+p)} \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	B_1	$J_\pm = -i\partial_x \mp \frac{e^{\pm i\tau}}{a} \left[\mp \partial_x + (-i\partial_x \pm \frac{1}{2})a \cot a(x+p) + \frac{d}{\sin a(x+p)} \right]$	A_1 a, d, p réels A_2 a, d imag. p réel A_3 a imag. d réel $p = p' - \frac{\pi}{2a}, p'$ réel
B	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - d^2 e^{2ax} + 2ad\mu e^{ax} - a^2(\omega + \frac{1}{4}) \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	B_1	$J_\pm = -i\partial_x \mp \frac{e^{\pm i\tau}}{a} \left[\partial_x \mp de^{ax} \pm a(-i\partial_x \pm \frac{1}{2}) \right]$	B a, d réels
C	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\mu - \frac{1}{4}}{x^2} - \frac{b^2 x^2}{16} + \frac{b(\mu+1)+\omega}{2} \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	$\left. \begin{array}{l} \text{si } b \neq 0, G(01) \\ \text{si } b=0, \mathcal{G}_3 \end{array} \right\}$	$J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial_x + \frac{-i\partial_x \pm \frac{1}{2}}{x} + \frac{bx}{4} \right]$ $E = b I$ $J_\pm = -i\partial_x \mp \frac{(-i\partial_x \pm \frac{1}{2})}{x}$	C' b réel C''
D	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{bx}{2} + d \right)^2 + b(\mu + \frac{1}{2}) + \omega \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	$\left. \begin{array}{l} \text{si } b \neq 0, G(01) \\ \text{si } b=0, \mathcal{G}_3 \end{array} \right\}$	$J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial_x + \frac{bx}{2} + d \right]$ $E = b I$ $J_\pm = -i\partial_x \mp \frac{(-i\partial_x \pm \frac{1}{2})}{x}$	D' b, d réels D'' d réel

CHAPITRE 3

REPRESENTATIONS.

3.1 Introduction

Nous avons montré dans le chapitre précédent que l'équation d'onde d'un système physique conduit, lorsqu'elle est séparable, à des équations différentielles du second ordre à une variable qui peuvent, dans certaines conditions, être mises sous la forme :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + r(x,m) + \lambda \right] \varphi_{\lambda}^m(x) = 0 \quad (3-1-1)$$

Nous avons montré également que si cette équation est une équation factorisable de type A, B, C ou D, ou encore si on peut la relier à une de ces équations en utilisant les méthodes décrites dans le paragraphe 2.6, les solutions sont liées à des fonctions de base de représentations d'une réalisation d'algèbre de Lie (les différents types d'équations factorisables et les réalisations associées se trouvent dans le tableau (2)). Nous écrivons l'équation factorisable sous une forme équivalente :

$$\Omega_{\mu} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) = \omega \varphi_{\omega}^{\mu}(x) \quad ; \quad (3-1-2)$$

μ est égal à m à une constante additive près et ω est lié à λ par une relation linéaire. Nous avons vu que, dans ce cas, les fonctions :

$$\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) \quad (3-1-3)$$

sont des fonctions de base de représentations de la réalisation ; μ est la valeur propre de l'opérateur J_3 et ω celle de l'invariant Ω de la réalisation.

Ainsi l'étude des solutions de l'équation d'onde à une variable (3-1-1) se ramène dans certains cas à celle des fonctions de base de représentations d'une des réalisations d'algèbres de Lie du tableau (2). Cependant les solutions de l'équation (3-1-1) ne sont pas toutes des solutions physiques ; l'équation est accompagnée d'une condition de normalisation. Cette condition peut être, par l'introduction d'un produit scalaire dans l'espace de représentation de la réalisation, transférée aux fonctions de base qui sont associées aux solutions de (3-1-1) : elle est alors liée à la condition d'unitarité des représentations de la réalisation de l'algèbre de Lie.

La démarche suivie dans ce chapitre est la suivante :

Nous discutons tout d'abord le lien entre la condition de normalisation des solutions physiques et la condition d'unitarité des représentations.

Nous étudions ensuite les représentations des réalisations d'algèbre de Lie introduites au chapitre précédent, afin de trouver

toutes les fonctions de base associées à des solutions physiques.

Une étape préliminaire à l'étude des représentations des réalisations d'algèbres de Lie considérées est l'étude des représentations des algèbres abstraites correspondantes, B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{L}_3 ; il s'agit pour une grande part de rappels indispensables pour la cohérence de l'exposé.

En ce qui concerne les réalisations, nous montrons d'abord qu'il est possible de construire explicitement les fonctions de base des espaces de représentations irréductibles dont le spectre de J_3 est borné ; si l'on cherche à construire ainsi les espaces des représentations unitaires des algèbres abstraites, il apparaît, pour certaines réalisations, des conditions supplémentaires faisant intervenir des paramètres (tels que a , b ou d dans le tableau (2)) qui entrent dans la définition de ces réalisations.

Enfin, sauf si l'algèbre de Lie est celle d'un groupe d'invariance du système physique, il est impossible d'affirmer que les fonctions de base normées associées aux solutions physiques engendrent des espaces de représentation et donc appartiennent à des représentations unitaires ; elles peuvent appartenir à des représentations "partiellement" unitaires, dont nous donnons la liste dans le tableau (5).

Dans le dernier paragraphe, nous rappelons les expressions de certains coefficients de Clebsch-Gordan de l'algèbre réelle $\mathcal{SO}(2,1)$, qui est la plus importante pour les applications ; ceux-ci permettent d'étudier les représentations du produit direct de deux algèbres $\mathcal{SO}(2,1)$. Nous montrons que ces résultats peuvent être utilisés pour une autre définition du couplage de deux algèbres $\mathcal{SO}(2,1)$ (ce couplage

particulier permet de calculer certaines intégrales à deux corps, en particulier les intégrales de Slater hydrogénoïdes).

3.2 Condition de normalisation et unitarité.

De façon générale la condition de normalisation qui accompagne l'équation (3-1-1) peut s'écrire :

$$\int_D [\varphi_\omega^\mu(x)]^2 f(x) dx = 1 \quad , \quad (3-2-1)$$

ou, si le spectre de Ω_μ est continu :

$$\int_D \varphi_\omega^\mu(x) \varphi_{\omega'}^\mu(x) f(x) dx = \delta(\omega - \omega') \quad , \quad (3-2-2)$$

où $\delta(x)$ est la distribution de Dirac ; dans les deux cas l'intégration est faite sur le domaine D de la variable physique. Nous avons d'ailleurs montré que si l'équation (3-1-1) provient d'une équation de Schrödinger à trois dimensions la fonction $f(x)$ est alors égale à 1.

Pour pouvoir introduire une condition analogue sur les fonctions de base associées aux solutions, nous définissons dans l'espace des fonctions de x et de τ le produit scalaire suivant :

$$(\Phi | \Phi') = \int_0^{2\pi} \frac{d\tau}{2\pi} \int_D \Phi(x, \tau)^* \Phi'(x, \tau) f(x) dx \quad . \quad (3-2-3)$$

Ainsi, si les fonctions $\varphi_\omega^\mu(x)$ vérifient les conditions (3-2-1), ou (3-2-2), les fonctions qui leur sont associées par (3-1-3) vérifient les conditions suivantes :

$$(\Phi_\omega^\mu | \Phi_\omega^\mu) = 1 \quad (3-2-4)$$

$$\text{ou } (\Phi_\omega^\mu | \Phi_{\omega'}^\mu) = \delta(\omega - \omega') \quad . \quad (3-2-5)$$

De plus, étant donné la forme du produit scalaire et celle des fonctions de base Φ_{ω}^{μ} , on voit que si $\mu - \mu'$ est un entier (ce qui est toujours le cas à l'intérieur d'une représentation non réductible, comme nous le verrons) les fonctions Φ_{ω}^{μ} et $\Phi_{\omega}^{\mu'}$ sont orthogonales ; on a, dans ce cas :

$$(\Phi_{\omega}^{\mu} | \Phi_{\omega}^{\mu'}) = \delta_{\mu, \mu'} \quad (3-2-6)$$

$$\text{ou } (\Phi_{\omega}^{\mu} | \Phi_{\omega'}^{\mu'}) = \delta_{\mu, \mu'} \delta(\omega - \omega') \quad (3-2-7)$$

Nous avons implicitement utilisé, dans l'équation (3-2-5), une définition généralisée du produit scalaire, qui est celle qu'on utilise habituellement pour l'étude des spectres continus, et où le produit scalaire peut être défini comme une distribution. Les fonctions Φ_{ω}^{μ} qui sont associées à des solutions physiques sont donc, avec cette définition, normées (conditions (3-2-4) ou (3-2-5)). Si un ensemble de telles fonctions engendre l'espace d'une représentation de l'algèbre, cette représentation est unitaire puisque la norme est conservée. Ce résultat est évident pour les fonctions normées au sens strict (équation (3-2-4)) et nous admettons ici qu'on peut sans difficultés généraliser la définition de l'unitarité et considérer comme unitaires les représentations dont toutes les fonctions de base sont normées, que ce soit par des relations du type (3-2-4) ou du type (3-2-5). Cependant, sauf si l'algèbre de Lie introduite est celle d'un groupe d'invariance du système physique, on ne peut pas affirmer que les fonctions Φ_{ω}^{μ} normées qui sont associées aux fonctions d'onde φ_{ω}^{μ} engendrent des espaces de représentations. Les opérateurs J_{+} et J_{-} ,

qui sont en général définis sans référence à des transformations physiques du système, ne conservent pas nécessairement la norme des fonctions de base. Par conséquent les fonctions Φ_{ω}^{μ} normées peuvent appartenir à des espaces de représentations contenant aussi des fonctions qui ne sont pas normalisables ; ces représentations ne sont alors pas unitaires. Il est donc nécessaire, pour étudier les solutions physiques de l'équation (3-1-2), de trouver toutes les fonctions de base Φ_{ω}^{μ} normées des représentations de la réalisation d'algèbre de Lie associée, que ces représentations soient ou non unitaires.

3.3 Représentations des algèbres de Lie abstraites B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 .

Ce paragraphe est consacré à l'étude des représentations irréductibles et unitaires des trois algèbres abstraites B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 . Nous nous limitons aux représentations pour lesquelles les valeurs propres de J_3 sont de multiplicité égale à 1. Ceci est justifié par le fait que notre but est avant tout d'étudier des fonctions d'onde, c'est-à-dire des solutions normalisables de (3-1-2) ; or, il existe au plus une solution normée par couple de valeurs de μ et de ω . Par conséquent, à la fonction de base associée à cette solution correspond, dans la représentation pour laquelle la valeur propre de l'invariant est ω , une valeur propre de J_3 qui est simple.

Les représentations irréductibles des algèbres $G(a,b)$ pour lesquelles les valeurs propres de J_3 sont simples ont été étudiées par Miller (1968). Les résultats concernant les algèbres B_1 et \mathcal{E}_3 s'en déduisent sans difficulté. Nous indiquons cependant une méthode

qui permet d'obtenir directement ces résultats : cette méthode repose en effet sur une construction des espaces de représentation à partir d'un vecteur particulier, construction qui peut être utilisée afin d'obtenir explicitement les fonctions de base de représentations des différentes réalisations des algèbres B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 que nous étudions.

L'étude des conditions d'unitarité des représentations conduit à la recherche des algèbres réelles dont chacune des trois algèbres est la complexification. Pour l'algèbre simple B_1 , les deux algèbres réelles ainsi que les conditions d'unitarité des représentations sont bien connues (Barut et Fronsdal 1965). Par contre pour les deux autres algèbres nous avons dû établir les résultats correspondants ; en effet, Miller n'étudie pas les représentations unitaires des algèbres réelles associées, mais les représentations irréductibles de $G(0,1)$ et $G(0,0)$ qui induisent et sont induites par des représentations unitaires des groupes de Lie réels locaux S_4 et E_3 , et il obtient donc des conditions différentes.

3.3.1 Construction des espaces de représentations et classification des représentations irréductibles.

L'objet de ce paragraphe est d'obtenir les conditions d'irréductibilité des représentations des algèbres abstraites B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 en étudiant la construction des espaces de représentations à partir d'un vecteur propre de J_3 dont la valeur propre est simple. Ceci conduit à des bases de représentations sur lesquelles J_3 et Ω (et E pour $G(0,1)$), sont diagonaux.

Soit μ_1 une valeur propre de J_3 de multiplicité égale à 1 et u le vecteur propre correspondant ; u est aussi, puisque la valeur propre est simple, vecteur propre des opérateurs qui commutent avec J_3 , donc de Ω dans tous les cas et de E dans le cas de l'algèbre $G(0,1)$. On note ω et e les valeurs propres correspondantes.

Considérons tous les vecteurs qui résultent de l'action sur u d'opérateurs J_+ et J_- en nombre quelconque et dans un ordre quelconque. Ces vecteurs engendrent le plus petit sous-espace invariant par rapport aux opérateurs de l'algèbre qui contienne u . Il est facile de montrer, à partir des relations de commutation de l'algèbre (tableau (1)), que chacun de ces vecteurs est, s'il n'est pas nul, vecteur propre de J_3 et de Ω dans les trois cas, et de E dans le cas de $G(0,1)$. Si on appelle respectivement n_+ et n_- les nombres de fois qu'apparaissent les opérateurs J_+ et J_- dans l'expression du vecteur, les valeurs propres de J_3 , Ω et E sont respectivement $\mu = \mu_1 + n_+ - n_-$, ω et e .

A partir de l'expression de l'invariant Ω (tableau (1)), on peut exprimer, dans les trois cas, les opérateurs J_+J_- et J_-J_+ en fonction de Ω et J_3 (et E pour $G(0,1)$). On a respectivement pour B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{C}_3 :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_+J_- = \Omega - (J_3)^2 + J_3 \quad \text{et} \quad J_-J_+ = \Omega - (J_3)^2 - J_3, \\ J_+J_- = \Omega + E J_3 \quad \text{et} \quad J_-J_+ = \Omega + E J_3 + E, \\ J_+J_- = J_-J_+ = \Omega. \end{array} \right. \quad (3-3-1)$$

Par conséquent, tout vecteur propre de Ω et de J_3 (et de E) est

vecteur propre de $J_+ J_-$ et de $J_- J_+$; d'après les équations (3-3-1), les valeurs propres peuvent s'écrire respectivement $f(\omega, \mu)$ et $f(\omega, \mu+1)$ où $f(\omega, \mu)$ est :

$$\begin{aligned} f(\omega, \mu) &= \omega - \mu^2 + \mu, \text{ pour } B_1, \\ f(\omega, \mu) &= \omega + e \mu, \text{ pour } G(0,1), \\ f(\omega, \mu) &= \omega, \text{ pour } \mathcal{E}_3. \end{aligned} \quad (3-3-2)$$

Ce résultat permet de montrer que tous les vecteurs qui sont obtenus à partir de u de façon que $n_+ - n_-$ ait une valeur donnée sont proportionnels à $[(J_+)^{n_+ - n_-} u]$ si $n_+ - n_-$ est positif ou proportionnels à $[(J_-)^{n_- - n_+} u]$ si $n_+ - n_-$ est négatif.

Par conséquent, toutes les valeurs propres de J_3 sont simples si une l'est. De plus, le plus petit sous-espace invariant contenant u est engendré par u et l'ensemble de tous les vecteurs non nuls qui sont de la forme $[(J_+)^k u]$ et $[(J_-)^k u]$ (k entier positif).

Les valeurs de k qui caractérisent l'espace de représentation, ainsi que les conditions d'irréductibilité sont liées aux propriétés d'annulation de la fonction $f(\omega, \mu)$. En effet, on peut écrire :

$$\begin{aligned} J_- J_+ (J_+)^k u &= f(\omega, \mu_1 + k + 1) (J_+)^k u, \\ J_+ J_- (J_-)^k u &= f(\omega, \mu_1 - k) (J_-)^k u. \end{aligned}$$

Par conséquent, les vecteurs $[(J_+)^k u]$ (respectivement $[(J_-)^k u]$) correspondant aux valeurs successives croissantes de k sont différents de zéro tant que $f(\omega, \mu_1 + k)$ (respectivement $f(\omega, \mu_1 - k + 1)$) est différent de zéro. Par contre si, pour une valeur donnée de k , $f(\omega, \mu_1 + k + 1)$ (respectivement $f(\omega, \mu_1 - k)$) est nul, cela signifie :

a) soit que $[(J_+)^{k+1} u] = 0$ (respectivement $[(J_-)^{k+1} u] = 0$) : le spectre de J_3 est alors borné supérieurement (resp. inférieurement) par $\mu_0 = \mu_1 + k$ (resp. $\mu_0 = \mu_1 - k$) .

b) soit que $[(J_+)^{k+1} u]$ (respectivement $[(J_-)^{k+1} u]$) est un vecteur non nul tel que :

$$J_-[(J_+)^{k+1} u] = 0 \quad (\text{resp. } J_+[(J_-)^{k+1} u] = 0) ;$$

le plus petit sous espace invariant auquel appartient $[(J_+)^{k+1} u]$ (resp. $[(J_-)^{k+1} u]$) ne contient pas u , et u appartient donc à une représentation qui n'est pas complètement réductible.

En conclusion, la représentation à laquelle appartient u est irréductible si et seulement si :

1) pour la plus petite valeur de μ ($\mu \geq \mu_1$) telle que $f(\omega, \mu+1) = 0$, on a :

$$(J_+)^{\mu - \mu_1} u = 0 \quad ; \quad (3-3-3)$$

2) pour la plus grande valeur de μ ($\mu \leq \mu_1$) telle que $f(\omega, \mu) = 0$, on a :

$$(J_-)^{\mu_1 - \mu} u = 0 \quad . \quad (3-3-4)$$

Afin de préciser les notations, nous choisissons une base de la représentation, formée de vecteurs proportionnels à $[(J_+)^k u]$ et $[(J_-)^k u]$; soit $|\omega, \mu\rangle$ un vecteur de la base (pour l'algèbre $G(0,1)$ la valeur propre e est sous entendue). Les opérateurs de la représentation sont définis sur cette base par :

$$\begin{aligned}
J_3 |w, \mu\rangle &= \mu |w, \mu\rangle, \\
J_+ |w, \mu\rangle &= \alpha_+^{\mu+1} |w, \mu+1\rangle, \\
J_- |w, \mu\rangle &= \alpha_-^\mu |w, \mu-1\rangle, \\
E |w, \mu\rangle &= e |w, \mu\rangle, \quad \text{pour } G(0,1), \\
\Omega |w, \mu\rangle &= \omega |w, \mu\rangle.
\end{aligned}
\tag{3-3-5}$$

Les coefficients α_+^μ et α_-^μ ainsi définis sont évidemment tels que :

$$\alpha_+^\mu \alpha_-^\mu = f(\omega, \mu) \tag{3-3-6}$$

Il est facile de montrer que deux représentations irréductibles qui ne diffèrent que par les coefficients α_+^μ et α_-^μ (vérifiant l'équation (3-3-6)) sont équivalentes : les représentations irréductibles de B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 sont donc caractérisées à une équivalence près par le spectre de J_3 , la valeur de ω , et celle de e pour $G(0,1)$. Les conditions d'irréductibilité peuvent être écrites en remplaçant les équations (3-3-3) et (3-3-4) par $\alpha_+^{\mu+1} = 0$ et $\alpha_-^\mu = 0$.

On trouve finalement qu'il existe, suivant la façon dont $f(\omega, \mu)$ s'annule, quatre types de représentations irréductibles de B_1 , $G(0,1)$ ou \mathcal{E}_3 pour lesquelles les valeurs propres de J_3 sont simples :

1) Si : $f(\omega, \mu) \neq 0$ pour $\mu = E_0 + p$, p entier, on a une représentation irréductible dont le spectre de J_3 n'est pas borné.

2) Si : $f(\omega, \mu_0 + 1) = \alpha_-^{\mu_0 + 1} = 0$

$$f(\omega, \mu) \neq 0 \quad \text{pour } \mu = \mu_0 - p, \quad p \text{ entier } > 0,$$

on a une représentation irréductible de dimension infinie dont le

spectre de J_3 est borné supérieurement par μ_0 .

$$3) \text{ Si : } f(\omega, \mu_0) = \alpha_-^{\mu_0} = 0$$

$$f(\omega, \mu) \neq 0 \text{ pour } \mu = \mu_0 + p, \quad p \text{ entier } > 0,$$

on a une représentation irréductible de dimension infinie dont le spectre de J_3 est borné inférieurement par μ_0 .

$$4) \text{ Si : } f(\omega, \mu_0 + 1) = \alpha_+^{\mu_0 + 1} = 0$$

$$f(\omega, \mu'_0) = \alpha_-^{\mu'_0} = 0 \text{ pour } \mu'_0 = \mu_0 - N, \quad N \text{ entier } \geq 0$$

$$f(\omega, \mu) \neq 0 \text{ pour } \mu = \mu_0 - p, \quad 0 \leq p < N,$$

on a une représentation irréductible de dimension finie $N+1$.

A partir de ces quatre ensembles de conditions et de la forme de la fonction $f(\omega, \mu)$ (équations (3-3-2)) pour chacune des trois algèbres, on trouve les caractéristiques de toutes ces représentations irréductibles. Celles-ci sont résumées dans le tableau (3), et nous n'exposons pas en détail les raisonnements qui permettent de les obtenir. Remarquons simplement que l'algèbre B_1 , pour laquelle $f(\omega, \mu)$ peut s'annuler pour deux valeurs de μ différentes, possède les quatre types de représentations irréductibles ; pour $G(0,1)$, $f(\omega, \mu)$ peut s'annuler pour une valeur de μ au plus : il n'y a pas de représentation irréductible de dimension finie ; enfin, pour \mathcal{C}_3 , $f(\omega, \mu)$ est une constante : hormis la représentation triviale à une dimension (qui correspond au cas où $\omega=0$), toutes les représentations irréductibles ont un spectre de J_3 non borné.

3.3.2 Condition d'unitarité - Algèbres réelles.

Une représentation d'une algèbre de Lie \mathfrak{g} est unitaire si les opérateurs X de la représentation sont tels que :

$$X^+ = -X \quad . \quad (3-3-7)$$

Tout élément de l'algèbre peut être développé sur une base de celle-ci. Soient X_i les opérateurs de base de l'algèbre dans une représentation donnée ; on peut écrire :

$$X = \sum_i a^i X_i$$

où les composantes a^i sont des nombres complexes.

La condition (3-3-7) s'écrit alors :

$$\sum_i a^{i*} X_i^+ = - \sum_i a^i X_i \quad . \quad (3-3-8)$$

Cette équation implique que les adjoints des opérateurs de base s'expriment comme des combinaisons linéaires de ceux-ci ; la condition (3-3-8) peut donc être remplacée par les conditions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} X_i^+ = \sum_j \alpha_i^j X_j \end{array} \right. \quad (3-3-9)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i a^{i*} \alpha_i^j = -a^j \end{array} \right. \quad (3-3-10)$$

On voit sous cette forme que la condition (3-3-7) n'est pas vérifiée pour tous les éléments de l'algèbre, mais seulement pour ceux qui, une fois choisies les relations (3-3-9), vérifient les conditions (3-3-10). La condition (3-3-7) ne définit donc pas une représentation unitaire de l'algèbre \mathfrak{g} dans son ensemble ; cependant, si certaines conditions du type (3-3-10) définissent une sous-algèbre de \mathfrak{g} , c'est-à-

dire si l'ensemble \mathcal{A}' des opérateurs X dont les composantes vérifient les équations (3-3-10) est tel que :

$$\left. \begin{array}{l} X \in \mathcal{A}' \\ X' \in \mathcal{A}' \end{array} \right\} \implies [X, X'] \in \mathcal{A}' ,$$

alors les équations (3-3-9) définissent une représentation unitaire de \mathcal{A}' .

De façon générale, la recherche de telles sous-algèbres se ramène à celle des sous-algèbres réelles de \mathcal{A} . Finalement l'étude de l'unitarité des représentations de \mathcal{A} comporte deux parties : la recherche des algèbres réelles dont \mathcal{A} est la complexification, puis l'étude des conditions d'unitarité pour chaque algèbre réelle. On rencontre d'ailleurs une situation tout à fait identique pour les groupes de Lie. Pour tous les groupes associés aux algèbres de Lie complexes simples, les groupes et les algèbres réels correspondants sont connus (Barut et Rączka 1965). Toutefois, deux des algèbres étudiées ici ne sont pas semi-simples. Nous montrons ici qu'il est possible, pour ces deux algèbres (et par la même occasion pour B_1), d'obtenir les sous-algèbres \mathcal{A}' et les conditions d'unitarité à partir des équations (3-3-9) et (3-3-10).

Supposons qu'il existe une base orthonormée sur laquelle J_3 est diagonal : en effet ceci est toujours le cas (équations (3-2-6) et (3-2-7)) pour les représentations unitaires des réalisations des trois algèbres étudiées dont les fonctions de base sont de la forme (3-1-3). Dans ce cas les adjoints des opérateurs de base J_3 , J_+ et J_- (et E pour $G(0,1)$) sont définis sur la base $|\omega \mu \rangle$ par :

$$\begin{cases} J_3^+ |\omega \mu\rangle = \mu^* |\omega \mu\rangle \\ J_+^+ |\omega \mu\rangle = \alpha_+^{\mu^*} |\omega \mu-1\rangle \\ J_-^+ |\omega \mu\rangle = \alpha_-^{\mu+1^*} |\omega \mu+1\rangle \\ E^+ |\omega \mu\rangle = e^* |\omega \mu\rangle, \text{ pour } G(0,1) \end{cases} \quad (3-3-11)$$

En comparant ces équations (3-3-11) avec les équations (3-3-5), on trouve que les équations du type (3-3-9) les plus générales qu'on puisse écrire sont :

$$\begin{cases} J_3^+ = J_3 \\ J_{\pm}^+ = e^{i\theta} J_{\pm} \\ E^+ = e^{i\varphi} E, \text{ pour } G(0,1) \end{cases} \quad (3-3-12)$$

où θ et φ sont des nombres réels. Pour obtenir ce résultat, on doit tenir compte du fait que dans une représentation non réductible μ est nécessairement de la forme E_0+p (p entier), et faire éventuellement un changement de base qui ne change pas la structure de l'algèbre.

Si on appelle respectivement a^1 , a^2 , a^3 et a^4 les composantes d'un opérateur de l'algèbre sur les opérateurs de base J_3 , J_+ , J_- et E (a^4 est évidemment toujours nul sauf pour $G(0,1)$), les conditions analogues à (3-3-10) sont :

$$\begin{cases} a^{1^*} = -a^1 \\ a^{2^*} e^{i\theta} = -a^3 \\ a^{4^*} e^{i\varphi} = -a^4 \end{cases} \quad (3-3-13)$$

Il est facile de trouver, pour chaque algèbre, à quelles conditions

(sur les valeurs de θ et de φ) les équations (3-3-13) définissent une sous-algèbre ; une base de la forme réelle de cette sous-algèbre est obtenue dans tous les cas par le changement suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{J}_1 = (J_+ - e^{i\theta} J_-) / 2 \\ \mathcal{J}_2 = i(J_+ + e^{i\theta} J_-) / 2 \\ \mathcal{J}_3 = i J_3 \\ \mathcal{E} = i e^{i\varphi/2} E \end{array} \right. \quad (3-3-14)$$

Pour l'algèbre B_1 , les deux premières équations (3-3-13) définissent une sous-algèbre si $e^{2i\theta} = 1$, c'est-à-dire si $e^{i\theta} = \epsilon$ ($\epsilon = \pm 1$). On retrouve ainsi les résultats connus : les relations de commutation des opérateurs $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2$ et \mathcal{J}_3 définis par (3-3-14) sont identiques à celles de l'algèbre réelle $\mathfrak{so}(3)$ du groupe des rotations à trois dimensions si $\epsilon = +1$, et à celles de l'algèbre réelle $\mathfrak{so}(2,1)$ du groupe non compact $SO(2,1)$ si $\epsilon = -1$.

Pour l'algèbre $G(0,1)$, les équations (3-3-13) définissent une sous-algèbre si $e^{2i\theta} = 1$ ($e^{i\theta} = \epsilon$) et $e^{i\varphi} = 1$. Les relations de commutation de l'algèbre réelle sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] = -\frac{\epsilon}{2} \\ [\mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3] = \mathcal{J}_1 \\ [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_1] = \mathcal{J}_2 \\ [\mathcal{J}_i, \mathcal{E}] = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \end{array} \right. .$$

On peut passer d'une valeur de ϵ à l'autre par un changement de base réel de l'algèbre ; ainsi, aux deux valeurs de ϵ correspond une

seule algèbre réelle, qui est appelée \mathcal{A}_4 par Miller (1968).

Enfin, pour l'algèbre \mathcal{A}_3 , les deux premières équations (3-3-13) définissent une sous-algèbre quel que soit θ . Les relations de commutation des opérateurs \mathcal{J}_1 , \mathcal{J}_2 et \mathcal{J}_3 définis par (3-3-14) sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] = 0 \\ [\mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3] = \mathcal{J}_1 \\ [\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_1] = \mathcal{J}_2 \end{array} \right. .$$

Cette algèbre réelle est donc, quel que soit θ , isomorphe à l'algèbre réelle \mathcal{E}_3 du groupe euclidien dans le plan, E_3 (suivant les notations de Miller (1968)).

Pour chacune de ces algèbres réelles, les conditions d'unitarité des représentations sont alors données par les équations (3-3-12), avec les valeurs particulières de θ et de φ correspondantes. Pour les éléments de matrice des opérateurs, qui sont définis par les équations (3-3-5), ces conditions s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu^* = \mu \quad , \\ \alpha_{\pm}^{\mu*} = e^{i\theta} \alpha_{\mp}^{\mu} \\ e^* = e \quad , \quad \text{pour } G(0,1) \quad , \end{array} \right. \quad (3-3-15)$$

ou encore, puisque α_{+}^{μ} et α_{-}^{μ} sont liés par l'équation (3-3-6) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \quad \text{réel} \quad , \\ |\alpha_{+}^{\mu}|^2 = |\alpha_{-}^{\mu}|^2 = e^{i\theta} f(\omega, \mu) \quad , \\ e \quad \text{réel} \quad , \quad \text{pour } G(0,1) \quad . \end{array} \right. \quad (3-3-16)$$

Ces conditions permettent de trouver les caractéristiques des représentations irréductibles unitaires de toutes les algèbres réelles considérées ; les résultats sont rassemblés dans le tableau (3).

Pour les deux algèbres réelles associées à B_1 , nous retrouvons ainsi les résultats de Barut et Fronsdal (1965) ; nous ne donnons pas ici le détail des raisonnements.

Pour l'algèbre réelle \mathcal{A}_4 associée à $G(0,1)$, les conditions (3-3-16) s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \text{ et } e \text{ réels ,} \\ |\alpha_+^\mu|^2 = |\alpha_-^\mu|^2 = \varepsilon(\omega + \mu e) \ ; \end{array} \right.$$

ε est ici égal à $+1$ ou -1 , mais il a évidemment une valeur déterminée pour une représentation donnée. Par conséquent, $\omega + \mu e$ doit avoir un signe déterminé pour toutes les valeurs de μ d'une même représentation irréductible ; si e n'est pas nul, ceci n'est possible que pour les représentations bornées supérieurement ou inférieurement, $\uparrow_{\mu_0}^e$ ou $\downarrow_{\mu_0}^e$; pour les représentations non bornées, $R(E_0, \omega, e)$, il est par contre nécessaire que e soit nul. Signalons que les deux valeurs de ε permettent, pour chaque type de représentation, d'exprimer de deux manières différentes les conditions d'unitarité (cf. tableau (3)).

Enfin, les conditions d'unitarité des représentations de l'algèbre réelle \mathcal{A}_3 associée à \mathcal{V}_3 sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \text{ réel} \\ |\alpha_+^\mu|^2 = |\alpha_-^\mu|^2 = e^{i\theta} \omega \ ; \end{array} \right.$$

θ est ici quelconque : un changement de la valeur de θ correspond simplement à un changement de base de l'algèbre réelle. On peut le choisir tel que, quel que soit ω différent de zéro :

$$\omega = \rho^2 e^{-i\theta} \quad (\rho^2 > 0) ;$$

les conditions d'unitarité pour une représentation $Q(E_0, \omega)$ sont alors :

$$\begin{cases} E_0 \text{ réel} \\ \alpha_{\pm}^{\mu} = \rho e^{-i\theta/2} \end{cases} .$$

3.4 Représentations des réalisations des algèbres de Lie B_1 ,

$G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 .

Dans ce paragraphe nous cherchons, pour chacune des réalisations de B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{E}_3 qui se trouvent dans le tableau (2), quelles représentations possèdent des fonctions de base de la forme

$$\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) \quad , \quad (3-4-1)$$

où $\varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ est une solution de l'équation factorisable associée à la réalisation, toutes ces fonctions ou au moins certaines d'entre elles étant normées suivant la condition (3-2-4) ou (3-2-5). Parmi ces représentations se trouvent des représentations irréductibles unitaires : nous commençons par chercher les fonctions de la forme (3-4-1) qui sont fonctions de base de ces représentations. Nous indiquons, en utilisant les résultats du paragraphe 3.3.1, comment sont construits, avec de telles fonctions, des espaces de représentations irréductibles.

Puis nous montrons que, pour que les représentations ainsi construites soient unitaires, on doit ajouter aux conditions d'unitarité des représentations de l'algèbre abstraite des conditions sur le comportement des fonctions de base aux limites du domaine de la variable x ; ces dernières conduisent dans certains cas à des conditions faisant intervenir les paramètres qui entrent dans la définition des réalisations. Enfin, comme nous l'avons montré dans le paragraphe 3.2, il peut aussi exister des représentations non unitaires qui contiennent des vecteurs de base normés. La recherche de telles représentations, "partiellement" unitaires, constitue la dernière partie du paragraphe.

3.4.1 Construction des espaces de représentations irréductibles unitaires des réalisations.

Nous avons montré dans le paragraphe 3.3.1 qu'on peut construire les espaces des représentations des algèbres de Lie B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{B}_3 dont les valeurs propres de J_3 sont simples à partir d'un vecteur propre de J_3 de valeur propre simple, c'est-à-dire à partir d'un vecteur propre commun à J_3 et à Ω (et à E dans le cas de l'algèbre $G(0,1)$). Pour chacune des réalisations d'algèbres de Lie du tableau (2) nous pouvons donc utiliser comme vecteur de départ toute fonction de la forme (3-4-1) :

$$\Phi_{\omega}^{\mu_1}(x, \tau) = e^{i\mu_1 \tau} \varphi_{\omega}^{\mu_1}(x) \quad ,$$

où $\varphi_{\omega}^{\mu_1}(x)$ est une solution de l'équation factorisable correspondante. L'espace de la représentation est alors engendré par des fonctions qui sont toutes de la forme (3-4-1). En effet, d'après les résultats du

paragraphe 2.4, on peut écrire :

$$\begin{aligned} (J_+)^k \Phi_\omega^{\mu_1}(x, \tau) &\propto e^{i(\mu_1+k)\tau} \varphi_\omega^{\mu_1+k}(x) \\ (J_-)^k \Phi_\omega^{\mu_1}(x, \tau) &\propto e^{i(\mu_1-k)\tau} \varphi_\omega^{\mu_1-k}(x) \end{aligned} \quad (3-4-2)$$

Nous avons montré que les conditions d'irréductibilité sont alors exprimées par les relations (3-3-3) et (3-3-4). Pour les représentations des algèbres abstraites B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{C}_3 ces conditions nous ont permis de trouver les caractéristiques des représentations irréductibles, c'est-à-dire le spectre de J_3 , la valeur propre de l'invariant Ω , les éléments de matrice α_+^μ et α_-^μ des opérateurs J_+ et J_- , et, pour l'algèbre $G(0,1)$, la valeur propre de E .

A l'aide de ces résultats, on peut choisir la fonction de départ $\Phi_\omega^{\mu_1}(x, \tau)$ de telle sorte que ω et μ_1 soient des valeurs compatibles pour une représentation irréductible ; on peut de plus définir les autres fonctions de base par les relations de récurrence suivantes :

$$\begin{cases} \Phi_\omega^{\mu+1}(x, \tau) = \frac{1}{\alpha_+^{\mu+1}} J_+ \Phi_\omega^\mu(x, \tau) \\ \Phi_\omega^{\mu-1}(x, \tau) = \frac{1}{\alpha_-^\mu} J_- \Phi_\omega^\mu(x, \tau) \end{cases} \quad (3-4-3)$$

où α_+^μ et α_-^μ caractérisent la représentation irréductible considérée. Si tous ces coefficients sont différents de zéro (c'est-à-dire si le spectre de J_3 de la représentation considérée est non borné), la base construite est bien celle d'une représentation irréductible. Par contre, si le spectre de J_3 dans cette représentation est borné supérieurement (resp. inférieurement) par μ_0 , la condition obtenue

obtenue pour l'algèbre abstraite, $\alpha_+^{\mu_0+1} = 0$ (resp. $\alpha_-^{\mu_0} = 0$), doit être accompagnée de la condition suivante :

$$J_+ \Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau) = 0 \quad (\text{resp. } J_- \Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau) = 0). \quad (3-4-4)$$

Cette condition est automatiquement réalisée si on utilise la fonction $\Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau)$ comme fonction de départ pour la construction de la base.

En effet une fonction définie par :

$$\begin{cases} \Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau) = e^{i\mu_0\tau} \varphi^{\mu_0}(x) \\ J_+ \Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau) = 0 \quad (\text{resp. } J_- \Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau) = 0) \end{cases} \quad (3-4-5)$$

est, pour chaque réalisation, fonction propre de J_3 avec la valeur propre μ_0 et de Ω avec une valeur propre ω qui est donnée par :

$$f(\omega, \mu_0+1) = 0 \quad (\text{resp. } f(\omega, \mu_0) = 0) \quad . \quad (3-4-6)$$

D'autre part les équations (3-4-5) sont équivalentes à une équation différentielle du premier ordre en x dont $\varphi^{\mu_0}(x)$ est solution.

La résolution d'une telle équation se réduit à une quadrature et on peut ensuite obtenir une expression explicite de toutes les fonctions de base en utilisant les relations de récurrence (3-4-3). Si la représentation irréductible de l'algèbre abstraite dont on cherche à construire une base est de dimension infinie, cette méthode de construction assure l'irréductibilité. Si par contre elle est de dimension finie, il existe une condition supplémentaire qu'on peut écrire, si la base est construite à partir de la fonction dont la valeur de μ est maximale et si on appelle μ_0 et μ'_0 les valeurs extrêmes de μ :

$$(J_-)^{\mu_0 - \mu'_0 + 1} \Phi_{\omega}^{\mu_0}(x, \tau) = 0 \quad . \quad (3-4-7)$$

La même méthode peut être utilisée pour la construction des espaces de représentations irréductibles unitaires. Nous avons montré que les conditions d'unitarité des représentations des algèbres réelles associées aux trois algèbres de Lie étudiées peuvent être écrites de façon générale sous la forme (3-3-12). Pour les algèbres abstraites, nous avons obtenu à partir de ces conditions les caractéristiques des représentations irréductibles unitaires. Cependant, si l'on cherche à construire des bases de ces représentations en suivant une méthode analogue à celle qui vient d'être décrite, il est nécessaire, même si les éléments caractéristiques de la représentation (spectre de J_3 , coefficients α_+^μ et α_-^μ , valeurs propres ω et ϵ) sont ceux d'une représentation irréductible unitaire de l'algèbre abstraite, de vérifier que les fonctions de base construites satisfont aux conditions (3-3-12). Nous avons, par l'équation (3-2-3), défini dans l'espace des fonctions de x et de τ un produit scalaire qui est lié à la condition de normalisation physique des fonctions d'onde : il y apparaît une fonction $f(x)$ qui est déterminée par la condition de normalisation (3-2-1) ou (3-2-2). Si l'on utilise cette définition du produit scalaire sans préciser la fonction $f(x)$, il est impossible de trouver de façon générale quelles sont les fonctions de la forme $e^{i\mu\tau} \varphi(x)$ pour lesquelles les conditions (3-3-12) sont vérifiées. En étudiant ce problème, on trouve que le produit scalaire défini par l'équation (3-2-3) avec $f(x)=1$ apparaît comme privilégié pour toutes les réalisations étudiées : en effet les conditions (3-2-12) obtenues avec cette définition peuvent être remplacées pour chaque réalisation par des conditions simples sur les fonctions $\varphi(x)$. Plus précisément, soit un ensemble de fonctions

$e^{i\mu\tau} \varphi(x)$ telles que $\mu = E_0 + p$, E_0 fixé et p entier (les bases des représentations irréductibles que nous étudions sont toujours de ce type), on montre que pour chaque réalisation des conditions qu'on peut écrire de façon générale :

$$\left\{ \begin{array}{l} J_3^+ = J_3 \\ E^+ = E \\ (J_{\pm})^+ = \varepsilon J_{\mp} \end{array} \right. \quad (\text{pour les réalisations de } G(0,1)) \quad (3-4-10)$$

sont satisfaites à condition que les fonctions $\varphi(x)$ vérifient certaines conditions aux bornes du domaine de la variable x .

Nous avons par ailleurs montré que le produit scalaire défini par l'équation (3-2-3) avec $f(x)=1$ est celui qui est associé à la condition de normalisation qu'on obtient lorsque l'équation factorisable provient directement d'une équation de Schrödinger à trois dimensions, et nous nous limitons dans toute la suite du chapitre à cette définition du produit scalaire. Nous n'étudions le problème posé par l'éventuelle présence d'un facteur $f(x)$ non constant dans la condition de normalisation que pour des cas particuliers : un exemple est celui de l'équation radiale relativiste de l'atome d'hydrogène, qui est traité dans un des articles présentés en annexe (V).

Les deux premières équations (3-4-10) sont satisfaites pour toutes les fonctions $\varphi(x)$ normalisables ; les deux dernières équations se démontrent en faisant, dans le produit scalaire $(\Phi | J_{\pm} \Phi')$, une intégration par parties sur la variable x . On trouve ainsi que ε est égal à $+1$ pour les réalisations A_1 , C' , C'' , D' et D'' et à -1 pour les réalisations A_2 , A_3 et B ; d'autre part, si l'on

se limite à la définition non généralisée de l'unitarité, l'égalité est vérifiée pour l'ensemble des fonctions $e^{i\mu\tau} \varphi(x)$ à condition que les fonctions $\varphi(x)$ s'annulent aux bornes du domaine de x . Dans le cas où le produit scalaire est défini comme une distribution, la condition analogue est plus compliquée ; nous n'étudions ce point que pour des réalisations particulières.

Finalement, chacune des réalisations du tableau (2) est associée à une algèbre réelle ; la correspondance est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 \rightarrow \mathcal{SO}(3) \\ A_2, A_3, B \rightarrow \mathcal{SO}(2,1) \\ C', D' \rightarrow \mathcal{S}_4 \\ C'', D'' \rightarrow \mathcal{E}_3 \end{array} \right. \quad (3-4-11)$$

Cette correspondance signifie que, pour chaque réalisation, on peut construire des bases de représentations unitaires de l'algèbre correspondante en utilisant des fonctions de la forme (3-4-1), à condition toutefois que les fonctions $\varphi_\omega^\mu(x)$ vérifient certaines conditions aux bornes du domaine de x . Ces conditions ne sont pas nécessairement vérifiées pour les fonctions de base construites suivant la méthode décrite précédemment ; cette question doit être étudiée en détail pour chaque réalisation et nous verrons qu'on obtient finalement, pour chaque réalisation, des conditions d'unitarité qui s'ajoutent à celles des algèbres abstraites.

3.4.2 Fonctions de base des représentations irréductibles unitaires des différentes réalisations.

En utilisant les résultats précédents, il est possible de construire explicitement, pour chaque réalisation du tableau (2), toutes les bases de représentations irréductibles unitaires dont les fonctions sont de la forme $e^{i\mu\tau} \varphi_{\omega}^{\mu}(x)$, où $\varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ est solution de l'équation factorisable associée à la réalisation ; on trouve donc ainsi à quelles conditions une représentation irréductible unitaire de l'algèbre abstraite possède effectivement une telle base.

Nous décrivons ici de façon détaillée la méthode générale (les différentes réalisations sont étudiées individuellement dans l'appendice 1). On considère toutes les représentations irréductibles unitaires de l'algèbre réelle abstraite associée à la réalisation considérée dans la correspondance (3-4-11). Pour chacune de ces représentations (dont les caractéristiques sont sur le tableau (2)), on choisit une fonction particulière $e^{i\mu\tau} \varphi_{\omega}^{\mu_1}(x)$ telle que ω et μ_1 soient des valeurs propres de Ω et de J_3 dans cette représentation, $\varphi_{\omega}^{\mu_1}(x)$ étant une solution de l'équation associée à la réalisation. On construit alors à partir de cette fonction toutes celles qui en sont déduites par les relations de récurrence (3-4-3) dans lesquelles les coefficients α_+^{μ} et α_-^{μ} sont les éléments de matrice de J_+ et J_- sur une base orthonormée de la représentation considérée. Il faut cependant, comme nous l'avons vu, vérifier alors que les fonctions obtenues forment effectivement une base de la représentation irréductible unitaire. En ce qui concerne l'irréductibilité, la situation est

différente pour les quatre types de représentations irréductibles .

Pour les représentations dont le spectre de J_3 est borné supérieurement ou inférieurement par μ_0 , nous avons vu que les équations (3-4-5) permettent de trouver l'expression explicite de la fonction de base associée à μ_0 et que l'ensemble des fonctions déduites de celle-ci forme une base de représentation irréductible. Pour les représentations de dimension finie, on peut obtenir aussi l'expression explicite d'une fonction de base de valeur de μ extrême, maximale par exemple, mais il faut de plus que la condition (3-4-7) soit vérifiée pour que les fonctions construites à partir de celle-ci forment une base de représentation irréductible. Pour les représentations dont le spectre de J_3 n'est pas borné, on ne peut pas éviter de résoudre l'équation factorisable pour une valeur particulière de μ ; les fonctions construites à partir de la fonction de base associée à cette solution forment toujours une base de représentation irréductible. Enfin nous avons montré que la représentation irréductible dont on a ainsi construit une base est unitaire si toutes les fonctions de base vérifient certaines conditions aux bornes du domaine D de la variable x : pour étudier ces conditions on utilise le fait que le comportement aux bornes de D des fonctions construites en utilisant les relations de récurrence (3-4-3) peut être étudié de proche en proche, en utilisant l'expression des opérateurs J_+ et J_- de la réalisation. Signalons enfin que si ces conditions sont vérifiées, la base construite est orthonormée si la fonction de départ est normée.

Cette méthode est, dans l'appendice 1, appliquée successivement à toutes les réalisations du tableau (2).

Les résultats essentiels de cet appendice sont résumés dans le tableau (4) : on y trouve en effet, pour les différentes réalisations étudiées (sauf A_3 et D'' , l'une parce qu'elle est trop complexe et ne mène à aucune application, l'autre parce qu'elle est trop simple), toutes les représentations irréductibles unitaires pour lesquelles nous avons construit des bases à partir des solutions des équations factorisables. Si on compare ce tableau avec le tableau (3) qui donne les caractéristiques des représentations irréductibles unitaires des algèbres réelles abstraites liées aux algèbres B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{C}_3 , on constate que non seulement chaque réalisation est liée à une algèbre réelle particulière, mais que de plus on ne peut construire des bases de représentations irréductibles unitaires de l'algèbre abstraite que si certaines conditions supplémentaires sont vérifiées. Ainsi par exemple, les représentations irréductibles unitaires de l'algèbre abstraite $\mathcal{SO}(2,1)$ sont les représentations $\uparrow \mu_0^*$ avec μ_0 réel positif ; pour la réalisation B les conditions supplémentaires sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} > 0 \\ \mu_0 > \frac{1}{2} \end{array} \right. ,$$

et pour la réalisation A_2 , elles sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} < -\frac{1}{2} \\ \mu_0 = -\frac{d}{a} - p \quad , \quad 0 \leq p < -\frac{d}{a} - \frac{1}{2} \end{array} \right. .$$

Ces conditions font donc intervenir les paramètres (ici d et a) qui interviennent dans la définition de la réalisation. Dans le cas de la réalisation A_1 , il apparaît même une condition de quantification

sur le paramètre $\frac{d}{a}$: nous verrons, dans le dernier chapitre, quelles sont les conséquences d'une telle condition pour un exemple physique.

Signalons enfin que nous donnons, dans l'appendice 1, l'expression générale des fonctions de base obtenues ; celles-ci, conformément aux résultats de Miller (1968), font intervenir les fonctions spéciales (fonctions hypergéométriques pour A_1 et A_2 , hypergéométriques confluentes pour B , C' et D' , fonctions de Bessel pour C'').

3.4.3 Représentations "partiellement" unitaires des différentes réalisations.

Comme nous avons vu (paragraphe 3.2), les fonctions de base normées qui sont associées à des fonctions d'onde peuvent appartenir à des bases de représentations qui contiennent aussi des fonctions non normalisables et qui ne sont donc pas des bases de représentations unitaires. Dans ce paragraphe, nous cherchons à quelles représentations appartiennent toutes les fonctions de base $e^{i\mu\tau} \varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ normées (vis à vis du produit scalaire particulier utilisé précédemment) qui ne forment pas des espaces de représentations irréductibles unitaires. Les caractéristiques de ces représentations en tant que représentations de l'algèbre abstraite (c'est-à-dire le spectre de J_3 , les valeurs propres de Ω (et E) et les éléments de matrice de J_+ et J_-) peuvent être aussi bien celles de représentations irréductibles unitaires que de représentations non unitaires ou même non complètement réductibles. En effet, lorsque nous avons cherché à construire pour les différentes réalisations des bases de représentations irréductibles unitaires des algèbres abstraites (appendice 1), nous avons trouvé que dans certains

cas une partie seulement des fonctions construites vérifient les conditions d'unitarité et sont donc normées. Nous avons ainsi déjà obtenu une partie des résultats recherchés. Toutefois, pour obtenir l'ensemble de ces résultats, la méthode la plus simple consiste à trouver la forme générale des solutions des équations factorisables et à examiner à quelles conditions elles sont normalisables puis à quelles représentations elles appartiennent. C'est ce qui est fait, pour chaque réalisation étudiée, dans l'appendice 2. Nous y montrons que dans certains cas, grâce au fait que les équations factorisables sont invariantes dans certains échanges formels impliquant les paramètres et les valeurs propres, une partie des fonctions de base normées peut être très simplement déduite d'autres fonctions de base normées (nous avons déjà signalé ce point dans l'appendice 1) ; parfois aussi, les solutions $\varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ elles-mêmes sont invariantes vis à vis de certains de ces échanges : on peut alors leur associer deux fonctions de base dans lesquelles le facteur $e^{i\mu\tau}$ est différent et qui appartiennent à des représentations différentes.

Le tableau (5) contient les résultats à partir desquels on peut, grâce aux échanges qui sont également rappelés dans ce tableau, obtenir toutes les représentations "partiellement" unitaires, c'est-à-dire possédant des fonctions de base normées. De telles représentations existent dans tous les cas sauf ceux des réalisations B et D' . Nous aurons à en tenir compte pour certaines applications : d'où quelques complications, en particulier en ce qui concerne l'emploi du théorème de Wigner-Eckart.

3.5 Couplage de deux algèbres de Lie $so(2,1)$.

Soit un système physique constitué de deux particules dont l'état en l'absence d'interaction est déterminé par des équations d'onde conduisant à des équations séparées factorisables. L'état de l'ensemble des deux particules, considérées comme indépendantes, peut être caractérisé par une fonction de base de représentation de chacune des deux réalisations d'algèbres de Lie associées aux équations factorisables. Il peut être aussi relié à une fonction de base de représentation d'une réalisation d'algèbre de Lie qui résulte d'un couplage de ces deux réalisations, et qui fait donc intervenir les deux variables physiques ; l'intérêt d'un tel couplage provient du fait que les opérateurs d'interaction peuvent être des opérateurs tensoriels de cette réalisation sans l'être vis à vis des réalisations associées aux deux particules.

Nous utilisons ici la notion de couplage par analogie avec le cas des moments angulaires ; il est bien connu que les représentations du produit direct de deux groupes $SO(3)$ (correspondant à deux moments angulaires $\vec{J}^{(1)}$ et $\vec{J}^{(2)}$) sont des produits de représentations des deux groupes. Ce sont aussi des représentations du groupe $SO(3)$ qui correspond au moment angulaire couplé $\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$; on trouve quelles sont ces représentations en réduisant le produit de représentations en représentations irréductibles (décomposition de Clebsch-Gordan) ; on obtient le développement des fonctions de base de ces représentations irréductibles sur les fonctions de base de la représentation produit grâce aux coefficients de Clebsch-Gordan. Toutes

les notions précédentes interviennent également dans le calcul des éléments de matrice d'opérateurs tensoriels par utilisation du théorème de Wigner-Eckart : nous étudions ces points dans le chapitre suivant et nous nous limitons ici au problème des systèmes à deux particules.

Pour ce problème, on pourrait procéder comme dans le cas des moments angulaires, c'est-à-dire, pour chaque réalisation, former le produit direct de deux réalisations indépendantes (de variables x_1, τ_1 et x_2, τ_2) et étudier la réduction des produits de représentations vis à vis de la réalisation couplée (dont les opérateurs de base sont la somme des opérateurs de base analogues des deux réalisations initiales). Cependant, sauf si l'algèbre est celle d'un groupe d'invariance du système physique, la variable τ n'est pas liée à une variable physique et le fait d'introduire deux variables τ_1 et τ_2 différentes n'a pas de signification physique.

L'objet de ce paragraphe est de montrer pour un cas particulier, celui des réalisations B de l'algèbre de Lie $so(2,1)$, qu'il est possible de définir un couplage des deux réalisations en utilisant une seule variable τ . Il ne s'agit donc pas d'une réduction d'un produit direct de deux algèbres ; cependant nous montrons que les résultats sont à peu près identiques à ceux qu'on aurait dans ce dernier cas. L'intérêt de ce couplage particulier sera montré, dans le chapitre 4, pour un exemple physique de réalisation B , l'atome d'hydrogène ; nous verrons qu'il permet de calculer des intégrales à deux particules telles que les intégrales de Slater hydrogéoïdes.

Avant de définir le couplage de deux réalisations B de $so(2,1)$,

nous étudions rapidement le cas du produit direct de deux algèbres $\mathfrak{so}(2,1)$ (nous rappelons en particulier le principe du calcul des coefficients de Clebsch-Gordan), afin de pouvoir montrer ensuite que les mêmes résultats sont applicables au couplage que nous étudions.

3.5.1 Produit direct de deux algèbres de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$.

Soient deux algèbres de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$ notées $\mathfrak{g}^{(1)}$ et $\mathfrak{g}^{(2)}$, dont les opérateurs de bases sont respectivement $J_3^{(1)}$, $J_+^{(1)}$, $J_-^{(1)}$ et $J_3^{(2)}$, $J_+^{(2)}$, $J_-^{(2)}$ et les invariants $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$; les relations de commutation de chaque algèbre et l'expression de l'invariant sont celles de l'algèbre B_1 (tableau (1)).

On suppose que tous les opérateurs de $\mathfrak{g}^{(1)}$ commutent avec ceux de $\mathfrak{g}^{(2)}$ et on appelle $\mathfrak{g}^{(12)}$ le produit direct :

$$\mathfrak{g}^{(12)} = \mathfrak{g}^{(1)} \times \mathfrak{g}^{(2)} .$$

Les représentations de $\mathfrak{g}^{(12)}$ sont des produits de représentations de $\mathfrak{g}^{(1)}$ et de $\mathfrak{g}^{(2)}$. Si l'on utilise les notations du paragraphe 3.3, les vecteurs de base de représentations irréductibles D^1 et D^2 de $\mathfrak{g}^{(1)}$ et $\mathfrak{g}^{(2)}$ s'écrivent $|\omega_1 \mu_1\rangle$ et $|\omega_2 \mu_2\rangle$; il leur correspond un vecteur de base de la représentation $D^1 \otimes D^2$ de $\mathfrak{g}^{(12)}$

$$|\omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2\rangle = |\omega_1 \mu_1\rangle \otimes |\omega_2 \mu_2\rangle , \quad (3-5-1)$$

tout vecteur de base étant donc caractérisé par les valeurs propres de l'ensemble d'opérateurs commutant $\Omega^{(1)}$, $J_3^{(1)}$, $\Omega^{(2)}$ et $J_3^{(2)}$.

On introduit une autre algèbre $\mathfrak{so}(2,1)$, notée \mathfrak{g} ($\mathfrak{g} \subset \mathfrak{g}^{(12)}$), d'opérateurs de base J_3 , J_+ et J_- et d'invariant Ω , telle que :

$$J_{\alpha} = J_{\alpha}^{(1)} + J_{\alpha}^{(2)} \quad (\alpha=3, + \text{ ou } -). \quad (3-5-2)$$

Les vecteurs de base des représentations de $\mathcal{S}^{(12)}$ peuvent être aussi caractérisés par les valeurs propres d'un autre ensemble d'opérateurs commutant $\Omega^{(1)}$, $\Omega^{(2)}$, Ω et J_3 ; on les écrit alors

$$|\omega_1 \omega_2 \omega \mu\rangle. \quad (3-5-3)$$

Les changements de base entre les vecteurs (3-5-1) et (3-5-3) sont donnés par :

$$|\omega_1 \omega_2 \omega \mu\rangle = \sum_{\mu_1, \mu_2} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle |\omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2\rangle \quad (3-5-4)$$

$$\text{et } |\omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2\rangle = \sum_{\omega, \mu} \langle \omega \mu | \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 \rangle |\omega_1 \omega_2 \omega \mu\rangle, \quad (3-5-5)$$

où les coefficients $\langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle$ et $\langle \omega \mu | \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 \rangle$ sont des coefficients de Clebsch-Gordan. Si les représentations D^1 et D^2 sont des représentations irréductibles unitaires de $\mathcal{SO}(2,1)$ et si les bases correspondantes sont orthonormées, la base (3-5-4) est une base orthonormée d'une représentation irréductible unitaire de

$\mathcal{SO}(2,1)$ si :

$$\sum_{\mu_1, \mu_2} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle^* \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega' \mu' \rangle = \delta_{\omega, \omega'} \delta_{\mu, \mu'}. \quad (3-5-6)$$

On a alors :

$$\langle \omega \mu | \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 \rangle = \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle^* \quad (3-5-7)$$

et :

$$\sum_{\omega, \mu} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle^* \langle \omega_1 \mu'_1 \omega_2 \mu'_2 | \omega \mu \rangle = \delta_{\mu_1, \mu'_1} \delta_{\mu_2, \mu'_2}. \quad (3-5-8)$$

Les coefficients de Clebsch-Gordan qui interviennent ici sont ceux du groupe $SO(2,1)$; ils ont été calculés par plusieurs auteurs, à partir de méthodes différentes (Holman et Biedenharn 1966 et 1968, Uhlir 1968, Wang 1970). Nous rappelons toutefois dans l'appendice 3 le principe d'une méthode de calcul des coefficients de Clebsch-Gordan qui peut être utilisée dans les cas les plus simples. D'une part ceci nous permet de préciser les notations que nous utilisons par la suite ; d'autre part nous montrons que ce calcul repose sur les équations :

$$J_{\alpha} [|\omega_1 \mu_1\rangle \otimes |\omega_2 \mu_2\rangle] = [J_{\alpha}^{(1)} |\omega_1 \mu_1\rangle] \otimes |\omega_2 \mu_2\rangle + |\omega_1 \mu_1\rangle \otimes [J_{\alpha}^{(2)} |\omega_2 \mu_2\rangle] \quad (3-5-9)$$

(où $\alpha = 3, +$ ou $-$). Ici ces équations découlent du fait que $\mathfrak{A}^{(12)}$ est produit direct des deux algèbres et que \mathfrak{A} est défini par les équations (3-5-2) ; cependant, pour le couplage de deux réalisations B que nous allons étudier, nous obtenons des équations similaires avec une autre définition du couplage et une grande partie des résultats obtenus ici sont encore valables.

3.5.2 Couplage de deux réalisations B de l'algèbre de Lie

$$\mathfrak{SO}(2,1).$$

On considère deux réalisations B de $\mathfrak{SO}(2,1)$ dans lesquelles les variables x sont des coordonnées de deux particules différentes, x_1 et x_2 ; la variable non physique τ est la même dans les deux réalisations. Les opérateurs de base sont donc (avec les notations de l'appendice 1) :

$$\begin{cases} J_3^{(i)} = J_3 = -i\partial_\tau \\ J_\pm^{(i)} = e^{\pm i\tau} \left[\partial_{x_i} \mp q_i e^{x_i} \pm (-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2}) \right] \end{cases} \quad (3-5-10)$$

avec $i = 1, 2$. Les deux invariants sont notés $\Omega^{(1)}$ et $\Omega^{(2)}$.

Ces deux réalisations ne commutent pas et nous ne pouvons pas en former le produit direct.

Nous définissons les opérateurs J_+ et J_- de la réalisation couplée par :

$$J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\partial_{x_1} + \partial_{x_2} \mp q_1 e^{x_1} \mp q_2 e^{x_2} \pm (-i\partial_\tau \pm 1) \right] ; \quad (3-5-11)$$

en effet les opérateurs J_3 , J_+ et J_- vérifient alors les relations de commutation d'une algèbre B_1 (tableau (1)).

Soient $\Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau)$ et $\Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau)$ les fonctions de bases de représentations des deux réalisations portant sur x_1 et sur x_2 ; on a :

$$\begin{aligned} J_3 \left[\Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) \right] &= (\mu_1 + \mu_2) \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) \\ &= \left[J_3^{(1)} \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \right] \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) + \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \left[J_3^{(2)} \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) \right] ; \end{aligned} \quad (3-5-12)$$

et de façon analogue :

$$\begin{aligned}
& J_{\pm} \left[\Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) \right] \\
&= e^{i(\mu_1 + \mu_2 \pm 1)\tau} \left[\partial_{x_1} + \partial_{x_2} \mp q_1 e^{x_1} \mp q_2 e^{x_2} \pm (\mu_1 + \mu_2 \pm 1) \right] \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2) \\
&= e^{i(\mu_1 + \mu_2 \pm 1)\tau} \left\{ \left[\partial_{x_1} \mp q_1 e^{x_1} \pm (\mu_1 \pm \frac{1}{2}) \right] \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2) \right. \\
&\quad \left. + \left[\partial_{x_2} \mp q_2 e^{x_2} \pm (\mu_2 \pm \frac{1}{2}) \right] \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2) \right\} \\
&= \left[J_{\pm}^{(1)} \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \right] \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) + \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \left[J_{\pm}^{(2)} \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) \right] .
\end{aligned}$$

(3-5-13)

Ces équations sont identiques aux équations (3-5-9).

Nous définissons des fonctions $\Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau)$ par des équations analogues à (3-5-4) :

$$\Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau) = \sum_{\mu_1, \mu_2} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle \Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) , \quad (3-5-14)$$

où les coefficients $\langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle$ sont les coefficients de Clebsch-Gordan définis précédemment. En utilisant les relations de récurrence que vérifient ces derniers (appendice 3) on montre que :

$$\begin{aligned}
J_3 \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau) &= \mu \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau) \\
J_+ \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau) &= \alpha_+^{\mu+1} \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu+1}(x_1, x_2, \tau) \\
J_- \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau) &= \alpha_-^{\mu} \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu-1}(x_1, x_2, \tau) ,
\end{aligned} \quad (3-5-15)$$

où α_{\pm}^{μ} sont les éléments de matrice de J_{+} et de J_{-} dans une représentation de base $|\omega \mu\rangle$. Par conséquent les fonctions $\Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}$ forment une base de représentation de la réalisation couplée. Si on a imposé aux coefficients de Clebsch-Gordan de vérifier la relation (3-5-8) on peut écrire également le développement inverse :

$$\Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau) \Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau) = \sum_{\omega, \mu} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle^* \Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau) . \quad (3-5-16)$$

Contrairement au cas du produit direct, les produits scalaires définis pour chaque réalisation ne définissent pas un produit scalaire commode pour la réalisation couplée. Pour cette dernière nous définissons un produit scalaire dans l'espace des fonctions de x_1 , de x_2 et de τ par :

$$(\Phi | \Phi') = \int_0^{2\pi} \frac{d\tau}{2\pi} \int_{\mathbb{D}} dx_1 \int_{\mathbb{D}} dx_2 \Phi(x_1, x_2, \tau)^* \Phi'(x_1, x_2, \tau) . \quad (3-5-17)$$

Les fonctions $\Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau)$ correspondant à des fonctions

$\Phi_{\omega_1}^{\mu_1}(x_1, \tau)$ et $\Phi_{\omega_2}^{\mu_2}(x_2, \tau)$ qui appartiennent à des bases orthonormées

de représentations irréductibles de $\mathfrak{so}(2,1)$ ne sont pas orthonormées vis à vis de ce produit scalaire. De plus les conditions d'unitarité

(3-3-12) ne sont pas vérifiées. On peut cependant, à partir des fonctions

$\Phi_{\omega_1 \omega_2}^{\mu}(x_1, x_2, \tau)$, obtenir des bases orthonormées de représentations irréductibles unitaires de la réalisation couplée en effectuant

la transformation

$$\Phi(x_1, x_2, \tau) = T \bar{\Phi}(x_1, x_2, \tau) \quad (3-5-18)$$

avec $T = e^{-x_1/4} e^{-x_2/4}$.

Les nouveaux opérateurs de base

$$\bar{J}_{\alpha} = T^{-1} J_{\alpha} T \quad (3-5-19)$$

vérifient les conditions d'unitarité (3-3-12) et il suffit pour obtenir une base orthonormée de normer une fonction de base. Nous utiliserons cette transformation dans le calcul des intégrales de Slater hydrogéoïdes.

3. REPRESENTATIONS DES ALGÈBRES DE LIE B_1 , $G(01)$, \mathcal{C}_3

REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES			REPRESENTATIONS UNITAIRES			
Algèbre de Lie complexe	Nom de la R. I.	Spectre de J_3	Valeur propre de Ω	Algèbre de Lie réelle	Conditions d'unitarité	Nom de la R. U.
B_1	D^{μ_0} ($2\mu_0$ entier > 0)	$\mu_0 - \mu = 0, 1, 2, \dots$	$\mu_0(\mu_0 + 1)$	$\mathfrak{so}(3)$	$\alpha_+^{\mu*} = \alpha_-^{\mu}$	D^{μ_0*}
	$\downarrow \mu_0$ ($2\mu_0$ non entier > 0)	$\mu = \mu_0 - p$ (p entier ≥ 0)	$\mu_0(\mu_0 + 1)$	$\mathfrak{so}(2,1)$	μ_0 réel < 0 ; $\alpha_+^{\mu*} = -\alpha_-^{\mu}$	$\downarrow \mu_0^*$
	$\uparrow \mu_0$ ($2\mu_0$ non entier < 0)	$\mu = \mu_0 + p$ (p entier ≥ 0)	$\mu_0(\mu_0 - 1)$	$\mathfrak{so}(2,1)$	μ_0 réel > 0 ; $\alpha_+^{\mu*} = -\alpha_-^{\mu}$	$\uparrow \mu_0^*$
	$D(E_0, \Phi)$ ($-\frac{1}{2} \leq \mathcal{R}(E_0) < \frac{1}{2}$ $\mathcal{R}(\Phi + \frac{1}{2}) \geq 0$ $E_0 \pm \Phi$ non entier)	$\mu = E_0 + p$ (p entier)	$\Phi(\Phi + 1)$	$\mathfrak{so}(2,1)$	E_0 réel ; $\mathcal{R}(\Phi + \frac{1}{2}) = 0$; $\alpha_+^{\mu*} = -\alpha_-^{\mu}$	$D_p(E_0, \Phi)^*$ (rep. princ.)
$G(0,1)$	$\downarrow \mu_0^e$ ($e \neq 0$)	$\mu = \mu_0 + p$ (p entier ≥ 0)	$-e(\mu_0 + 1)$	\mathfrak{sl}_4	μ_0, e réel $\begin{cases} e > 0 ; \alpha_+^{\mu*} = -\alpha_-^{\mu} \\ e < 0 ; \alpha_+^{\mu*} = \alpha_-^{\mu} \end{cases}$	$\downarrow \mu_0^e$
	$\uparrow \mu_0^e$ ($e \neq 0$)	$\mu = \mu_0 + p$ (p entier ≥ 0)	$-e\mu_0$	\mathfrak{sl}_4	μ_0, e réel $\begin{cases} e > 0 ; \alpha_+^{\mu*} = \alpha_-^{\mu} \\ e < 0 ; \alpha_+^{\mu*} = -\alpha_-^{\mu} \end{cases}$	$\uparrow \mu_0^e$
	$R(E_0, \omega, e)$ ($\frac{1}{2} \leq \mathcal{R}(E_0) < \frac{1}{2}$ $\omega + eE_0$ non entier)	$\mu = E_0 + p$	ω	\mathfrak{sl}_4	E_0 réel ; $e = 0$ $\begin{cases} \omega > 0 ; \alpha_+^{\mu*} = \alpha_-^{\mu} \\ \omega < 0 ; \alpha_+^{\mu*} = -\alpha_-^{\mu} \end{cases}$	$R(E_0, \omega, 0)^*$
	$Q(E_0, \omega)$ ($-\frac{1}{2} \leq \mathcal{R}(E_0) < \frac{1}{2}$ $\omega \neq 0$)	$\mu = E_0 + p$ (p entier)	ω	\mathfrak{so}_3	E_0 réel ; si $\omega = \rho^2 e^{-i\theta}$, $\alpha_+^{\mu*} = e^{i\theta} \alpha_-^{\mu}$	$Q(E_0, \omega)^*$

4. REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES UNITAIRES DES REALISATIONS

Algèbre de Lie Complexe	Nom de la réalisation	Algèbre de Lie réelle	Représentations irréductibles unitaires de la réalisation.
B_1	A_1	$\mathfrak{so}(3)$	si $\frac{d}{a}$ entier, $D^{\mu_0^*}$, $\mu_0 = \left\lfloor \frac{d}{a} \right\rfloor + p$, p entier ≥ 0
	A_2	$\mathfrak{so}(2,1)$	si $\frac{d}{a} > \frac{1}{2}$ $\downarrow \mu_0^*$, $\mu_0 = -\frac{d}{a} + p$, $0 \leq p$ entier $< \frac{d}{a} - \frac{1}{2}$
			si $\frac{d}{a} < -\frac{1}{2}$ $\uparrow \mu_0^*$, $\mu_0 = -\frac{d}{a} - p$, $0 \leq p$ entier $< -\frac{d}{a} - \frac{1}{2}$
B	$\mathfrak{so}(2,1)$	si $\frac{d}{a} > 0$ $\uparrow \mu_0^*$ $\mu_0 > \frac{1}{2}$ si $\frac{d}{a} < 0$ $\downarrow \mu_0^*$ $\mu_0 < -\frac{1}{2}$ $D_p(E_0, \Phi)^*$, $E_0 + \frac{d}{a}$ entier	
$G(0,1)$	C'	\mathfrak{s}_4	si $b < 0$ $\downarrow \mu_0^*$ μ_0 entier ≥ 0 si $b > 0$ $\uparrow \mu_0^*$ μ_0 entier ≤ 0
	D'	\mathfrak{s}_4	si $b < 0$ $\downarrow -1$ si $b > 0$ $\uparrow 0$
\mathfrak{g}_3	C''	\mathfrak{g}_3	$Q(0, \omega)^*$ $\omega > 0$

5. REPRESENTATIONS PARTIELLEMENT UNITAIRES

DES REALISATIONS DES ALGEBRES DE LIE

B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{C}_3 .

Algèbre de Lie Complexe	Réalisation	N.U.I. représentations	Vecteurs de base normés	Echanges laissant l'équ. fact. invariante
B_1	A_1	$\uparrow \mu_0, \mu_0 < - \frac{d}{a} + 1$	$\mu < - \frac{d}{a} + 1$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow -\frac{d}{a} \\ \mu \rightarrow -\mu \end{array} \right.$ ou $\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow \mu \\ \mu \rightarrow \frac{d}{a} \end{array} \right.$
	A_2	si $\frac{d}{a} < \frac{1}{2} \uparrow \mu_0, \mu_0 > \frac{1}{2}$	$\mu < -\frac{d}{a} + 1$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow \frac{d}{a} \\ \mu \rightarrow -\mu \end{array} \right.$ ou $\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow \mu \\ \mu \rightarrow \frac{d}{a} \end{array} \right.$
		$D(E_0 \Phi), \mathcal{R}(\Phi + \frac{1}{2}) = 0$	$\mu < -\frac{d}{a} + 1$	
B	rep. unitaires seulement			
$G(0,1)$	C'	si $b > 0 \uparrow \mu_0, \mu_0 < 1$	$\mu < 1$	$\left\{ \begin{array}{l} b \rightarrow -b \\ \omega \rightarrow \omega + b(\mu + 1) \end{array} \right.$ ou $\left\{ \begin{array}{l} \mu \rightarrow -\mu \\ \omega \rightarrow \omega + b(\mu + 1) \end{array} \right.$
	D'	rep. unitaires seulement		
\mathcal{C}_3	C''	$Q(E_0, \omega) \quad \omega > 0$	$\mu < 1$	$\mu \rightarrow -\mu$

CHAPITRE 4

OPERATEURS TENSORIELS ET ELEMENTS DE MATRICE.

4.1 Introduction

Nous avons montré que, lorsque les fonctions d'onde à une variable d'un système physique sont solutions d'équations factorisables, on peut les relier simplement à des fonctions de base de représentations de certaines réalisations d'algèbres de Lie ; on interprète ainsi les nombres quantiques qui caractérisent ces fonctions d'onde comme des valeurs propres d'opérateurs (ou d'invariants) de l'algèbre. De plus, si le spectre de J_3 dans la représentation considérée est borné, la construction de l'espace de représentation permet de trouver aisément la forme explicite des fonctions d'onde.

Si l'on veut étudier un tel système en interaction avec un potentiel extérieur, ou encore si on le considère comme une approximation d'un système plus complexe, c'est-à-dire si l'on veut utiliser la théorie des perturbations, il est nécessaire de calculer les éléments de matrice d'opérateurs de transition ou de perturbation. De ce point de vue, l'intérêt majeur de l'introduction d'une réalisation d'algèbre de

Lie dans l'étude des systèmes quantiques exactement solubles réside dans le fait qu'on peut obtenir explicitement des opérateurs qui sont des opérateurs tensoriels de la réalisation considérée. Le théorème de Wigner-Eckart permet alors de calculer leurs éléments de matrice entre fonctions de base de représentations de la réalisation. Ainsi le formalisme de la théorie des groupes facilite considérablement le calcul de certaines intégrales entre fonctions d'onde à une variable, qui peuvent être liées à des éléments de matrice d'intérêt physique. La simplification apportée par cette méthode dans les différents exemples physiques dépend évidemment beaucoup de la forme des opérateurs tensoriels. Cependant, dans tous les cas, on obtient ainsi une méthode générale de calcul des éléments de matrice à une variable, qui ne fait pas appel explicitement aux propriétés des fonctions spéciales mais est directement liée aux propriétés de symétrie du système.

Dans une première partie nous donnons pour chaque réalisation étudiée la forme explicite des opérateurs tensoriels qui sont définis comme fonctions des deux variables x et τ .

Nous donnons ensuite le principe du calcul des éléments de matrice de ces opérateurs tensoriels : en effet le théorème de Wigner-Eckart ne peut pas toujours être utilisé directement, puisque nous sommes amenés à considérer des représentations qui ne sont pas toujours unitaires ni même complètement réductibles. Plus précisément nous utilisons, comme cela se fait dans les démonstrations élémentaires du théorème de Wigner-Eckart, les relations de récurrence entre éléments de matrice.

A titre d'exemple, nous décrivons ensuite complètement le calcul des éléments de matrice dans le cas particulier le plus important pour les applications, celui de la réalisation B de l'algèbre $SO(2,1)$, lorsque les vecteurs bra et ket appartiennent à des représentations irréductibles unitaires $\uparrow_{\mu_0}^*$.

Enfin nous montrons que le même type de calcul peut être étendu au cas où les vecteurs bra et ket appartiennent à des représentations du type $\uparrow_{\mu_0}^*$ de deux réalisations B différentes : le calcul de tels éléments de matrice est nécessaire si l'on veut par exemple obtenir certaines intégrales radiales hydrogénéoïdes non diagonales en énergie.

4.2 Opérateurs tensoriels des différentes réalisations.

Soit une représentation d'une des trois algèbres B_1 , $G(0,1)$ ou \mathcal{C}_3 , caractérisée par la valeur propre ω de l'invariant Ω (celle de E pour $G(0,1)$), le spectre de J_3 (c'est-à-dire un ensemble de valeurs $\mu = E_0 + p$, où E_0 est fixé et p entier) et les éléments de matrice α_+^μ et α_-^μ des opérateurs J_+ et J_- . Un ensemble d'opérateurs T_ω^μ forme par définition une base de cette représentation si :

$$\left\{ \begin{array}{l} [J_3, T_\omega^\mu] = \mu T_\omega^\mu \\ [J_+, T_\omega^\mu] = \alpha_+^{\mu+1} T_\omega^{\mu+1} \\ [J_-, T_\omega^\mu] = \alpha_-^\mu T_\omega^{\mu-1} \\ [E, T_\omega^\mu] = e T_\omega^\mu \end{array} \right. , \quad \text{pour } G(0,1) . \quad (4-2-1)$$

Nous nous limitons ici à la recherche, pour chacune des réalisations étudiées, des opérateurs tensoriels qui sont définis comme des fonctions des variables x et τ et qui s'écrivent :

$$T_{\omega}^{\mu} = F_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} f_{\omega}^{\mu}(x, \tau) \quad . \quad (4-2-2)$$

Pour de tels opérateurs, les commutateurs qui constituent les premiers membres des équations (4-2-1) peuvent être considérés comme le résultat de l'action d'opérateurs différentiels sur les fonctions $F_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$. En effet, soit D un opérateur différentiel du premier ordre à deux variables ; on peut écrire :

$$[D, F_{\omega}^{\mu}(x, \tau)] = \tilde{D} F_{\omega}^{\mu}(x, \tau) \quad ,$$

où \tilde{D} est obtenu à partir de D en y supprimant tous les termes qui ne contiennent pas d'opérateur dérivée. Si l'on examine la forme des opérateurs de base des différentes réalisations (tableau (2)), on constate que dans tous les cas :

$$\tilde{J}_3 = J_3 \quad .$$

Pour les réalisations de $G(0,1)$, E est toujours égal à une constante et donc :

$$\tilde{E} = 0$$

(une conséquence de cette égalité est que les opérateurs tensoriels de la forme (4-2-2) ne peuvent former de bases que pour les représentations de $G(0,1)$ dans lesquelles $e=0$). Enfin, si l'on remarque que les opérateurs J_+ et J_- peuvent s'écrire de façon générale (à un signe près) :

$$J_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial_x + (-i\partial_{\tau} \pm \frac{1}{2}) f_1(x) + f_2(x) \right] \quad ,$$

on peut écrire :

$$\tilde{J}_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial_x + (-i\partial_{\tau}) f_1(x) \right] .$$

Le passage de J_{\pm} à \tilde{J}_{\pm} peut être obtenu d'une part grâce à une transformation de l'espace des fonctions définie par :

$$\Phi(x, \tau) = U(x) \bar{\Phi}(x, \tau) \quad (4-2-3)$$

avec $\frac{d}{dx} [\text{Log } U(x)] = -\frac{1}{2} f_1(x) ,$

et d'autre part en annulant $f_2(x)$, ce qui revient dans tous les cas à annuler un paramètre de la réalisation.

Finalement on trouve que, pour chaque réalisation R , les fonctions $F_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$ cherchées peuvent être obtenues à partir des fonctions de base $\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$ d'une réalisation \tilde{R} , cas particulier de la réalisation initiale, par :

$$F_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = U^{-1}(x) \Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) ,$$

où $U(x)$ est défini dans les équations (4-2-3). Ces résultats sont détaillés dans le tableau suivant :

Réalisation R	Réalisation \tilde{R}	$U(x)$
A_1	$A_1 \quad d=0$	$[\sin a(x+p)]^{\frac{1}{2}}$
A_2	$A_2 \quad d=0$	$[\text{sh } a'(x+p)]^{\frac{1}{2}}$
B	$B \quad d=0$	$e^{ax/2}$
C', C''	C''	$x^{\frac{1}{2}}$
D'	$D'' \quad d=0$	1

Nous pouvons donc utiliser, pour trouver la forme des fonctions $F_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$, les résultats de l'appendice 2, qui donne la forme générale des fonctions de base des différentes réalisations. Toutefois le point de vue est ici un peu différent. Lorsque nous avons étudié les fonctions de base des représentations dans le but de trouver les fonctions d'onde, le point essentiel était l'unitarité (même "partielle") des représentations. Si nous nous intéressons aux opérateurs tensoriels, ce point est beaucoup moins important ; il s'agit surtout de trouver des opérateurs de forme simple, afin de pouvoir exprimer commodément les opérateurs physiques en fonction de ces derniers.

Les résultats sont résumés dans le tableau (6). De manière générale on peut exprimer $F_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$ comme une combinaison linéaire de deux fonctions, $U_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$ et $V_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$, avec :

$$V_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = U_{\omega}^{-\mu}(x, \tau) \quad .$$

La forme générale de la fonction $U_{\omega}^{\mu}(x, \tau)$ est donnée dans le tableau (6) et les cas dans lesquels cette forme est particulièrement simple y sont rappelés.

4.3 Principe du calcul des éléments de matrice des opérateurs tensoriels.

Les éléments de matrice, entre fonctions de base de représentations, des opérateurs tensoriels (4-2-2) s'écrivent, pour chaque réalisation (avec la définition du produit scalaire utilisée dans le chapitre 3) :

$$(\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) = \int_0^{2\pi} \frac{d\tau}{2\pi} \int_{\mathcal{D}} dx e^{i(-\mu+\mu'+\mu'')\tau} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) f_{\omega'}^{\mu'}(x) \varphi_{\omega''}^{\mu''}(x) .$$

(4-3-1)

Le calcul de ces éléments de matrice conduit donc à celui des intégrales à une variable de la forme :

$$\int_{\mathcal{D}} dx \varphi_{\omega}^{\mu}(x) f_{\omega'}^{\mu-\mu''}(x) \varphi_{\omega''}^{\mu''}(x) ;$$

(4-3-2)

nous montrons dans le dernier chapitre que de telles intégrales permettent, dans un grand nombre d'exemples physiques de systèmes quantiques exactement solubles, de calculer des éléments de matrice d'intérêt physique.

Si l'on peut utiliser le théorème de Wigner-Eckart pour le calcul des éléments de matrice (4-3-1), ils s'écrivent comme un produit de deux termes : coefficient de Clebsch-Gordan et élément de matrice réduit. Or un grand nombre de coefficients de Clebsch-Gordan sont connus dans le cas des groupes liés aux algèbres réelles que nous étudions : $SO(3)$ (voir par exemple Judd 1963), $SO(2,1)$ (voir par exemple Holman et Biedenharn 1968) et S_4 (Miller 1972). Toutefois, dans de très nombreux cas rencontrés lors des applications, le théorème de Wigner-Eckart ne peut pas être utilisé sans précautions. En effet, tout d'abord, les groupes qui interviennent sont non compacts, sauf $SO(3)$. De plus, comme nous l'avons montré, les fonctions d'onde peuvent être liées à des fonctions de base de représentations qui ne sont pas unitaires (mais "partiellement" unitaires). Enfin, les opérateurs tensoriels susceptibles de conduire à des applications peuvent appartenir à des représentations non unitaires, voire même non complètement

réductibles. En fin de compte, nous n'écrivons jamais le théorème de Wigner-Eckart sous sa forme habituelle ; nous utilisons les relations de récurrence entre éléments de matrice, qui sont évidemment analogues à celles qu'on peut utiliser pour le calcul des coefficients de Clebsch-Gordan et qui peuvent donc servir à la démonstration du théorème de Wigner-Eckart. L'avantage de cette méthode est qu'on peut contrôler la validité du calcul à chacune de ses étapes : on peut même parfois utiliser le théorème de Wigner-Eckart pour le calcul de certains éléments de matrice alors qu'il n'est pas valable pour l'ensemble des trois représentations qui interviennent.

Dans ce paragraphe, nous allons montrer, de façon générale et sans donner les formules finales correspondant aux différents cas, comment les relations de récurrence entre éléments de matrice permettent de les exprimer en fonction d'un élément de matrice particulier correspondant aux trois mêmes représentations, à condition que l'une au moins des trois représentations soit bornée.

Notons R , R' et R'' les représentations auxquelles appartiennent respectivement Φ_{ω}^{μ} , $\Phi_{\omega'}^{\mu'}$ et $\Phi_{\omega''}^{\mu''}$, et α_{\pm}^{μ} , $\beta_{\pm}^{\mu'}$ et $\gamma_{\pm}^{\mu''}$ les éléments de matrice de J_{+} et J_{-} dans ces trois représentations.

A partir de la relation de commutation

$$[J_z, T_{\omega'}^{\mu'}] = \mu' T_{\omega'}^{\mu'} \quad , \quad (4-3-3)$$

on montre que l'élément de matrice (4-3-1) est nul si $\mu \neq \mu' + \mu''$. Les relations de récurrence fondamentales entre éléments de matrice peuvent être obtenues à partir des autres relations de commutation :

$$\begin{cases} [J_+, T_{\omega'}^{\mu'}] = \beta_+^{\mu'+1} T_{\omega'}^{\mu'+1} \\ [J_-, T_{\omega'}^{\mu'}] = \beta_-^{\mu'} T_{\omega'}^{\mu'-1} \end{cases}, \quad (4-3-4)$$

qui peuvent être écrites entre éléments de matrice, à condition simplement que ces éléments soient finis ; on a ainsi :

$$\begin{aligned} (\Phi_{\omega}^{\mu} | J_+ T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) - (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'} J_+ | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) &= \beta_+^{\mu'+1} (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'+1} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) \\ (\Phi_{\omega}^{\mu} | J_- T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) - (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'} J_- | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) &= \beta_-^{\mu'} (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'-1} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) . \end{aligned} \quad (4-3-5)$$

Nous avons vu que les conditions d'unitarité concernant les opérateurs J_+ et J_- peuvent s'écrire de façon générale pour toutes les réalisations étudiées :

$$(J_{\pm})^{\dagger} = \varepsilon J_{\mp} \quad (4-3-6)$$

Si ces relations sont vérifiées pour toutes les fonctions qui interviennent dans les équations (4-3-5) (ce qui n'implique pas nécessairement que les trois représentations sont unitaires : l'unitarité "partielle" de certaines représentations peut parfois suffire), on obtient les relations de récurrence cherchées :

$$\varepsilon \alpha_-^{\mu*} (\Phi_{\omega}^{\mu-1} | T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) - \gamma_+^{\mu''+1} (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''+1}) = \beta_+^{\mu'+1} (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'+1} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) \quad (4-3-7)$$

$$\varepsilon \alpha_+^{\mu+1*} (\Phi_{\omega}^{\mu+1} | T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) - \gamma_-^{\mu''} (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'} | \Phi_{\omega''}^{\mu''-1}) = \beta_-^{\mu'} (\Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\omega'}^{\mu'-1} | \Phi_{\omega''}^{\mu''}) .$$

Pour obtenir les relations générales entre éléments de matrice, qu'on pourrait obtenir par utilisations successives des équations (4-3-7), nous préférons généraliser les relations de commutation

(4-3-4). Il est commode pour cela de définir à partir des coefficients α_{\pm}^{μ} , $\beta_{\pm}^{\mu'}$ et $\gamma_{\pm}^{\mu''}$ des coefficients $A_{\pm}^n(\mu)$, $B_{\pm}^n(\mu')$ et $C_{\pm}^n(\mu'')$ (n entier ≥ 0) tels que :

$$A_{\pm}^n(\mu) = \prod_{\sigma=1, n} \alpha_{\pm}^{\mu+\sigma} \quad (4-3-8)$$

(avec des équations analogues pour les couples B, β et C, γ).

On peut ainsi écrire :

$$\begin{cases} J_{+}^n \Phi_{\omega}^{\mu} = A_{+}^n(\mu) \Phi_{\omega}^{\mu+n} \\ J_{-}^n \Phi_{\omega}^{\mu+n} = A_{-}^n(\mu) \Phi_{\omega}^{\mu} \end{cases} \quad (4-3-9)$$

et de façon analogue

$$\begin{cases} J_{+}^n \Phi_{\omega''}^{\mu''} = C_{+}^n(\mu'') \Phi_{\omega''}^{\mu''+n} \\ J_{-}^n \Phi_{\omega''}^{\mu''+n} = C_{-}^n(\mu'') \Phi_{\omega''}^{\mu''} \end{cases} \quad (4-3-10)$$

Enfin, les relations de commutation (4-3-4) conduisent aux six équations suivantes :

$$J_{+}^n T_{\omega'}^{\mu'} = \sum_{p=0, n} \binom{n}{p} B_{+}^p(\mu') T_{\omega'}^{\mu'+p} J_{+}^{n-p} \quad (4-3-11)$$

$$J_{-}^n T_{\omega'}^{\mu'} = \sum_{p=0, n} \binom{n}{p} B_{-}^p(\mu'-p) T_{\omega'}^{\mu'-p} J_{-}^{n-p} \quad (4-3-12)$$

$$T_{\omega'}^{\mu'} J_{+}^n = \sum_{p=0, n} (-)^p \binom{n}{p} B_{+}^p(\mu') J_{+}^{n-p} T_{\omega'}^{\mu'+p} \quad (4-3-13)$$

$$T_{\omega'}^{\mu'} J_{-}^n = \sum_{p=0, n} (-)^p \binom{n}{p} B_{-}^p(\mu'-p) J_{-}^{n-p} T_{\omega'}^{\mu'-p} \quad (4-3-14)$$

$$B_{+}^n(\mu') T_{\omega'}^{\mu'+n} = \sum_{p=0, n} (-)^p \binom{n}{p} J_{+}^{n-p} T_{\omega'}^{\mu'} J_{+}^p \quad (4-3-15)$$

$$B_{-}^n(\mu') T_{\omega'}^{\mu'} = \sum_{p=0, n} (-)^p \binom{n}{p} J_{-}^{n-p} T_{\omega'}^{\mu'+n} J_{-}^p, \quad (4-3-16)$$

où les coefficients $\binom{n}{p}$ sont les coefficients du binôme.

A partir des équations (4-3-9) à (4-3-16) et de la condition d'unitarité (4-3-6), on peut obtenir toutes les relations générales entre éléments de matrice nécessaires pour le calcul de ces derniers.

Il est aussi possible d'utiliser directement ces équations : nous exposons le principe d'un tel calcul, dans le cas où le spectre de J_3 est borné inférieurement dans la représentation R'' . Soit μ''_0 la valeur minimale de μ'' dans cette représentation ; nous notons $N = \mu'' - \mu''_0$ (N entier ≥ 0). Les équations (4-3-10) permettent d'écrire :

$$(\Phi^\mu | T^{\mu'} | \Phi^{\mu''}) = \frac{1}{C_+^N(\mu''_0)} (\Phi^\mu | T^{\mu'} | J_+^N | \Phi^{\mu''_0}) \quad (4-3-17)$$

(nous omettons dans tout ce calcul les valeurs propres ω , ω' et ω'' , qui sont partout identiques). L'équation (4-3-13) permet d'écrire $T^{\mu'} J_+^N$ comme une somme de termes du type

$$J_+^{N-p} T^{\mu'+p} \quad (0 \leq p \leq N) ,$$

et, si la condition d'unitarité est vérifiée,

$$(\Phi^\mu | J_+^{N-p} T^{\mu'+p} | \Phi^{\mu''_0}) = \varepsilon^{N-p} (J_-^{N-p} \Phi^\mu | T^{\mu'+p} | \Phi^{\mu''_0})$$

Or on a :

$$J_-^{N-p} \Phi^\mu \propto \Phi^{\mu-N+p} \propto J_+^{k+p} \Phi^{\mu-N-k} ,$$

à condition simplement que $k+p \geq 0$ (il faut évidemment de plus que $\mu-N+p$ appartienne au spectre de J_3 dans R : sinon tous les termes de la somme qui correspondent à ces valeurs de p sont nuls) ; les coefficients de proportionnalité sont donnés par les équations (4-3-9).

Les éléments de matrice (4-3-17) peuvent donc être remplacés, en utilisant à nouveau la condition d'unitarité, par :

$$(\Phi^{\mu-N-k} | J_{\underline{\quad}}^{k+p} T^{\mu'+p} | \Phi^{\mu''})$$

Les opérateurs $J_{\underline{\quad}}^{k+p} T^{\mu'+p}$ s'écrivent (équation (4-3-12)) comme une somme de termes du type :

$$T^{\mu'+p-p'} J_{\underline{\quad}}^{k+p-p'} \quad (0 \leq p' \leq k+p) .$$

Or l'action de $J_{\underline{\quad}}$ sur $\Phi^{\mu''}$ donne zéro. Le seul terme de cette somme qui conduit à des éléments de matrice non nuls est donc celui où $p' = k+p$. Finalement, nous exprimons donc l'élément de matrice $(\Phi^{\mu} | T^{\mu'} | \Phi^{\mu''})$ comme le produit par une quantité qui ne dépend que des valeurs $\omega, \mu, \omega', \mu', \omega'', \mu''$ et k (qui est le rapport de deux coefficients de Clebsch-Gordan) du seul élément de matrice

$$(\Phi^{\mu-N-k} | T^{\mu'-k} | \Phi^{\mu''}) \quad . \quad (4-3-18)$$

On peut faire un calcul tout à fait analogue dans tous les cas où le spectre de J_3 de l'une des trois représentations R, R' ou R'' est borné, supérieurement ou inférieurement. Il reste bien entendu à calculer l'élément de matrice analogue à (4-3-18) qui subsiste dans la formule finale. Ce calcul contient en fait celui de l'élément de matrice réduit et doit donc être effectué dans chaque cas particulier. Dans de nombreux cas, on peut choisir l'élément de matrice (4-3-18) de manière que l'expression des fonctions et de l'opérateur qui interviennent soit particulièrement simple et que l'intégration directe soit aisée.

Une conséquence importante du théorème de Wigner-Eckart est l'existence de règles de sélection. Pour les raisons invoquées précédemment à propos de la validité du théorème de Wigner-Eckart, ces règles ne peuvent pas être utilisées sans précautions dans les applications que nous étudions. Nous rappelons ici quels sont, pour les trois algèbres B_1 , $G(0,1)$ et \mathcal{U}_3 , les cas où la réduction du produit de représentations en représentations irréductibles s'écrit de manière simple ; ce sont toujours des cas où interviennent des représentations bornées : il n'y a pas de règles de sélection simples pour \mathcal{U}_3 . Nous donnons également le type de règles de sélection qui en découlent (avec certaines conditions, qu'on doit établir dans les différents cas particuliers).

Pour l'algèbre B_1 on a :

$$D^k \times D^{k'} = \sum_{k''} D^{k''}, \quad \text{avec } |k-k'| \leq k'' \leq k+k'$$

$$D^k \times \uparrow_{\mu_0} = \sum_{p=0, 2k} \uparrow_{\mu_0 - k + p}$$

$$\uparrow_{\mu_0} \times \uparrow_{\mu'_0} = \sum_{p=0, +\infty} \uparrow_{\mu_0 + \mu'_0 + p}$$

et, pour $G(0,1)$:

$$\uparrow_{\mu_0}^e \times \uparrow_{\mu'_0}^{e'} = \sum_{p=0, +\infty} \uparrow_{\mu_0 + \mu'_0 + p}^{e+e'}$$

(on a des relations analogues en remplaçant toutes les représentations bornées inférieurement par des représentations bornées supérieurement).

Les règles de sélection correspondantes que nous utiliserons s'écrivent, pour B_1 :

$$(D^k | D^{k'} | D^{k''}) = 0 \quad \text{sauf si} \quad |k' - k''| \leq k \leq k' + k \quad (4-3-19)$$

$$(\uparrow_{\mu_0}^k | D^k | \uparrow_{\mu_0'}^i) = 0 \quad \text{sauf si} \quad k - |\mu_0 - \mu_0'| = 0, 1, 2 \dots \quad (4-3-20)$$

$$(\uparrow_{\mu_0}^k | \uparrow_{\mu_0'}^i | \uparrow_{\mu_0''}^j) = 0 \quad \text{sauf si} \quad \mu_0 - \mu_0' - \mu_0'' = p \quad (p \text{ entier} \geq 0) \quad (4-3-21)$$

(avec des relations analogues pour les représentations bornées supérieurement). Pour les réalisations $G(0,1)$ que nous étudions, les opérateurs tensoriels appartiennent toujours à des représentations non bornées ($\epsilon=0$) et il n'apparaît donc aucune règle de sélection dans le calcul des éléments de matrice.

4.4 Exemple de calcul d'éléments de matrice : réalisation B.

Dans ce paragraphe, nous utilisons le principe de calcul décrit ci-dessus pour le cas de la réalisation B de l'algèbre $\mathcal{A}(2,1)$ et nous exposons de manière complète le calcul des éléments de matrice des opérateurs tensoriels de cette réalisation, pris entre des fonctions de base qui appartiennent respectivement à des représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$ et $\uparrow_{\mu_0'}^*$.

D'après le tableau (6) les opérateurs tensoriels de cette réalisation s'écrivent :

$$P_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} e^{(\Phi+1)ax}, \quad \text{avec} \quad \omega = \Phi(\Phi+1).$$

Pour la commodité des notations, nous posons ici $\Phi+1 = k$ et :

$$P_k^m = e^{im\tau} e^{kax} \quad (4-4-1)$$

Les éléments de matrice de J_+ et J_- dans les représentations dont

de tels opérateurs forment des bases s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta_+^m = k+m-1 \\ \beta_-^m = k-m \end{array} \right. \quad (4-4-2)$$

On trouve à partir de ces coefficients que les représentations irréductibles bornées dont les opérateurs P_k^m peuvent former des bases sont :

$$\begin{array}{ll} \uparrow k & \text{si } m-k \text{ entier } \geq 0 \\ \downarrow -k & \text{si } m+k \text{ entier } \leq 0 \\ D^k & \text{si } 2k \text{ entier } \geq 0 \text{ et } |m| \leq k \end{array} .$$

Nous rappelons l'expression des éléments de matrice de J_+ et J_- dans les représentations $\uparrow \mu_0^*$ et $\uparrow \mu_0'^*$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\pm}^{\mu} = \pm \sqrt{(\mu - \mu_0)(\mu + \mu_0 - 1)} \\ \gamma_{\pm}^{\mu'} = \pm \sqrt{(\mu' - \mu_0')(\mu' + \mu_0' - 1)} \end{array} \right. \quad (4-4-3)$$

Nous écrivons l'élément de matrice à calculer :

$$M = (\Phi_{\mu_0}^{\mu} | P_k^m | \Phi_{\mu_0'}^{\mu'}) ; \quad (4-4-4)$$

on suppose que $\mu = m + \mu'$ (puisque, sinon, l'élément de matrice est nul) et on pose $N = \mu - \mu_0$ et $N' = \mu' - \mu_0'$, N et N' étant donc des entiers ≥ 0 .

Les équations (4-3-9) et (4-3-10) permettent de mettre M sous la forme :

$$M = \frac{1}{A_+^N(\mu_0) C_+^{N'}(\mu_0')} (J_+^N \Phi_{\mu_0}^{\mu_0} | P_k^m | J_+^{N'} \Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}) \quad (4-4-5)$$

En examinant le comportement aux bornes du domaine de x des fonctions qui interviennent dans cet élément de matrice, on constate que la condition d'unitarité (4-3-6) est vérifiée, avec $\varepsilon = -1$, de telle sorte qu'on peut écrire :

$$M = \frac{(-)^N}{A_+^N(\mu_0) C_+^{N'}(\mu'_0)} \left(\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} \left| J_-^N P_k^m J_+^{N'} \right| \Phi_{\mu_0}^{\mu'_0} \right) . \quad (4-4-6)$$

On utilise ensuite l'équation (4-3-12), qui donne

$$J_-^N P_k^m = \sum_{i=0, N} \binom{N}{i} B_-^i(m-i) P_k^{m-i} J_-^{N-i} . \quad (4-4-7)$$

Les équations (4-3-10) permettent d'écrire :

$$J_-^{N-i} J_+^{N'} \Phi_{\mu_0}^{\mu'_0} = \frac{C_+^{N'}(\mu'_0) C_-^{N'}(\mu'_0)}{C_+^{N'-N+i}(\mu'_0) C_-^{N'-N+i}(\mu'_0)} J_+^{N'-N+i} \Phi_{\mu_0}^{\mu'_0} , \quad (4-4-8)$$

à condition que $N'-N+i$ soit positif ou nul ; sinon, l'élément de matrice de la somme correspondant à une telle valeur de i est nul. On utilise enfin l'équation (4-3-13) et l'on obtient :

$$P_k^{m-i} J_+^{N'-N+i} = \sum_{j=0, N'-N+i} \binom{N'-N+i}{j} B_+^j(m-i) J_+^{N'-N+i-j} P_k^{m-i+j} . \quad (4-4-9)$$

L'action de J_+ sur le bra $\left(\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} \right|$ donne un résultat nul : le seul terme de la somme sur j qui conduit à un élément de matrice non nul est celui pour lequel $j = N'-N+i$.

Finalement l'élément de matrice initial peut, si l'on tient compte du fait que $m = \mu - \mu'$, être exprimé sous la forme :

$$\begin{aligned}
M &= \frac{(-)^N}{A_+^N(\mu_0) C_+^{N'}(\mu'_0)} \\
&\times \sum_{j=\sup(0, N-N'), N} (-)^{N'-N+i} \binom{N'-N+i}{i} B_-^i(\mu-\mu'-i) B_+^{N'-N+i}(\mu-\mu'-i) \frac{C^{N'}(\mu'_0)}{C^{N'-N+i}(\mu'_0)} \\
&\times (\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} | P_k^{\mu_0-\mu'_0} | \Phi_{\mu'_0}^{\mu'_0}) , \tag{4-4-10}
\end{aligned}$$

où l'on a posé $C_+^n(\mu) C_-^n(\mu) = C^n(\mu)$.

Les coefficients A, B et C qui interviennent dans cette formule peuvent être obtenus à partir des équations (4-3-8), (4-4-2) et (4-4-3) :

$$\begin{aligned}
A_{\pm}^n(\mu_0) &= (\pm)^n \left[\frac{n! \Gamma(2\mu_0+n)}{\Gamma(2\mu_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
C_{\pm}^n(\mu'_0) &= (\pm)^n \left[\frac{n! \Gamma(2\mu'_0+n)}{\Gamma(2\mu'_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
B_+^n(\mu) &= \prod_{\sigma=1, n} (k+\mu+\sigma+1) \\
B_-^n(\mu) &= \prod_{\sigma=1, n} (k-\mu-\sigma) . \tag{4-4-11}
\end{aligned}$$

Si l'on utilise ces expressions dans la formule (4-4-10) on obtient :

$$\begin{aligned}
M &= (-)^{N+N'} \left[\frac{\Gamma(2\mu_0) \Gamma(2\mu'_0) N! N'! \Gamma(2\mu'_0+N')}{\Gamma(2\mu_0+N)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\times \sum_{i=\sup(N-N', 0), N} \left[\frac{1}{i!(N-i)! (N'-N+i)! \Gamma(2\mu'_0+N'-N+i)} \right] \\
&\quad \times \prod_{\sigma=1, i} (k-\mu+\mu'+i-\sigma) \prod_{\sigma=1, N'-N+i} (k+\mu-\mu'-i+\sigma-1) \\
&\times (\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} | P_k^{\mu_0-\mu'_0} | \Phi_{\mu'_0}^{\mu'_0}) . \tag{4-4-12}
\end{aligned}$$

Les produits qui apparaissent dans cette formule s'expriment comme des rapports de fonctions gamma, ou de factorielles (dans ce dernier cas l'expression est différente suivant que les éléments du produit sont positifs ou négatifs). Il est possible ensuite de modifier l'expression de la somme, et d'obtenir ainsi un certain nombre de formules différentes, en utilisant le théorème d'addition des coefficients du binôme ; des transformations de ce type sont utilisées par Edmonds (1957, p. 45) et un certain nombre d'identités permettant de les obtenir sont données par Cunningham (1972). Nous ne donnons pas les différentes formes possibles : deux formules particulières, écrites pour k entier négatif et k entier positif, peuvent être trouvées dans l'annexe (V).

Enfin, les fonctions $\Phi_{\mu_0}^{\mu_0}$ et $\Phi_{\mu_0}^{\mu_0'}$ qui apparaissent dans l'élément de matrice résiduel de la formule (4-4-6) ont une expression particulièrement simple (cf. appendice 1) ; on calcule aisément cet élément de matrice :

$$\left(\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} \middle| P_k^{\mu_0 - \mu_0'} \middle| \Phi_{\mu_0}^{\mu_0'} \right) = \left(\frac{a}{2d} \right)^k \frac{\Gamma(k + \mu_0 + \mu_0' - 1)}{[\Gamma(2\mu_0 - 1) \Gamma(2\mu_0' - 1)]^{\frac{1}{2}}} \quad (4-4-13)$$

Les éléments de matrice que nous avons calculés dans ce paragraphe obéissent à des règles de sélection du type (4-3-20) et (4-3-21) (qu'on peut d'ailleurs retrouver à partir de la formule (4-4-6)). Plus précisément, si $P_k^{\mu - \mu'}$ appartient à une représentation $\uparrow k$, c'est-à-dire si $\mu - \mu' - k$ est un entier ≥ 0 , l'élément de matrice est nul sauf si $\mu_0 - \mu_0' - k$ est aussi positif ou nul ; si $P_k^{\mu - \mu'}$ appartient à une représentation D^k , c'est-à-dire si $2k$ est un entier ≥ 0 et si $k - |\mu - \mu'|$ est un entier ≥ 0 , l'élément de matrice est nul sauf si $|\mu_0 - \mu_0'| \leq k$.

4.5 Éléments de matrice entre fonctions de base de deux réalisations

B différentes.

Dans les applications que nous étudions, il arrive, si la réalisation d'algèbre de Lie est introduite indirectement (cf. paragraphe 2.6), qu'un nombre quantique caractérisant la fonction d'onde soit un paramètre de la réalisation associée. Dans ce cas, les fonctions d'onde sont liées à des fonctions de base de représentations de réalisations différentes, et le calcul d'éléments de matrice d'opérateurs tensoriels décrit ci-dessus conduit seulement à des intégrales qui sont diagonales vis à vis d'un nombre quantique. Pour calculer les intégrales non diagonales, il est nécessaire de calculer des éléments de matrice d'opérateurs tensoriels entre des fonctions de base de réalisations différentes. Nous montrons ici que, dans le cas particulier des réalisations de type B de même paramètre a et pour des fonctions de base appartenant à des représentations $\uparrow\mu_0^*$ et $\uparrow\mu_0'^*$, un tel calcul peut être calqué sur celui du paragraphe précédent.

Ceci repose essentiellement sur deux propriétés particulières des réalisations de type B. Tout d'abord, les opérateurs tensoriels et les représentations dont ils forment des bases sont identiques pour toutes les réalisations B de même paramètre a . Nous écrivons donc ces opérateurs sous la forme (4-4-1) et les éléments de matrice des opérateurs J_+ et J_- sont donnés, quel que soit le paramètre d , par les équations (4-4-2). D'autre part, si l'on considère deux réalisations B de même paramètre a , on constate (cf. tableau (2)) que les opérateurs J_3 sont égaux et que les opérateurs J_+ (resp. J_-)

sont égaux à un opérateur tensoriel près. Nous posons $ax=z$ et $q=\frac{d}{a}$. Les deux réalisations sont caractérisées par leurs paramètres q_1 et q_2 respectifs ; on écrit :

$$\begin{aligned} J_{q_1^\pm} &= e^{\pm i\tau} [\partial_z \mp q_1 e^z \pm (-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2})] \\ J_{q_2^\pm} &= e^{\pm i\tau} [\partial_z \mp q_2 e^z \pm (-i\partial_\tau \pm \frac{1}{2})] \end{aligned} \quad (4-5-1)$$

On a donc, en posant $\delta = q_1 - q_2$:

$$\begin{aligned} J_{q_1^+} - J_{q_2^+} &= -\delta e^{i\tau} e^z = -\delta P_1^1 \\ J_{q_1^-} - J_{q_2^-} &= \delta e^{-i\tau} e^z = \delta P_1^{-1} \end{aligned} \quad (4-5-2)$$

Nous écrivons l'élément de matrice à calculer :

$$M = (\Phi_{\mu_0}^{\mu'}(q_1) | P_k^m | \Phi_{\mu_0}^{\mu'}(q_2))$$

En utilisant les mêmes raisonnements que dans le paragraphe précédent, étant donné que les éléments de matrice de $J_{q_1^\pm}$ dans la représentation $\uparrow_{\mu_0}^*$ et de $J_{q_2^\pm}$ dans $\uparrow_{\mu_0'}^*$ sont donnés par les équations (4-4-3), on obtient une équation analogue à (4-4-6) :

$$M = \frac{(-)^N}{A_+^N(\mu_0) C_+^N(\mu_0')} (\Phi_{\mu_0}^{\mu'}(q_1) | J_{q_1^-}^N P_k^m J_{q_2^+}^{N'} | \Phi_{\mu_0'}^{\mu'}(q_2))$$

On pourrait ensuite utiliser la formule (4-3-12) pour exprimer

$J_{q_1^-}^N P_k^m$ comme une somme de termes du type $P_k^{m-i} J_{q_1^-}^{N-i}$; toutefois, l'action des opérateurs $J_{q_1^\pm}$ sur les fonctions $\Phi_{\mu_0'}^{\mu'}(q_2)$ ne s'écrit pas simplement. Il faudrait donc, à partir des équations (4-5-2), exprimer $J_{q_1^-}^{N-i}$ en fonction de $J_{q_2^-}$ et d'opérateurs tensoriels. Nous montrons dans l'appendice 4 que l'ensemble des deux

opérations précédentes peut être résumé par une seule formule qui utilise à la fois l'équation (4-3-12) et les équations (4-5-2) :

$$J_{q_1^-}^N P_k^m = \sum_{p,i} \delta^P \frac{N!}{p!(i-p)!(N-i)!} \prod_{\sigma=1, i-p}^{(k-m+p+\sigma-1)} P_{k+p}^{m-i} J_{q_2^-}^{N-i} . \quad (4-5-3)$$

Il est alors possible d'écrire une équation analogue à (4-4-8) :

$$J_{q_2^-}^{N-i} J_{q_2^+}^{N'} \Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_2) = \frac{c^{N'}(\mu_0')}{c^{N'-N+i}(\mu_0')} J_{q_2^+}^{N'-N+i} \Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_2) .$$

La formule (A-4-7), analogue à (4-5-3), qui est également démontrée dans l'appendice 4, conduit à :

$$P_{k+p}^{m-i} J_{q_2^+}^{N'-N+i} = \sum_{p', i'} (-)^{i'-p'} \frac{(N'-N+i)!}{i'!(i'-p')!(N'-N+i-i')!} \prod_{\sigma=1, i'-p'}^{(k+p+m-i+i'+\sigma-1)} \times J_{q_1^+}^{N'-N+i-i'} P_{k+p+p'}^{m-i-i'} .$$

L'action de $J_{q_1^+}$ sur le bra $(\Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_1) |$ donne zéro et le seul terme de la somme sur i' qui conduit à un élément de matrice non nul est celui où $i' = N'-N+i$.

Finalement, en tenant compte du fait que $m = \mu - \mu'$, on écrit :

$$\begin{aligned} M &= \frac{(-)^N}{A_+^N(\mu_0) C_+^{N'}(\mu_0')} \\ &\times \sum_{p, p', i} (-)^{N'-N+i-p'} \frac{N!}{p!(i-p)!(N-i)!(N'-N+i-p')!} \frac{c^{N'}(\mu_0')}{c^{N'-N+i}(\mu_0')} \\ &\times \prod_{\sigma=1, i-p}^{(k-\mu+\mu'+p+\sigma-1)} \prod_{\sigma=1, N'-N+i-p'}^{(k+\mu-\mu'+p+p'-i+\sigma-1)} \\ &\times (\Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_1) | P_{k+p+p'}^{\mu_0-\mu_0'} | \Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_2)) . \end{aligned} \quad (4-5-4)$$

En utilisant l'expression des fonctions $\Phi_{\mu_0}^{\mu_0}(q_1)$ et $\Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_2)$ on trouve que :

$$\begin{aligned} & (\Phi_{\mu_0}^{\mu_0}(q_1) | P_{k+p+p'} | \Phi_{\mu_0'}^{\mu_0'}(q_2)) \\ &= \frac{(2q_1)^{\mu_0 - \frac{1}{2}} (2q_2)^{\mu_0' - \frac{1}{2}} \Gamma(\mu_0 + \mu_0' + k + p + p' - 1)}{(q_1 + q_2)^{\mu_0 + \mu_0' - 1 + k + p + p'} [\Gamma(2\mu_0 - 1) \Gamma(2\mu_0' - 1)]^{\frac{1}{2}}} \end{aligned}$$

Si enfin on remplace les coefficients A, B et C par leurs valeurs (équations (4-4-11)) et qu'on pose $N-i=n$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} M &= \frac{(2q_1)^{\mu_0 - \frac{1}{2}} (2q_2)^{\mu_0' - \frac{1}{2}}}{(q_1 + q_2)^{\mu_0 + \mu_0' - 1 + k}} \left[\frac{(2\mu_0 - 1)(2\mu_0' - 1) N! N'! \Gamma(2\mu_0' + N')}{\Gamma(2\mu_0 + N)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \sum_{p, p', n} (-)^{N+N'-p'} \frac{1}{n! p! p'! (N-n-p)! (N'-n-p')! \Gamma(2\mu_0' + N' - n)} \\ &\times \prod_{\sigma=1, N-n-p} (k - \mu + \mu' + p + \sigma - 1) \prod_{\sigma=1, N'-n-p'} (k + \mu_0 - \mu' + p + p' + n + \sigma - 1) \\ &\times \left[\frac{q_1 - q_2}{q_1 + q_2} \right]^{p+p'} \Gamma(\mu_0 + \mu_0' + k + p + p' + 1) \quad (4-5-5) \end{aligned}$$

Malgré son analogie avec la formule (4-4-10), l'équation (4-5-4) n'est évidemment pas une expression du théorème de Wigner-Eckart. L'élément de matrice n'est plus exprimé comme le produit d'un élément de matrice particulier (contenant l'élément de matrice réduit) par une quantité ne dépendant que des valeurs des nombres quantiques

(rapport de deux coefficients de Clebsch-Gordan), mais comme une somme de tels produits. De plus, l'équation (4-5-5) contenant une somme sur trois indices, il reste difficile de calculer explicitement de tels éléments de matrice sauf pour des valeurs de N et de N' petites.

Signalons enfin que certains auteurs (Badawi, Bessis, Bessis et Hadinger 1973) ont établi des expressions analogues en utilisant la méthode de factorisation, dans le cas particulier des fonctions radiales de l'atome d'hydrogène.

6 - OPERATEURS TENSORIELS DES REALISATIONS DES ALGEBRES DE LIE B_1 , $G(0,1)$ et \mathfrak{U}_3 .

Réalisation	Forme générale de $U_\mu^\omega(x)$	cas particuliers et repr. correspondantes
A_1	$[\sin \frac{a(x+p)}{2}]^\mu F(\mu-\Phi, \mu+\Phi+1; \mu+1; \sin^2 \frac{a(x+p)}{2})$ $\omega = \Phi(\Phi+1)$	polynômes repr. bornées
A_2	$[\operatorname{th} \frac{a'(x+p)}{2}]^\mu [\operatorname{ch} \frac{a'(x+p)}{2}]^{2\Phi} F(\mu-\Phi, -\Phi; \mu+1; \operatorname{th}^2 \frac{a'(x+p)}{2})$ $\omega = \Phi(\Phi+1)$	polynômes repr. bornées
B	$e^{(\Phi+1)x}$ $\omega = \Phi(\Phi+1)$	e^{-kx} ($2k$ entier ≥ 0) e^{kx} ($k > 0$) $\uparrow k^*$ et $\downarrow -k^*$
C'	$x^\mu e^{-kx} F(\mu + \frac{1}{2}; 2\mu+1; 2kx)$ $k = i\sqrt{\omega}$ si $\omega > 0$ $k = \sqrt{-\omega}$ si $\omega < 0$	$J_\mu(\sqrt{\omega} x)$ $\omega > 0$ μ entier $R(0, \omega, 0)^*$
D'	e^{kx} $k = \pm i\sqrt{\omega}$ si $\omega > 0$ $k = \pm \sqrt{-\omega}$ si $\omega < 0$	$\sin(\sqrt{\omega} x + \mu \frac{\pi}{2} + \theta)$ $\omega > 0$ $R(E_0, \omega, 0)^*$
C''	Même forme que pour C'	Même forme que pour C' $Q(0, \omega)^*$

CHAPITRE 5

5.1 Introduction.

Dans les chapitres précédents nous avons montré comment peut être construite, à partir de la correspondance entre équations factorisables et réalisations d'algèbres de Lie, une méthode générale d'étude des systèmes quantiques exactement solubles, qui repose sur les propriétés de ces réalisations. En effet soit un système physique dont l'équation d'état est séparable, dans un système de coordonnées convenable. Pour chaque équation séparée on doit résoudre une équation aux valeurs propres, c'est-à-dire chercher les fonctions d'onde à une variable normées ; en outre, si l'on désire étudier ce système en interaction avec un potentiel extérieur, on doit, pour pouvoir appliquer la théorie des perturbations, calculer les intégrales à une variable qui proviennent des éléments de matrice de perturbation. Nous avons montré que dans le cas où l'équation séparée est factorisable (ou lorsqu'elle peut être transformée en une équation factorisable), la résolution de ces deux problèmes se réduit à la recherche de représentations unitaires ou "partiellement" unitaires et au calcul d'éléments de matrice d'opérateurs tensoriels de la réalisation associée à l'équation factorisable. Tous ces résultats ont été établis dans les chapitres précédents et

l'objet du présent chapitre est de montrer comment ils peuvent être utilisés dans des cas physiques de systèmes quantiques exactement solubles. Ces cas sont nombreux et variés et peuvent être utilisés, comme première approximation de systèmes plus complexes, dans tous les domaines de la physique quantique ; nous ne cherchons pas ici à faire une étude exhaustive (signalons toutefois qu'une liste contenant des exemples correspondant à toutes les réalisations étudiées peut être trouvée dans l'annexe (V)), mais à illustrer sur quelques cas particuliers les points essentiels de la méthode décrite et à montrer son efficacité.

La démarche suivie peut être résumée de la façon suivante.

Tout d'abord, on sépare les variables de l'équation de Schrödinger ou de Dirac du système, dans un système de coordonnées convenable. Ce problème a été étudié de façon générale dans le paragraphe 2.2 ; nous rappelons que, dans le cas de l'équation de Dirac, il est souvent commode d'utiliser la méthode quaternionique : deux exemples sont décrits en détail dans les annexes (III) et (IV) .

L'équation séparée est alors identifiée (en utilisant, si nécessaire, les résultats du paragraphe 2.6) à une équation factorisable de type A, B, C ou D, ce qui permet d'introduire la réalisation d'algèbre de Lie associée à cette équation (tableau (2)). Dans certains cas particuliers, on peut montrer, en identifiant la variable auxiliaire τ à une variable du système physique, que cette réalisation est une algèbre d'invariance ou l'algèbre d'un sous-groupe dynamique du système.

Dans tous les cas, la recherche des fonctions d'onde normées se ramène à celle des fonctions de base normées des représentations de la réalisation obtenue (cf. chapitre 3) ; sauf si celle-ci est une algèbre d'invariance ou une sous-algèbre du groupe dynamique, on doit considérer non seulement les représentations unitaires mais aussi, éventuellement, certaines représentations "partiellement" unitaires (cf. paragraphe 3.4). Nous rencontrons dans de nombreux cas une difficulté que nous avons signalée dans le paragraphe 3.4.1 : il peut arriver, par exemple lorsque l'équation factorisable est obtenue à partir de l'équation séparée par un changement de variable, que la condition de normalisation physique soit différente de celle qui est associée au produit scalaire du chapitre 3. Nous montrons que la plupart du temps ceci introduit seulement un facteur de proportionnalité supplémentaire entre les fonctions d'onde et les fonctions de base normées.

Enfin, le calcul des éléments de matrice des opérateurs tensoriels de la réalisation considérée conduit à celui de certaines intégrales à une variable, qui ont dans de nombreux cas un intérêt physique. Une restriction importante à ce calcul d'intégrales apparaît parfois : il arrive (cf. paragraphe 2.6.3) que, dans la correspondance entre l'équation factorisable et la réalisation d'algèbre de Lie, un paramètre de cette dernière soit identifié à un nombre quantique caractérisant la fonction d'onde. Dans ce cas, le théorème de Wigner-Eckart ne permet d'évaluer que les intégrales qui sont diagonales vis à vis de ce nombre quantique. Nous avons cependant montré que, pour la réalisation B , il est aussi possible (cf. paragraphe 4.5) de calculer des intégrales non diagonales ; les expressions obtenues sont toutefois

beaucoup plus compliquées. Signalons enfin que, dans le cas de la réalisation B , il est également possible d'utiliser la théorie des groupes dans le calcul de certaines intégrales d'opérateurs à deux corps d'intérêt physique qui ne sont pas des opérateurs tensoriels relativement à chacune des deux algèbres.

Nous décrivons tout d'abord les exemples d'application qui sont étudiés dans les articles présentés en annexe : l'atome d'hydrogène relativiste (annexes (I) et (V)), l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions (annexe (II)), le problème de Kepler relativiste avec charges magnétiques (annexe (III)) et l'électron de Landau relativiste (annexe (IV)). Dans tous ces cas, nous ne rappelons pas le détail des calculs et nous nous limitons à un bref résumé, tout en cherchant à dégager les caractéristiques essentielles du formalisme qu'ils illustrent.

Nous décrivons ensuite quelques applications variées, qui nous permettent de montrer comment on peut tirer parti de certains résultats établis précédemment. Ainsi, le calcul des éléments de matrice entre fonctions de base de représentations de deux réalisations B différentes permet, dans le cas de l'atome d'hydrogène non relativiste (qui a été étudié par Armstrong (1970)), de calculer des intégrales radiales non diagonales en énergie, qui ne sont pas calculables grâce au théorème de Wigner-Eckart.

La seconde application, qui souligne l'intérêt du couplage défini dans le paragraphe 3.5.2, concerne également l'atome d'hydrogène non relativiste. Nous montrons que les fonctions d'onde en coordonnées

paraboliques peuvent être étudiées au moyen de deux réalisations B de l'algèbre $\mathcal{SO}(2,1)$. L'algèbre couplée obtenue à partir de ces deux réalisations peut être identifiée à celle introduite par Armstrong pour les fonctions d'onde radiales ; on montre ainsi que les coefficients du développement de la fonction d'onde en coordonnées sphériques sur celles en coordonnées paraboliques sont des coefficients de Clebsch-Gordan du groupe $SO(2,1)$.

Nous rappelons ensuite l'étude de Dunlap et Armstrong (1972) sur un électron dans un potentiel de Hulthén : ce problème nécessite l'introduction de représentations "partiellement" unitaires de la réalisation A_2 de $\mathcal{SO}(2,1)$, et fournit un exemple physique du cas considéré dans le paragraphe 3.4.3.

Enfin, nous décrivons le principe d'un calcul d'intégrales à deux corps qui utilise le couplage de deux réalisations B de $\mathcal{SO}(2,1)$ défini dans le paragraphe 3.5.2 ; nous montrons ainsi que les intégrales de Slater (1929) ou de Marvin (1947) hydrogénéoïdes peuvent être exprimées en fonction de coefficients de Clebsch-Gordan de $SO(2,1)$ et d'intégrales particulières du type

$$R^k(n, n-1, n', n'-1 ; n'', n''-1, n''', n'''-1),$$

qui sont faciles à calculer.

5.2 Résumé et commentaires des articles présentés en annexe.

5.2.1 Fonctions d'onde radiales relativistes des atomes hydrogénéoïdes.

On sait que l'équation de Dirac d'un atome hydrogénéoïde est

séparable en coordonnées sphériques. L'ensemble des deux équations radiales (équations différentielles du premier ordre couplées) est équivalent à un système de deux équations différentielles du second ordre non couplées qui sont des équations factorisables de type F (on peut obtenir un tel système par deux voies différentes, décrites respectivement dans l'annexe (I) et dans l'annexe (V)). Ces équations peuvent être transformées en équations factorisables de type B, auxquelles sont associées des réalisations de $SO(2,1)$. Les résultats du paragraphe 2.6.3 montrent qu'il est nécessaire, à cause de cette transformation, d'utiliser dans la réalisation soit une variable dont la définition à partir de la variable z est différente pour chaque valeur de l'énergie, soit un paramètre d (cf. tableau (2)) qui dépend de l'énergie ; ces deux possibilités sont exploitées respectivement dans l'annexe (I) et dans l'annexe (V). Il faut signaler également que la condition de normalisation physique ne coïncide pas avec celle que nous avons utilisée pour les vecteurs de base des représentations ; nous montrons que ceci conduit seulement à introduire une constante de normalisation, qu'on peut d'ailleurs calculer comme un élément de matrice d'opérateur tensoriel. Le résultat important de cette étude est que le calcul des éléments de matrice des opérateurs tensoriels permet de calculer les intégrales radiales (diagonales en énergie) des opérateurs r^k , qui interviennent dans de nombreuses grandeurs physiques ; ces résultats sont appliqués, dans l'annexe (I), au traitement relativiste de l'effet Zeeman (correction de Breit-Margenau) et de la structure hyperfine (corrections de Casimir). Signalons ici que le calcul des intégrales non diagonales en énergie peut en principe être fait en

utilisant les résultats du paragraphe 4.5 ; toutefois les formules obtenues sont extrêmement compliquées et inutilisables sauf si l'intégrale est diagonale en j .

5.2.2 Fonctions d'onde radiales de l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions.

L'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions a été étudié, selon une méthode identique à celle décrite ici, par Armstrong (1970). Nous rappelons très rapidement les résultats essentiels : l'équation radiale (en coordonnées sphériques) de ce système est une équation factorisable de type C, qui, grâce à un changement de variable (cf. paragraphe 2.6.3), peut être transformée en équation factorisable de type B ; les fonctions d'onde radiales sont donc liées à des fonctions de base de représentations d'une réalisation B de l'algèbre de Lie $SO(2,1)$. Le calcul des éléments de matrice d'opérateurs tensoriels conduit à celui des intégrales radiales des opérateurs r^k (sans restriction sur les nombres quantiques).

Dans l'annexe (II) est décrite une autre approche de l'étude de ce système, qui consiste à examiner les propriétés tensorielles des opérateurs annihilation et création de bosons vis à vis de l'algèbre du groupe des rotations et de celle du groupe de quasi-spin, ce dernier étant un groupe $SO(2,1)$ qui apparaît dans la réduction du groupe dynamique de l'oscillateur harmonique. Il est également montré que cette algèbre est très étroitement liée à celle introduite par Armstrong. En fait, ces deux algèbres peuvent être rendues identiques : il suffit de définir, à la place de ceux utilisés dans l'annexe (II), des

opérateurs annihilation et création qui rendent compte de la dépendance temporelle des fonctions d'onde stationnaires. Avec les notations de l'annexe (II), cette dépendance s'écrit $e^{i(N+3/2)t}$ et les opérateurs annihilation et création sont alors :

$$b'q = e^{-it} b^q$$

$$b'q^+ = e^{it} b^{q^+}$$

Si on identifie alors \mathcal{K} avec l'opérateur $-i\partial_t$, l'algèbre de quasi-spin apparaît comme une réalisation d'algèbre de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$ par des opérateurs différentiels du premier ordre à deux variables (r et t) qui est identique (à une transformation $X' = U X U^{-1}$ près) à celle associée à l'équation factorisable, pourvu qu'on pose $\tau = 2t$ (τ étant la variable auxiliaire).

5.2.3 Problème de Kepler relativiste avec des charges magnétiques.

Assez récemment, l'utilisation de modèles comportant des monopoles magnétiques (cf. par exemple Barut 1971) et la recherche de l'existence de tels monopoles (Barut 1972) ont connu un regain d'actualité. Dans ce cadre, il est intéressant d'étudier le système exactement soluble (aussi bien dans le cas relativiste que dans le cas non relativiste) constitué par deux particules portant des charges électriques et magnétiques, dont l'une est supposée fixe. Par ailleurs l'étude de ce système illustre un point que nous avons souligné dans l'étude des réalisations de type A_1 de l'algèbre $\mathfrak{so}(3)$: la quantification du paramètre $\frac{d}{a}$.

L'étude relativiste de ce système est décrite dans l'annexe (III), où l'on a utilisé la méthode quaternionique pour séparer les variables en coordonnées sphériques. Les équations angulaires sont des équations factorisables de type A_1 et les réalisations de $\mathfrak{SO}(3)$ qui leur sont associées sont, si on identifie la variable auxiliaire τ avec la variable physique φ , étroitement liées à l'algèbre d'invariance du système, engendrée par les composantes de l'opérateur.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

où \vec{S} est l'opérateur de spin et où :

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{\pi} - (\mu/cr) \vec{r}$$

(avec les notations de l'annexe (II)). Une conséquence importante de ce résultat est que les fonctions d'onde angulaires sont des fonctions de base de représentations unitaires. Or nous avons vu (cf. tableau (4)) qu'on ne peut trouver de base de représentations unitaires de la réalisation A_1 que si $2\frac{d}{a}$ est entier et de même parité que 2μ (μ est ici le nombre quantique magnétique) ; cette condition conduit à la condition de quantification de Dirac :

$$e_1 g_2 - e_2 g_1 = p \text{ cr} \quad (p \text{ entier}) \quad .$$

Nous signalons aussi que les équations radiales peuvent être étudiées à l'aide d'une algèbre de Lie $\mathfrak{SO}(2,1)$: les résultats sont tout à fait analogues à ceux qu'on a obtenus pour l'atome d'hydrogène.

5.2.4 Electron de Landau relativiste.

Le problème d'un électron dans un champ magnétique, qui pourrait

par exemple servir de première approximation à une étude de l'effet Zeeman quadratique dans les spectres atomiques, est aussi un problème exactement soluble. Ce problème est traité, pour le cas relativiste, dans l'annexe (IV). Pour séparer les variables de l'équation de Dirac, en coordonnées cylindriques z, ρ, φ , nous utilisons la méthode quaternionique. Les équations radiales peuvent alors être factorisées de deux façons différentes (type C et type B) et l'on peut introduire les deux algèbres de Lie correspondantes (qui sont respectivement \mathfrak{f}_4 et $\mathfrak{SO}(2,1)$). La première est très directement liée (si l'on identifie la variable auxiliaire τ à la variable physique φ) à l'algèbre du groupe d'invariance du système, qui comprend les rotations autour de Oz et les translations. Cependant, c'est l'autre algèbre, qui contient pourtant une variable auxiliaire dépourvue de signification physique, qui conduit à la définition d'opérateurs tensoriels simples (tels que ρ^k); c'est donc cette dernière algèbre qui est la mieux adaptée pour étudier l'effet d'une perturbation sur le système.

5.3 Autres applications.

5.3.1 Atome d'hydrogène non relativiste : intégrales non diagonales en énergie.

Un exemple d'utilisation du calcul d'éléments de matrice d'opérateurs tensoriels entre fonctions de base de représentations de deux réalisations B différentes est fourni par l'atome d'hydrogène non relativiste, pour lequel on peut aussi calculer des intégrales

radiales non diagonales en énergie, qui ne peuvent pas être obtenues par utilisation du théorème de Wigner-Eckart.

Ce système a déjà été étudié, au moyen d'une réalisation d'algèbre de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$, par Armstrong (1970). L'équation factorisable de type B qui conduit à cette réalisation est obtenue indirectement à partir de l'équation radiale, qui est de type F. Ainsi, comme dans l'annexe (I), l'expression en fonction de r de la variable qui est utilisée dans la réalisation fait intervenir l'énergie. Ceci suggère d'ailleurs, comme nous l'avons mentionné dans le paragraphe 2.6.3, l'utilisation d'opérateurs dilatation (cf. Barut et Kleinert 1967), en vue d'obtenir une algèbre dont les fonctions de base de représentations soient les fonctions d'onde radiales elles-mêmes ; une telle algèbre a été utilisée par plusieurs auteurs (Armstrong 1971, Cunningham 1972b) qui ont également discuté son lien avec l'algèbre $\mathfrak{so}(2,1)$ apparaissant dans la réduction du groupe dynamique $SO(4,2)$ de l'atome d'hydrogène. Cependant l'introduction d'opérateurs dilatation présente surtout un intérêt formel. Comme le montrent ces auteurs, elle ne permet pas, en particulier, de calculer les intégrales non diagonales en énergie des opérateurs r^k .

Par une méthode analogue à celle exposée dans l'annexe (V), il est également possible de définir une réalisation de $\mathfrak{so}(2,1)$ dans laquelle la variable est directement liée à la variable r : dans ce cas ce sont les paramètres de la réalisation qui dépendent de l'énergie. Si, à partir de l'équation radiale, on effectue les changements de variable et de fonction définis par :

$$\begin{cases} r = e^x \\ R = e^{x/2} \varphi \end{cases}, \quad (5-3-1)$$

l'équation obtenue est identique à une équation factorisable du type B (cf. tableau (2)), avec $a=1$, $d=\sqrt{-E}$, $\mu=1/\sqrt{-E}$ et $\omega=(\ell+\frac{1}{2})^2$. Pour chaque valeur de E , les fonctions d'onde radiales sont liées à des fonctions de base des représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$ ($\mu_0=\ell+1$) de la réalisation correspondante ; μ est donc égal à $\ell+1+N$ (N entier ≥ 0), c'est-à-dire au nombre quantique principal n . On retrouve ainsi le résultat bien connu $E = -\frac{1}{n^2}$. D'autre part on a alors $d = \frac{1}{n}$: les fonctions d'onde radiales $R_{n\ell}$ correspondant à des valeurs de n différentes sont liées à des fonctions de base de représentations de réalisations différentes. Enfin, comme dans le cas relativiste, la condition de normalisation physique ne coïncide pas avec celle des vecteurs de base. On écrit finalement, en notant

$\Phi_{\mu_0}^\mu(x, \tau; \frac{d}{a}) = e^{i\mu\tau} \varphi_{\mu_0}^\mu(x; \frac{d}{a})$ les fonctions de base normées de la représentation $\uparrow_{\mu_0}^*$ de la réalisation caractérisée par le paramètre $\frac{d}{a}$:

$$R_{n\ell}(r) = C_{n\ell} e^{x/2} \varphi_{\ell+1}^n(x; \frac{1}{n}), \quad (5-3-2)$$

et l'on montre que :

$$\begin{aligned} C_{n\ell} &= (\Phi_{\ell+1}^n(\frac{1}{n}) | P_2^0 | \Phi_{\ell+1}^n(\frac{1}{n}))^{-\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{2} n^{-3/2} (2\ell+1)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5-3-3)$$

Les intégrales radiales non diagonales en énergie des opérateurs r^k s'écrivent donc :

$$\begin{aligned}
& \int_0^{+\infty} R_{n\ell}(r) R_{n'\ell'}(r) r^k dr \\
&= C_{n\ell} C_{n'\ell'} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{\ell+1}^n(x; \frac{1}{n}) \varphi_{\ell'+1}^{n'}(x; \frac{1}{n'}) e^{(k+2)x} dx \\
&= C_{n\ell} C_{n'\ell'} (\Phi_{\ell+1}^n(\frac{1}{n}) | P_{k+2}^{n-n'} | \Phi_{\ell'+1}^{n'}(\frac{1}{n'})) , \quad (5-3-4)
\end{aligned}$$

et l'élément de matrice précédent peut être calculé par utilisation de l'expression (4-5-5) ; le résultat est identique à celui obtenu, grâce à la méthode de factorisation, par Badawi, Bessis, Bessis et Hadinger (1973).

5.3.2 Atome d'hydrogène non relativiste : coordonnées paraboliques.

L'équation de Schrödinger de l'atome d'hydrogène est également séparable en coordonnées paraboliques ; celles-ci sont définies (Morse et Feschbach 1953) par :

$$\begin{aligned}
x &= \xi_1 \xi_2 \cos \varphi \\
y &= \xi_1 \xi_2 \sin \varphi \\
z &= (\xi_1^2 - \xi_2^2) / 2 .
\end{aligned} \quad (5-3-5)$$

La fonction d'onde s'écrit alors :

$$\psi(\vec{r}) = e^{im\varphi} X_1(\xi_1) X_2(\xi_2)$$

et les équations séparées correspondant aux variables ξ_1 et ξ_2 sont des équations factorisables du type C , qui peuvent être transformées, en posant :

$$\xi_i = e^{x_i/2} \quad \text{et} \quad X_i(\xi_i) = \varphi_i(x_i) \quad (i=1,2) , \quad (5-3-6)$$

en équations factorisables du type B (cf. tableau (2)), avec $a=1$,
 $d = \frac{\sqrt{-E}}{2}$, $\omega = \frac{m^2-1}{4}$, $\mu_1 = \frac{E_2+4Z_1}{4}$, $\mu_2 = \frac{-E_2+4Z_2}{4}$, (où E_2 est une cons-
tante de séparation et où Z_1 et Z_2 sont tels que $Z_1+Z_2 = 1$).

Les fonctions $\varphi_1(x_1)$ et $\varphi_2(x_2)$ sont, pour chaque valeur de l'éner-
gie, associées à des fonctions de base de représentations $\uparrow \mu_0^*$

($\mu_0 = \frac{|m|+1}{2}$) des deux réalisations correspondantes. On a donc

$\mu_1 = \mu_0 + p_1$ et $\mu_2 = \mu_0 + p_2$, où p_1 et p_2 sont des entiers ≥ 0 .

On en déduit que

$$E = \frac{-1}{(|m|+p_1+p_2+1)^2}, \quad (5-3-7)$$

ce qui permet d'identifier le nombre quantique principal, n , avec
 $|m|+p_1+p_2+1$, et on a alors $d = \frac{1}{2n}$. Finalement les fonctions d'onde
sont caractérisées par m , p_1 et p_2 ; si l'on utilise la même no-
tation que dans le paragraphe précédent, on écrit :

$$X_i(\xi_i) = c_i \varphi_{\mu_0}^{\mu_0+p_i}(x_i; \frac{1}{2n}) \quad (i=1,2) \quad (5-3-8)$$

$$\text{où } c_1 c_2 = [\sqrt{2}|m|n^2]^{-1}.$$

Pour chaque valeur de n , on couple alors les deux réalisations,
 R_1 et R_2 (correspondant respectivement aux deux variables x_1 et x_2
et à la même variable τ), en utilisant les résultats du paragraphe
3.5.2. Les opérateurs de la réalisation couplée R sont :

$$\begin{cases} J_3 = -i\partial_\tau \\ J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\partial_{x_1} + \partial_{x_2} \mp \frac{1}{2n} (e^{x_1} + e^{x_2}) \pm (-i\partial_\tau \pm 1) \right]. \end{cases} \quad (5-3-9)$$

Si l'on effectue le changement de variables :

$$\begin{cases} e^x = (e^{x_1} + e^{x_2}) / 2 \\ \cot g^2 \frac{y}{2} = e^{x_1 - x_2} \end{cases}, \quad (5-3-10)$$

les nouvelles variables indépendantes x et y sont liées aux coordonnées sphériques r et θ par $e^x = r$ et $y = \theta$. La réalisation R ne dépend alors que de x et de τ ; on a en effet :

$$J_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left[\partial_x - \frac{1}{n} e^x \pm (-i\partial_{\tau} \pm 1) \right], \quad (5-3-11)$$

et, si l'on note \bar{J}_{α} les opérateurs de base de la réalisation introduite pour les fonctions d'onde radiales (cf. paragraphe précédent), qu'on note ici \bar{R} ; on peut écrire :

$$\bar{J}_{\alpha} = T^{-1} J_{\alpha} T \quad (\alpha=3, +, -), \quad (5-3-12)$$

où la transformation T est celle définie dans le paragraphe 3.5.2, soit :

$$T = e^{-x_1/4} e^{-x_2/4} = [e^x \sin \theta]^{-1/2}. \quad (5-3-13)$$

D'après les résultats de ce paragraphe, les fonctions définies par

$$\begin{aligned} \Phi_{\mu_0 \mu_0 \bar{\mu}_0}^{\bar{\mu}}(x_1, x_2, \tau) &= \sum_{\mu_1, \mu_2} (\mu_0 \mu_1 \mu_0 \mu_2 | \bar{\mu}_0 \bar{\mu}) \\ &\Phi_{\mu_0}^{\mu_1}(x_1, \tau) \Phi_{\mu_0}^{\mu_2}(x_2, \tau) \end{aligned} \quad (5-3-14)$$

sont fonctions de base de représentations de R ; de plus, les fonctions déduites de celles-ci (à une constante de normalisation près, qui ne dépend que de μ_0 et $\bar{\mu}_0$) par

$$\bar{\Phi} = T^{-1} \Phi$$

sont des fonctions de base orthonormées de représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$ de \bar{R} . Comme les opérateurs de \bar{R} ne dépendent pas de θ , on peut écrire ces fonctions

$$\Phi_{\mu_0 \mu_0 \mu_0}^{\mu} (x_1, x_2, \tau) = \Phi_{\mu_0}^{\bar{\mu}} (x, \tau) F_{\mu_0 \mu_0}^{\bar{\mu}} (\theta) , \quad (5-3-16)$$

où $\Phi_{\mu_0}^{\bar{\mu}} (x, \tau)$ est une fonction de base normée de la représentation $\uparrow_{\mu_0}^*$ de \bar{R} et F une fonction a priori inconnue. On peut trouver l'équation différentielle dont elle est solution en utilisant l'expression en coordonnées x , θ et τ des opérateurs de Casimir Ω_1 , Ω_2 et Ω des réalisations R_1 , R_2 et R ; on obtient ainsi, après utilisation de la transformation (5-3-12) :

$$\bar{\Omega} = \frac{1}{\cos^2 \frac{\theta}{2}} \bar{\Omega}_1 + \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \bar{\Omega}_2 - \partial_{\theta}^2 + \frac{3}{4 \sin^2 \theta} - \frac{1}{4} - \frac{2}{n} e^{x(-i\partial_{\tau})} . \quad (5-3-17)$$

L'action de Ω_1 et Ω_2 sur la fonction $\Phi_{\mu_0 \mu_0 \mu_0}^{\bar{\mu}}$ peut être déduite de celle de ces opérateurs sur les fonctions $\Phi_{\mu_0}^{\mu_1} \Phi_{\mu_0}^{\mu_2}$ du développement (5-3-14); cette dernière donne, par exemple :

$$\Omega_1 (\Phi_{\mu_0}^{\mu_1} \Phi_{\mu_0}^{\mu_2}) = (\Omega_1 \Phi_{\mu_0}^{\mu_1}) \Phi_{\mu_0}^{\mu_2} + \frac{2}{n} e^x \cos^2 \frac{\theta}{2} (-i\partial_{\tau}) \Phi_{\mu_0}^{\mu_1} \Phi_{\mu_0}^{\mu_2} . \quad (5-3-18)$$

Finalement, on trouve que :

$$\left[\frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{4(\mu_0 - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} + (\bar{\mu}_0 - \frac{1}{2})^2 \right] F_{\mu_0 \mu_0}^{\bar{\mu}} (\theta) = 0 . \quad (5-3-19)$$

F peut donc être exprimé à l'aide d'un polynôme de Legendre :

$$F_{\mu_0 \mu_0}^{\bar{\mu}} (\theta) \propto \sin \theta^{-\frac{1}{2}} P_{\bar{\mu}_0 - 1, 2\mu_0 - 1} (\cos \theta) , \quad \text{et :}$$

$$\Phi_{\mu_0 \mu_0 \mu_0}^{\bar{\mu}} (x_1, x_2, \tau) \propto e^{-x/2} \Phi_{\mu_0}^{\bar{\mu}} (x, \tau) P_{\bar{\mu}_0 - 1, 2\mu_0 - 1} (\cos \theta) . \quad (5-3-20)$$

$\bar{\mu}_0$ est donc identique à $\ell+1$ et $\bar{\mu}$ à n . On a finalement, en utilisant l'équation (5-3-2) :

$$\Phi_{\mu_0 \mu_0 \mu_0}^{\bar{\mu}}(x_1, x_2, \tau) \propto e^{in\tau} R_{n\ell}(r) P_{\ell|m}|(\cos \theta) .$$

Si l'on multiplie la relation (5-3-14) par $e^{im\varphi}$, elle apparaît comme le développement des fonctions d'onde en coordonnées sphériques sur celles en coordonnées paraboliques, que nous écrivons :

$$|n \ell m\rangle = \sum_{p_1, p_2} \left(\frac{|m|+1}{2} \frac{|m|+1}{2} + p_1 \frac{|m|+1}{2} \frac{|m|+1}{2} + p_2 |\ell+1 n\rangle \right) |p_1 p_2 m\rangle ;$$

(5-3-21)

il est en effet clair que, les deux bases de fonctions d'onde étant orthonormées, il n'y a aucun facteur de normalisation à introduire si l'on suppose que les coefficients de Clebsch-Gordan vérifient les relations d'orthonormalité.

5.3.3 Electron dans un potentiel de Hulthén.

Afin de présenter un exemple physique dans lequel les fonctions d'onde sont liées à des fonctions de base de représentations "partiellement" unitaires (cf. paragraphe 3.4.3), nous montrons qu'on peut retrouver les résultats de Dunlap et Armstrong (1972) sur un électron dans un potentiel de Hulthén.* L'intérêt de ce potentiel vient de ce qu'il conduit, pour $\ell=0$, à une équation exactement soluble et qu'il constitue une approximation du potentiel de Yukawa.

L'équation radiale (en coordonnées sphériques) correspondant à $\ell=0$ peut être transformée en une équation factorisable de type A_2 , à laquelle on associe une réalisation de $\mathcal{H}(2,1)$ qui est différente

* de la forme : $V(r) = -e^2 [\alpha e^{-\alpha r} / (1 - e^{-\alpha r})]$.

pour chaque valeur de l'énergie (cette réalisation est identique à celle de Dunlap et Armstrong à un changement de variable et de fonction près). Il ne s'agit pas d'une algèbre d'invariance ni d'une sous-algèbre d'un groupe dynamique. En utilisant les résultats donnés dans le tableau (5), on trouve finalement que les fonctions de base normées associées aux fonctions radiales $R_{n\delta}(r)$ appartiennent à la représentation "partiellement" unitaire $\uparrow 1$ d'une réalisation A_2 où $a=1$ et $d = \frac{-2}{\delta n}$ (δ est le paramètre utilisé par Dunlap et Armstrong) ; la condition pour qu'elles soient normalisables est

$$\mu < -\frac{d}{a} + 1$$

soit ici

$$n < -\frac{2}{\delta n} + 1 \quad .$$

5.3.4 Intégrales à deux corps : intégrales de Slater et de Marvin hydrogéoïdes.

Bien que l'utilisation de l'algèbre $\mathcal{SO}(2,1)$ dans l'étude des fonctions d'onde radiales des atomes hydrogéoïdes ait déjà donné lieu à de nombreux travaux, ceux-ci ne concernaient que des intégrales monoélectroniques. Nous montrons dans ce paragraphe que les algèbres $\mathcal{SO}(2,1)$ introduites pour les réalisations de type B peuvent permettre de calculer des intégrales à deux corps dont les opérateurs ont des propriétés tensorielles vis à vis de l'algèbre qui résulte du couplage (défini comme dans le paragraphe 3.5.2) des réalisations associées aux deux particules. Nous appliquons ensuite de résultat aux intégrales de Slater (1929) et de Marvin (1947) qui caractérisent les

interactions électrostatiques et magnétiques des électrons d'un atome; bien entendu le calcul est mené avec des fonctions radiales hydrogénoïdes et les résultats obtenus ne pourraient être appliqués que dans le cadre d'une théorie à champ central coulombien (modèle de Layzer (1959) par exemple).

Nous utilisons les résultats et les notations du paragraphe 3.5.2. Soit un élément de matrice (défini avec le produit scalaire (3-5-17)) de la forme :

$$M = \left(\begin{array}{cc} \mu_1 & \mu_2 \\ \mu_{01} & \mu_{02} \end{array} \middle| e^{i(\mu_1 + \mu_2 - \mu'_1 - \mu'_2)\tau} S \middle| \begin{array}{cc} \mu'_1 & \mu'_2 \\ \mu'_{01} & \mu'_{02} \end{array} \right), \quad (5-3-22)$$

où δ est une fonction des variables x_1 et x_2 . Un tel élément de matrice est égal à l'intégrale à deux corps :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \varphi_{\mu_{01}}^{\mu_1}(x_1) \varphi_{\mu_{02}}^{\mu_2}(x_2) S \varphi_{\mu'_{01}}^{\mu'_1}(x_1) \varphi_{\mu'_{02}}^{\mu'_2}(x_2). \quad (5-3-23)$$

En utilisant le développement (3-5-19) des produits de fonctions non couplées sur les fonctions couplées, on écrit :

$$M = \sum_{\mu_0, \mu, \mu'_0, \mu'} (\mu_{01} \mu_1 \mu_{02} \mu_2 | \mu_0 \mu) (\mu'_{01} \mu'_1 \mu'_{02} \mu'_2 | \mu'_0 \mu') \\ \left(\begin{array}{cc} \mu & \\ \mu_{01} \mu_{02} \mu_0 \end{array} \middle| e^{i(\mu - \mu')\tau} S \middle| \begin{array}{cc} \mu' & \\ \mu'_{01} \mu'_{02} \mu'_0 \end{array} \right). \quad (5-3-24)$$

Nous avons montré que les fonctions déduites de $\Phi_{\mu_{01} \mu_{02} \mu_0}^{\mu}$ par la transformation $\bar{\Phi} = T^{-1} \Phi$ forment, pourvu qu'on norme une des fonctions, une base orthonormée de la représentation $\uparrow_{\mu_0}^*$ de la réalisation \bar{R} , définie à partir de la représentation couplée par :

$$\bar{J}_\alpha = T^{-1} J_\alpha T \quad (\alpha=3, + \text{ ou } -) .$$

On peut écrire les éléments de matrice de l'équation (5-3-24) sous la forme :

$$(\bar{\Phi}_{\mu_0 \mu_1 \mu_2 \mu_0}^\mu | e^{i(\mu-\mu')\tau} T^2 S | \bar{\Phi}_{\mu'_0 \mu'_1 \mu'_2 \mu'_0}^{\mu'}) . \quad (5-3-25)$$

Si l'opérateur $e^{i(\mu-\mu')\tau} T^2 S$ est un opérateur tensoriel de la réalisation \bar{R} , on peut exprimer (5-3-25), à partir d'une équation du type (4-4-12), en fonction de :

$$(\bar{\Phi}_{\mu_0 \mu_1 \mu_2 \mu_0}^{\mu_0} | e^{i(\mu_0-\mu'_0)\tau} T^2 S | \bar{\Phi}_{\mu'_0 \mu'_1 \mu'_2 \mu'_0}^{\mu'})$$

$$\text{ou } (\Phi_{\mu_0 \mu_1 \mu_2 \mu_0}^{\mu_0} | e^{i(\mu_0-\mu'_0)\tau} S | \Phi_{\mu'_0 \mu'_1 \mu'_2 \mu'_0}^{\mu'}) . \quad (5-3-26)$$

Dans les cas physiques considérés, cet élément de matrice n'est pas simple à calculer directement. Il est préférable d'utiliser le fait que $\Phi_{\mu_0 \mu_1 \mu_2 \mu_0}^{\mu_0}$ peut être exprimée comme une somme de produits de fonctions non couplées qui sont toutes de μ minimal ; plus précisément, on montre que :

$$\begin{aligned} \Phi_{\mu_0 \mu_1 \mu_2 \mu_0}^{\mu_0}(x_1, x_2, \tau) &= \sum_{\bar{\mu}_1, \bar{\mu}_2} (\mu_0 \bar{\mu}_1 \mu_0 \bar{\mu}_2 | \mu_0 \mu_0) \\ &\times \left[\frac{(2\mu_0 - 1)(2\mu_0 - 1) \Gamma(2\bar{\mu}_1 - 1) \Gamma(2\bar{\mu}_2 - 1)}{(\bar{\mu}_1 - \mu_0)! (\bar{\mu}_2 - \mu_0)! \Gamma(\bar{\mu}_1 + \mu_0) \Gamma(\bar{\mu}_2 + \mu_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \Phi_{\bar{\mu}_1}^{\bar{\mu}_1}(x_1, \tau) \Phi_{\bar{\mu}_2}^{\bar{\mu}_2}(x_2, \tau) . \end{aligned} \quad (5-3-27)$$

Les éléments de matrice à calculer sont finalement de la forme :

$$\begin{pmatrix} \bar{\mu}_1 & \bar{\mu}_2 \\ \Phi_{\bar{\mu}_1} & \Phi_{\bar{\mu}_2} \end{pmatrix} | e^{i(\bar{\mu}_1 + \bar{\mu}_2 - \bar{\mu}'_1 - \bar{\mu}'_2)\tau} S | \begin{pmatrix} \bar{\mu}'_1 & \bar{\mu}'_2 \\ \Phi_{\bar{\mu}'_1} & \Phi_{\bar{\mu}'_2} \end{pmatrix}, \quad (5-3-28)$$

c'est-à-dire que le problème se réduit au calcul d'intégrales qui sont analogues à l'intégrale de départ mais qui ne comportent que des fonctions de μ minimal et ont une forme très simple.

Cette méthode peut être appliquée aux intégrales de Slater ou de Marvin hydrogéoïdes. Celles-ci s'écrivent :

$$\begin{aligned} R_a^k(n_1, \ell_1, n_2, \ell_2; n'_1, \ell'_1, n'_2, \ell'_2) \\ = \int_0^{+\infty} dr_1 \int_0^{+\infty} dr_2 R_{n_1, \ell_1}(r_1) R_{n_2, \ell_2}(r_2) \frac{r_1^k}{r_1^{k+a}} R_{n'_1, \ell'_1}(r_1) R_{n'_2, \ell'_2}(r_2), \end{aligned} \quad (5-3-29)$$

où a est respectivement égal à 1 et à 3 pour les intégrales de Slater et de Marvin.

Nous rappelons (cf. paragraphe 5.2.1) que les fonctions d'onde radiales $R_{n\ell}(r)$ des atomes hydrogéoïdes sont liées aux fonctions de base $\Phi_{\ell+1}^n(x, \tau; \frac{Z}{n}) = e^{in\tau} \varphi_{\ell+1}^n(x; \frac{Z}{n})$ des représentations $\uparrow_{\ell+1}^*$ des réalisations B où $q = \frac{Z}{n}$ par :

$$R_{n\ell}(r) = C_{n\ell} e^{x/2} \varphi_{\ell+1}^n(x; \frac{Z}{n}) \quad (5-3-30)$$

avec
$$\begin{cases} r = e^x \\ C_{n\ell} = Z \sqrt{2} n^{-3/2} (2\ell+1)^{-1/2} \end{cases} .$$

Pour utiliser directement les résultats ci-dessus, il est donc nécessaire d'avoir $n_1 = n'_1$ et $n_2 = n'_2$ (c'est-à-dire une seule

valeur de q_1 et de q_2) ; dans ce cas l'intégrale (5-3-29) s'écrit :

$$R_a^k(n_1, \ell_1, n_2, \ell_2; n_1, \ell'_1, n_2, \ell'_2) = C_{n_1, \ell_1} C_{n_2, \ell_2} C_{n_1, \ell'_1} C_{n_2, \ell'_2} \\ \times (\Phi_{\ell_1+1}^{n_1} \Phi_{\ell_2+1}^{n_2} | S_{ka} | \Phi_{\ell'_1+1}^{n_1} \Phi_{\ell'_2+1}^{n_2}) , \quad (5-3-31)$$

$$\text{où } S_{ka} = e^{(k+2)x_{<}} e^{-(k+a-2)x_{>}} . \quad (5-3-32)$$

On montre facilement que $T^2 S_{ka}$ est un opérateur tensoriel vis à vis de la réalisation \bar{R} ; ses relations de commutation avec les opérateurs de celle-ci sont celles d'un opérateur P_k^m avec $k=3-a$ et $m=0$. Pour évaluer les éléments de matrice analogues à (5-3-28), on effectue une intégration directe. En effet :

$$\Phi_{\mu_0}^{\mu_0}(x, \tau; q) = \Gamma(2\mu_0-1)^{\frac{1}{2}} e^{i\mu_0\tau} \exp(-q e^x) (2q e^x)^{\mu_0-\frac{1}{2}} . \quad (5-3-33)$$

Ainsi :

$$(\Phi_{\mu_1}^{\bar{\mu}_1} \Phi_{\mu_2}^{\bar{\mu}_2} | e^{i(\bar{\mu}_1+\bar{\mu}_2-\bar{\mu}'_1-\bar{\mu}'_2)\tau} S_{ka} | \Phi_{\mu'_1}^{\bar{\mu}'_1} \Phi_{\mu'_2}^{\bar{\mu}'_2}) \\ = [\Gamma(2\bar{\mu}_1-1) \Gamma(2\bar{\mu}_2-1) \Gamma(\bar{\mu}'_1-1) \Gamma(\bar{\mu}'_2-1)]^{\frac{1}{2}} \\ \times \left(\frac{2Z}{n_1}\right)^{\bar{\mu}_1+\bar{\mu}'_1-1} \left(\frac{2Z}{n_2}\right)^{\bar{\mu}_2+\bar{\mu}'_2-1} \\ \times \int_0^{+\infty} dr_1 \int_0^{+\infty} dr_2 e^{-2Zr_1/n_1} r_1^{\bar{\mu}_1+\bar{\mu}'_1-2} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+a}} \\ \times e^{-2Zr_2/n_2} r_2^{\bar{\mu}_2+\bar{\mu}'_2-2} . \quad (5-3-34)$$

Cette expression contient une intégrale analogue à celle qui apparaît dans une intégrale de Slater ou de Marvin où toutes les fonctions sont telles que $l=n-1$. Cette intégrale se déduit directement de l'équation :

$$\iint_{r_2 > r_1} dr_1 dr_2 r_1^{n_1-1} e^{-\beta_1 r_1} r_2^{n_2-1} e^{-\beta_2 r_2}$$

$$= \sum_{S=0, n_2} \frac{n_2! (n_1+n_2-S)!}{(n_2-S)! \beta_2^{S+1} (\beta_1+\beta_2)^{n_1+n_2-S+1}} \quad (5-3-35)$$

Signalons aussi qu'il est possible d'étendre ce principe de calcul au cas général ($n_1 \neq n'_1$ et $n_2 \neq n'_2$). Dans ce cas les réalisations couplées R et R' correspondant respectivement au bra et au ket sont différentes. Les différences entre leurs opérateurs de déplacement s'écrivent :

$$J_{\pm} - J'_{\pm} = e^{\pm i\tau} \left[\mp \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n'_1} \right) e^{x_1} \mp \left(\frac{1}{n_2} - \frac{1}{n'_2} \right) e^{x_2} \right] \quad (5-3-36)$$

Ces opérateurs sont des opérateurs tensoriels vis à vis de R et R' et on peut mener des calculs analogues à ceux du paragraphe 4.5 et de l'appendice 4 pour évaluer l'élément de matrice (5-3-25) ; on obtient une expression analogue à (4-5-4). Toutefois de tels cas deviennent rapidement extrêmement compliqués.

Il faut remarquer enfin que ce traitement ne fournit pas une interprétation des égalités observées dans un calcul numérique des intégrales de Slater hydrogéoïdes (Butler, Minchin et Wybourne 1971) : ces égalités apparaissent comme dues essentiellement à des relations entre les éléments de matrice du type (5-3-28) .

5.4 Conclusions et perspectives.

Lorsque nous avons entrepris ce travail, l'étude d'Armstrong (1970) sur les fonctions d'onde radiales de l'atome d'hydrogène utilisant une algèbre de Lie $\mathfrak{so}(2,1)$ apparaissait comme un cas isolé. Nous avons montré que cette approche est susceptible d'une généralisation et peut finalement, grâce au lien entre la méthode de factorisation et la théorie des groupes, être appliquée à tous les systèmes quantiques exactement solubles. Les problèmes physiques dont une première approximation est fournie par de tels systèmes peuvent ainsi être étudiés avec la simplicité et l'élégance caractéristiques de la théorie des groupes.

Dans l'étude d'Armstrong apparaissait une difficulté qui a été aussi rencontrée par d'autres auteurs : l'impossibilité de calculer les intégrales radiales hydrogénoïdes non diagonales en énergie. Nous avons montré que, pour l'atome d'hydrogène et pour de nombreux cas analogues, la difficulté peut être résolue par une extension des techniques de calcul utilisées pour les intégrales diagonales. Par ailleurs, toutes les études sur l'atome d'hydrogène ne concernaient que des intégrales monoélectroniques. En introduisant une définition convenable du couplage de réalisations d'algèbres de Lie, nous avons pu exploiter les propriétés de symétrie des fonctions d'onde radiales dans le calcul de certaines intégrales à deux corps telles que les intégrales de Slater ou de Marvin hydrogénoïdes.

Le domaine d'application de la méthode décrite ici est vaste : en effet, si le nombre d'équations-type est restreint, les applications physiques correspondant à chaque équation sont nombreuses et variées ; on en rencontre dans tous les domaines de la physique, chaque fois que l'on cherche une approximation simple, c'est-à-dire exactement soluble, d'un système complexe. Nous n'avons étudié dans ce chapitre qu'un petit nombre d'exemples. Il est possible de développer certaines de ces études et, bien entendu, d'en entreprendre de nouvelles. Ainsi, à partir des résultats concernant les atomes hydrogénoïdes, nous pourrions généraliser l'utilisation de la méthode présentée ici dans l'étude de la structure atomique, par exemple en l'introduisant dans une approche comme celle de Layzer (1959) ; d'autres applications pourraient être trouvées dans le cadre de la théorie des interactions matière-rayonnement : citons par exemple les divers systèmes exactement solubles qui apparaissent dans l'étude de l'atome habillé par des photons de radiofréquence (Haroche 1971). De façon générale, les possibilités d'une telle méthode sont liées au rôle des fonctions spéciales en physique et elles sont loin d'être épuisées.

APPENDICE 1

BASES ORTHONORMEES DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES UNITAIRES DES DIFFERENTES REALISATIONS D'ALGEBRES DE LIE ETUDIEES.

1. Algèbre de Lie réelle $so(3)$.

Les représentations irréductibles unitaires de cette algèbre abstraite sont (tableau (3)) les représentations de dimension finie $D^{\mu_0^*}$. Les éléments de matrice de J_+ et J_- sur une base orthonormée sont :

$$\alpha_{\pm}^{\mu} = \sqrt{(\mu_0 + \mu)(\mu_0 - \mu + 1)} \quad . \quad (A-1-1)$$

La seule réalisation du tableau (2) associée à cette algèbre réelle est la réalisation A_1 .

Pour simplifier les notations, nous posons:

$$\begin{cases} z = a(x+p) \\ \frac{d}{a} = q \end{cases}$$

L'équation associée à la réalisation (cf. paragraphe 2.5.1) a comme points singuliers $z = k \pi$ (k entier) et nous choisissons comme domaine pour z l'intervalle $]0, \pi[$.

L'équation est de plus invariante dans les échanges suivants :

$$\begin{cases} \mu \rightarrow -\mu \\ q \rightarrow -q \end{cases} , \quad (\text{A-1-2})$$

$$\text{et } \begin{cases} \mu \rightarrow q \\ q \rightarrow \mu \end{cases} . \quad (\text{A-1-3})$$

L'équation différentielle du premier ordre dont la solution permet d'obtenir la fonction de base associée à la valeur propre μ_0 de J_3 est :

$$\left[-\frac{d}{dz} + (\mu_0 + \frac{1}{2}) \cotg z + \frac{q}{\sin z} \right] \varphi^{\mu_0}(x) = 0$$

La fonction de base correspondante, qui est normée si $\mu_0 + q + 1 > 0$ et $\mu_0 - q + 1 > 0$, est :

$$\Phi^{\mu_0}(x, \tau) = e^{i\mu_0 \tau} \left[\frac{|a| \Gamma(2\mu_0 + 2)}{\Gamma(\mu_0 + q + 1) \Gamma(\mu_0 - q + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\sin \frac{z}{2} \right)^{\mu_0 + q + \frac{1}{2}} \left(\cos \frac{z}{2} \right)^{\mu_0 - q + \frac{1}{2}} . \quad (\text{A-1-4})$$

Cette fonction et celles qu'on en déduit par les relations (3-4-3) avec les valeurs de α_{\pm}^{μ} données par les équations (A-1-1) forment une base orthonormée de la représentation $D^{\mu_0^*}$ si d'une part la condition d'irréductibilité (3-4-7) est vérifiée et si d'autre part toutes les fonctions s'annulent pour $z=0$ et $z=\pi$. On trouve que la condition d'irréductibilité et la condition d'unitarité conduisent aux mêmes résultats (ce qui n'est pas surprenant puisque $\mathfrak{so}(3)$ est l'algèbre d'un groupe de Lie compact : il est bien connu que dans ce cas toute représentation irréductible est équivalente à une représentation

unitaire et toute représentation unitaire est complètement réductible).

On obtient les conditions :

$$\begin{cases} 2q \text{ entier} \\ \mu_0 - |q| \text{ entier} \geq 0 \end{cases} \quad (\text{A-1-5})$$

Les fonctions de base peuvent être exprimées à l'aide de fonctions hypergéométriques ; on a, si $\mu+q \geq 0$:

$$\begin{aligned} \Phi^\mu(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a|(2\mu_0+1)(\mu_0+q)(\mu_0+\mu)!}{(\mu_0-q)(\mu_0-\mu)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(\mu+q)!} \\ &\times \left(\sin \frac{z}{2} \right)^{\mu+q+\frac{1}{2}} \left(\cos \frac{z}{2} \right)^{\mu-q+\frac{1}{2}} F(\mu-\mu_0, \mu+\mu_0+1; \mu+q+1; \sin^2 \frac{z}{2}), \end{aligned} \quad (\text{A-1-6})$$

et si $\mu+q < 0$:

$$\begin{aligned} \Phi^\mu(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a|(2\mu_0+1)(\mu_0-q)(\mu_0-\mu)!}{(\mu_0+q)(\mu_0+\mu)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(-\mu-q)!} \\ &\times \left(\sin \frac{z}{2} \right)^{-\mu-q+\frac{1}{2}} \left(\cos \frac{z}{2} \right)^{-\mu+q+\frac{1}{2}} F(-\mu-\mu_0, -\mu+\mu_0+1; -\mu-q+1; \sin^2 \frac{z}{2}). \end{aligned} \quad (\text{A-1-7})$$

Dans tous les cas, le premier indice de la fonction hypergéométrique est un entier négatif ou nul et cette fonction se réduit à un polynôme.

2. Algèbre de Lie réelle $so(2,1)$.

Les représentations irréductibles unitaires de l'algèbre abstraite $so(2,1)$ sont les représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$, $\downarrow_{\mu_0}^*$, $D_p(E_0, \Phi)^*$ et $D_s(E_0, \Phi)^*$ (cf. tableau (3)). Les éléments de matrice de J_+ et J_-

sur des bases orthonormées de ces représentations sont :

$$\alpha_{\pm}^{\mu} = \pm \sqrt{(\mu - \mu_0)(\mu + \mu_0 - 1)} \quad , \quad \text{pour } \uparrow \mu_0^* \quad , \quad (\text{A-1-8})$$

$$\alpha_{\pm}^{\mu} = \pm \sqrt{(\mu + \mu_0)(\mu - \mu_0 - 1)} \quad , \quad \text{pour } \downarrow \mu_0^* \quad , \quad (\text{A-1-9})$$

$$\alpha_{\pm}^{\mu} = \pm \left| \mu - \frac{1}{2} + i \sigma \right| \quad , \quad \text{pour } D_p(E_0, \Phi)^* \quad , \quad (\text{A-1-10})$$

$$\alpha_{\pm}^{\mu} = \pm \sqrt{(\mu + \Phi)(\mu - \Phi - 1)} \quad , \quad \text{pour } D_s(E_0, \Phi)^* \quad (\text{A-1-11})$$

(pour les représentations principales on a posé $\Phi + \frac{1}{2} = i \sigma$, avec σ réel).

Trois réalisations du tableau (2) sont associées à cette algèbre réelle : A_2 , A_3 et B .

a) Réalisation A_2 .

Les opérateurs de cette réalisation et l'équation associée sont donnés dans le paragraphe 2.5.1 . Nous posons ici :

$$\begin{cases} a'(x+p) = z \\ \frac{d'}{a'} = q \end{cases} .$$

L'équation a comme point singulier $z=0$, et nous prenons comme domaine de z l'intervalle $]0, +\infty[$; l'équation est invariante dans les changements (A-1-2) et (A-1-3).

Pour les représentations $\uparrow \mu_0^*$, la fonction de base $\Phi^{\mu_0}(x, \tau)$ est obtenue à partir de la solution de :

$$\left[\frac{d}{dz} + (\mu_0 - \frac{1}{2}) \coth z + \frac{q}{\text{sh } z} \right] \varphi^{\mu_0}(x) = 0 \quad ;$$

elle s'écrit :

$$\Phi^{\mu_0}(x, \tau) = e^{i\mu_0\tau} \left[\frac{|a'| \Gamma(\mu_0 - q)}{\Gamma(-\mu_0 - q + 1) \Gamma(2\mu_0 - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\operatorname{sh} \frac{z}{2} \right)^{-\mu_0 - q + \frac{1}{2}} \left(\operatorname{ch} \frac{z}{2} \right)^{-\mu_0 + q + \frac{1}{2}},$$

(A-1-12)

et elle est normée si $\mu_0 + q - 1 < 0$ et si $\mu_0 - \frac{1}{2} > 0$.

En utilisant les relations (3-4-3) avec les valeurs de α_{\pm}^{μ} données par (A-1-8), on obtient une base orthonormée de la représentation $\uparrow \mu_0^*$ à condition que :

$$\begin{cases} \mu_0 + q \text{ entier} \leq 0 \\ \mu_0 - \frac{1}{2} > 0 \end{cases},$$

(A-1-13)

ce qui implique $q < -\frac{1}{2}$.

Les fonctions de base peuvent être écrites à l'aide de fonctions hypergéométriques. On a, si $\mu + q \leq 0$:

$$\begin{aligned} \Phi^{\mu}(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a'| \Gamma(\mu_0 - q) (-\mu_0 - q)! (2\mu_0 - 1)}{\Gamma(\mu_0 + \mu) (\mu - \mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{\mu - \mu_0}}{(-\mu - q)!} \\ &\times \left(\operatorname{sh} \frac{z}{2} \right)^{-\mu - q + \frac{1}{2}} \left(\operatorname{ch} \frac{z}{2} \right)^{\mu + q - 2\mu_0 + \frac{1}{2}} F(\mu_0 - \mu, \mu_0 - q; -\mu - q + 1; \operatorname{th}^2 \frac{z}{2}), \end{aligned}$$

(A-1-14)

et si $\mu + q \geq 0$:

$$\begin{aligned} \Phi^{\mu}(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a'| \Gamma(\mu_0 + \mu) (\mu - \mu_0)! (2\mu_0 - 1)}{\Gamma(\mu_0 - q) (-\mu_0 - q)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{-q - \mu_0}}{(\mu + q)!} \\ &\times \left(\operatorname{sh} \frac{z}{2} \right)^{\mu + q + \frac{1}{2}} \left(\operatorname{ch} \frac{z}{2} \right)^{-\mu - q - 2\mu_0 + \frac{1}{2}} F(\mu_0 + \mu, \mu_0 + q; \mu + q + 1; \operatorname{th}^2 \frac{z}{2}). \end{aligned}$$

(A-1-15)

Dans les deux cas, la fonction hypergéométrique a un indice entier ≤ 0 (soit $\mu_0 - \mu$, soit $\mu_0 + q$) et elle se réduit à un polynôme.

Pour les représentations $\downarrow\mu_0^*$, tous les résultats se déduisent des précédents. A partir de l'invariance de l'équation factorisable A_2 dans les échanges (A-1-2), on montre que les fonctions de base orthonormées d'une représentation $\downarrow\mu_0^*$ s'écrivent :

$$\Phi^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \bar{\varphi}^\mu(x) \quad (\text{A-1-16})$$

où $\bar{\varphi}^\mu(x)$ est obtenue à partir de la fonction $\varphi^\mu(x)$ correspondante de la représentation $\uparrow\mu_0^*$ grâce aux échanges suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \rightarrow -\mu \\ q \rightarrow -q \\ \mu_0 \rightarrow -\mu_0 \end{array} \right. \quad (\text{A-1-17})$$

Les conditions analogues à (A-1-13) sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu_0 + q \text{ entier } \geq 0 \\ \mu_0 + \frac{1}{2} < 0 \end{array} \right. , \quad (\text{A-1-18})$$

ce qui implique $q > \frac{1}{2}$.

En ce qui concerne les représentations continues, $D_p(E_0, \Phi)^*$ et $D_s(E_0, \Phi)^*$, on ne trouve pas de fonctions de base normées au sens strict. Toutefois pour les représentations principales $D_p(E_0, \Phi)^*$ et à condition que :

$$E_0 + q \text{ entier} , \quad (\text{A-1-19})$$

on peut trouver des bases dont les fonctions sont normées suivant :

$$(\Phi_{\omega}^{\mu} | \Phi_{\omega'}^{\mu}) = \delta(\sigma - \sigma') \quad (\text{A-1-20})$$

(où $\omega = -\sigma^2 - \frac{1}{4}$) .

Ces fonctions de base s'écrivent, si $\mu+q \geq 0$

$$\begin{aligned} \Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left| \frac{a' \Gamma(\frac{1}{2} + \mu + i\sigma) \Gamma(\frac{1}{2} + q + i\sigma)}{\Gamma(2i\sigma)} \right|^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{\mu+q}}{(\mu+q)!} \\ &\times \left(\text{sh} \frac{z}{2} \right)^{\mu+q+\frac{1}{2}} \left(\text{ch} \frac{z}{2} \right)^{-\mu-q-\frac{1}{2}-2i\sigma} F\left(\frac{1}{2} + \mu + i\sigma, \frac{1}{2} + q + i\sigma; \mu+q+1; \text{th}^2 \frac{z}{2}\right) , \end{aligned} \quad (\text{A-1-21})$$

et si $\mu+q \leq 0$:

$$\begin{aligned} \Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left| \frac{a' \Gamma(\frac{1}{2} - \mu + i\sigma) \Gamma(\frac{1}{2} - q + i\sigma)}{\Gamma(2i\sigma)} \right|^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(-\mu-q)!} \\ &\times \left(\text{sh} \frac{z}{2} \right)^{-\mu-q+\frac{1}{2}} \left(\text{ch} \frac{z}{2} \right)^{\mu+q-\frac{1}{2}-2i\sigma} F\left(\frac{1}{2} - \mu + i\sigma, \frac{1}{2} - q + i\sigma; -\mu-q+1; \text{th}^2 \frac{z}{2}\right) . \end{aligned} \quad (\text{A-1-22})$$

b) Réalisation $A_{\frac{3}{2}}$.

Les opérateurs de cette réalisation et l'équation factorisable associée sont donnés dans le paragraphe 2.5.1 . L'expression explicite des fonctions de base est dans tous les cas extrêmement compliquée. Ainsi, par exemple, pour les représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$, l'équation différentielle du premier ordre dont la solution fournit la fonction de base $\Phi^{\mu_0}(x, \tau)$ s'écrit :

$$\left[\frac{d}{dz} + \left(\mu_0 - \frac{1}{2} \right) \text{th} z - \frac{q}{\text{ch} z} \right] \varphi^{\mu_0}(x) = 0 ,$$

si l'on pose :

$$\begin{cases} a'(x+p') = z \\ \frac{d}{a'} = q \end{cases} .$$

Cette fonction est donc proportionnelle à

$$(\operatorname{ch} z)^{-\mu_0 + \frac{1}{2}} \exp[q \operatorname{tg}^{-1}(\operatorname{sh} z)] ,$$

et la construction des fonctions de base à partir de cette expression est malaisée. Par ailleurs, nous n'avons rencontré aucune application de cette réalisation : nous ne l'étudions donc pas davantage ici.

c) Réalisation B .

Cette réalisation, dont les opérateurs ainsi que l'équation associée se trouvent dans le tableau (2), conduit aux applications les plus nombreuses et les plus importantes. Nous posons :

$$\begin{cases} ax = z \\ \frac{d}{a} = q \end{cases}$$

L'équation factorisable B n'a pas de point singulier et nous prenons comme domaine pour z l'intervalle $]-\infty, +\infty[$. L'équation est invariante dans les échanges (A-1-2) et (A-1-3) .

Pour les représentations $\uparrow\mu_0^*$, on doit résoudre l'équation :

$$\left[\frac{d}{dz} + q e^z - (\mu_0 - \frac{1}{2}) \right] \varphi^{\mu_0}(x) = 0 .$$

La fonction de base associée à μ_0 , qui est normée si $q > 0$ et $\mu_0 - \frac{1}{2} > 0$, s'écrit :

$$\Phi^{\mu_0}(x, \tau) = e^{i\mu_0\tau} \frac{1}{\Gamma(2\mu_0-1)^{\frac{1}{2}}} \exp(-q e^z) (2q e^z)^{\mu_0-\frac{1}{2}} . \quad (\text{A-1-23})$$

En utilisant les relations (3-4-3) avec les valeurs de α_{\pm}^{μ} données par les équations (A-1-8), on obtient une base orthonormée de $\uparrow_{\mu_0}^*$, à condition que :

$$\begin{cases} q > 0 \\ \mu_0^{-\frac{1}{2}} > 0 \end{cases} , \quad (\text{A-1-24})$$

ce qui est toujours vérifié si la fonction $\Phi^{\mu_0}(x, \tau)$ est normée.

Les fonctions de cette base sont liées à des fonctions hypergéométriques confluentes :

$$\begin{aligned} \Phi^{\mu}(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a|(2\mu_0-1)\Gamma(\mu+\mu_0)}{(\mu-\mu_0)! \Gamma(2\mu_0)^2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \exp(-q e^z) (2q e^z)^{\mu_0-\frac{1}{2}} F(-\mu+\mu_0; 2\mu_0; 2q e^z) . \end{aligned} \quad (\text{A-1-25})$$

De plus $\mu_0-\mu$ est entier ≤ 0 et on peut exprimer ces fonctions à l'aide de polynômes de Laguerre :

$$\begin{aligned} \Phi^{\mu}(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a|(\mu_0-1)(\mu-\mu_0)!}{\Gamma(\mu+\mu_0)^3} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \exp(-q e^z) (2q e^z)^{\mu_0-\frac{1}{2}} L_{\mu-\mu_0}^{2\mu_0-1}(2q e^z) . \end{aligned} \quad (\text{A-1-26})$$

Pour les représentations $\downarrow\mu_0^*$ les fonctions de base sont déductibles des précédentes, de la même façon que dans le cas de la réalisation A_2 , en écrivant :

$$\Phi^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \bar{\varphi}^\mu(x) \quad (A-1-27)$$

où $\bar{\varphi}^\mu(x)$ est déduite de la fonction $\varphi^\mu(x)$ correspondante de la réalisation $\uparrow\mu_0^*$ grâce aux échanges (A-1-17). Les conditions analogues à (A-1-24) sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} q < 0 \\ \mu_0 + \frac{1}{2} < 0 \end{array} \right.$$

Pour les représentations continues, la situation est analogue à celle décrite pour la réalisation A_2 . Quel que soit q , il est possible pour toutes les représentations $D_p(E_0, \Phi)^*$ de construire des bases dont les fonctions de base sont normées suivant la condition (A-1-20). Si q est positif, ces fonctions s'écrivent :

$$\begin{aligned} \Phi_\omega^\mu(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left| \frac{a \Gamma(-\mu + \frac{1}{2} - i\sigma)}{\Gamma(-2i\sigma + 1)} \right| \exp(q e^z) \\ &\times i \left\{ \frac{\Gamma(-2i\sigma + 1)}{\Gamma(-\mu + \frac{1}{2} - i\sigma)} (2q e^z)^{i\sigma} F(\mu + \frac{1}{2} + i\sigma; 2i\sigma + 1; -2q e^z) - \text{C.C.} \right\}, \end{aligned} \quad (A-1-28)$$

et si q est négatif :

$$\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \left| \frac{a \Gamma(\mu + \frac{1}{2} + i\sigma)}{\Gamma(-2i\sigma + 1)} \right| \exp(-q e^z) \\ \times i \left\{ \frac{\Gamma(-2i\sigma + 1)}{\Gamma(\mu + \frac{1}{2} - i\sigma)} (-2q e^z)^{i\sigma} F(-\mu + \frac{1}{2} + i\sigma; 2i\sigma + 1; 2q e^z) - \text{C.C.} \right\} .$$

(A-1-29)

3. Algèbre de Lie réelle \mathfrak{A}_4 .

Pour l'algèbre de Lie abstraite \mathfrak{A}_4 , nous avons vu (cf. paragraphe 3.3.2) que les conditions d'unitarité contiennent entre autres les relations :

$$(J_{\pm})^{\dagger} = \varepsilon J_{\mp} , \quad (\text{A-1-30})$$

où ε est égal à $+1$ ou à -1 .

Les représentations irréductibles unitaires sont (cf. tableau (3)) $\uparrow_{\mu_0}^{e*}$, $\downarrow_{\mu_0}^{e*}$ et $R(E_0, \omega, 0)^*$, et pour chacune de ces représentations les conditions d'unitarité prennent deux formes différentes selon que $\varepsilon = +1$ ou $\varepsilon = -1$.

Les réalisations du tableau (2) qui sont associées à l'algèbre de Lie réelle \mathfrak{A}_4 sont C' et D' . Dans les deux cas les conditions d'unitarité contiennent :

$$(J_{\pm})^{\dagger} = J_{\mp} , \quad (\text{A-1-31})$$

et la seule valeur possible pour ε est $+1$. De plus, pour ces deux réalisations E est égal à bI et on a toujours $e = b$ ($b \neq 0$) .

Les représentations irréductibles unitaires de l'algèbre abstraite qui sont à considérer pour ces deux réalisations sont :

$$\uparrow_{\mu_0}^b * , \text{ si } b > 0 , \text{ avec } \alpha_{\pm}^{\mu} = \sqrt{b(\mu - \mu_0)} \quad (\text{A-1-32})$$

$$\downarrow_{\mu_0}^b * , \text{ si } b < 0 , \text{ avec } \alpha_{\pm}^{\mu} = \sqrt{b(\mu - \mu_0 - 1)} . \quad (\text{A-1-33})$$

a) Réalisation C' .

Les opérateurs de cette réalisation et l'équation associée sont dans le tableau (2). L'équation a comme point singulier $x=0$ et nous prenons comme domaine pour x l'intervalle $]0, +\infty[$. Les changements définis par

$$\begin{cases} b = -b' \\ \mu = -\mu' \\ \omega = \omega' + b' \end{cases} \quad (\text{A-1-34})$$

$$\text{ou } \begin{cases} \mu = -\mu' \\ \omega = \omega' + b\mu' \end{cases} \quad (\text{A-1-35})$$

laissent cette équation invariante.

Pour les représentations $\uparrow_{\mu_0}^b *$, qu'on peut obtenir si b est positif, la fonction de base associée à μ_0 est obtenue à partir de la solution de l'équation :

$$\left[\frac{d}{dx} + \frac{\mu_0^{-\frac{1}{2}}}{x} + \frac{bx}{4} \right] \varphi^{\mu_0}(x) = 0 ,$$

et elle s'écrit :

$$\Phi^{\mu_0}(x, \tau) = e^{i\mu_0 \tau} \left[\frac{2^{2\mu_0-1}}{b^{\mu_0-1} \Gamma(-\mu_0+1)} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-bx^2/8} x^{-\mu_0+1/2} ; \quad (\text{A-1-36})$$

elle est normée si $\mu_0 < 1$. Cependant si on utilise à partir de cette fonction les relations (3-4-3) avec les valeurs de α_{\pm}^{μ} données par (A-1-32), on n'obtient une base orthonormée de la représentation $\uparrow_{\mu_0}^b *$

que si :

$$\mu_0 \text{ entier } \leq 0 \quad . \quad (A-1-37)$$

Les fonctions de base peuvent être exprimées en termes de fonctions hypergéométriques confluentes ; on pose $z = bx^2/4$ et on a, si $\mu \leq 0$:

$$\begin{aligned} \Phi^\mu(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{b(-\mu_0)!}{(\mu-\mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{\mu-\mu_0}}{(-\mu)!} \\ &\times z^{(-\mu+\frac{1}{2})/2} e^{-z/2} F(-\mu+\mu_0 ; 1-\mu ; z) \end{aligned} \quad (A-1-38)$$

et si $\mu \geq 0$:

$$\begin{aligned} \Phi^\mu(x, \tau) &= e^{i\mu\tau} \left[\frac{b(\mu-\mu_0)!}{(-\mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{\mu_0}}{\mu!} \\ &\times z^{(\mu+\frac{1}{2})/2} e^{-z/2} F(\mu_0 ; 1+\mu ; z) . \end{aligned} \quad (A-1-39)$$

Les fonctions hypergéométriques qui apparaissent contiennent un indice entier ≤ 0 ($-\mu+\mu_0$ ou μ_0) et sont liées à des polynômes de Laguerre.

Si b est négatif, les résultats peuvent être déduits des précédents. Les fonctions de base d'une représentation $\downarrow_{\mu_0}^b *$ sont obtenues, si

$$\mu_0 \text{ entier } \geq 0 \quad , \quad (A-1-40)$$

en écrivant :

$$\Phi^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \bar{\varphi}^\mu(x) \quad , \quad (A-1-41)$$

où $\bar{\varphi}^\mu(x)$ est déduite de la fonction correspondante de la représentation $\uparrow_{\mu_0}^b *$ grâce aux échanges :

$$\left\{ \begin{array}{l} b \rightarrow -b \\ \mu \rightarrow -\mu \\ \mu_0 \rightarrow -\mu_0 \end{array} \right. \quad . \quad (A-1-42)$$

b) Réalisation D' .

L'équation factorisable D' se trouve dans le tableau (2). Elle n'a pas de point singulier et le domaine de x est l'intervalle $]-\infty, +\infty[$.

Toutes les solutions $\varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ de cette équation pour lesquelles $\omega+b\mu$ est le même sont identiques. Pour la réalisation qui se trouve dans le tableau (2) les différentes représentations $\uparrow_{\mu_0}^{b*}$ (ou $\downarrow_{\mu_0}^{b*}$) ont des bases qui sont obtenues à partir des mêmes fonctions $\varphi^{\mu}(x)$. Par exemple si l'on connaît une base de la représentation $\uparrow_{\mu_0}^{b*}$ formée de fonctions $e^{i\mu\tau} \varphi^{\mu}(x)$, les fonctions $e^{i(\mu+c)\tau} \varphi^{\mu}(x)$ forment la base d'une représentation $\uparrow_{\mu_0+c}^{b*}$ (c réel quelconque). Nous avons introduit, dans le paragraphe 2.5.4, une autre réalisation de $G(0,1)$, par des opérateurs différentiels du premier et du second ordre à une seule variable, qui ne conduit pas à des résultats redondants . Les expressions des opérateurs de cette réalisation sont données dans les équations (2-5-19) et l'invariant est identiquement nul. Cette réalisation est aussi associée à l'algèbre réelle \mathfrak{S}_4 en ce sens que, dans certaines conditions, les équations (A-1-31) sont vérifiées, le produit scalaire étant cette fois défini par :

$$(\varphi|\varphi') = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \varphi'(x) dx \quad . \quad (A-1-43)$$

Comme $\omega=0$, les seules représentations irréductibles unitaires à considérer sont :

$$\int_0^b * , \text{ si } b > 0 , \text{ avec } \alpha_{\pm}^{\mu} = \sqrt{b\mu} \quad (\text{A-1-44})$$

$$\int_{-1}^b * , \text{ si } b < 0 , \text{ avec } \alpha_{\pm}^{\mu} = \sqrt{b\mu} \quad (\text{A-1-45})$$

Pour la représentation $\int_0^b *$, lorsque b est positif, une base peut être construite à partir de la solution de l'équation :

$$J_{+}'' \varphi^0(x) = 0 \quad (\text{A-1-46})$$

En effet $\varphi^0(x)$ est alors fonction propre de J_{+}'' et Ω'' avec la valeur propre 0 et peut servir de point de départ pour les relations de récurrence (3-4-3).

La solution normée de l'équation (A-1-46) est

$$\varphi^0(x) = \left(\frac{b}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{1}{b}\left(\frac{bx}{2} + d\right)^2\right] . \quad (\text{A-1-47})$$

Les fonctions de la base orthonormée correspondante sont, exprimées en termes de polynômes d'Hermite (qui sont eux-mêmes liés à des fonctions hypergéométriques confluentes) :

$$\varphi^{\mu}(x) = \left(\frac{b}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{[2^{\mu} \mu!]^{\frac{1}{2}}} e^{-u^2/2} H_{\mu}(u) , \quad (\text{A-1-48})$$

où l'on a posé $u = \sqrt{\frac{2}{b}} \left(\frac{bx}{2} + d\right)$.

Pour la représentation $\int_{-1}^b *$, c'est-à-dire lorsque b est négatif, les fonctions de base sont obtenues à partir des précédentes grâce aux échanges (A-1-42) .

4. Algèbre de Lie réelle \mathfrak{e}_3 .

Pour l'algèbre de Lie abstraite \mathfrak{e}_3 , nous avons vu (cf. paragraphe 3.3.2) que les conditions d'unitarité contiennent :

$$(J_{\pm})^{\dagger} = e^{i\theta} J_{\mp} \quad , \quad (\text{A-1-49})$$

avec θ réel quelconque.

Les représentations irréductibles unitaires de cette algèbre sont les représentations $Q(E_0, \omega)^*$ ($\omega \neq 0$) et les conditions d'unitarité s'expriment de manière différente pour chaque valeur de θ . On peut écrire :

$$\omega = \rho^2 e^{-i\theta} \quad (\rho^2 > 0) \quad \text{et} \quad \alpha_{\pm}^{\mu} = \rho e^{-i\theta/2} \quad . \quad (\text{A-1-50})$$

Les réalisations du tableau (2) qui sont associées à l'algèbre réelle \mathfrak{e}_3 sont les réalisations C'' et D'' . Dans les deux cas la condition analogue à (A-1-49) est :

$$(J_{\pm})^{\dagger} = J_{\mp} \quad ,$$

et les seules valeurs de θ possibles sont telles que $e^{i\theta} = 1$.

Les conditions (A-1-50) correspondantes sont donc :

$$\omega > 0 \quad \text{et} \quad \alpha_{\pm}^{\mu} = \sqrt{\omega} \quad . \quad (\text{A-1-51})$$

De plus nous n'étudions pas ici la réalisation D'' , qui est extrêmement simple et ne conduirait qu'à des applications triviales.

Pour la réalisation C'' , on trouve qu'il est possible de construire une base orthonormée des représentations $Q(E_0, \omega)^*$, à condition que :

$$\left\{ \begin{array}{l} E_0 = 0 \\ \omega = k^2 > 0 \end{array} \right. ; \quad (A-1-52)$$

les fonctions de base sont normées suivant :

$$(\Phi_{\omega}^{\mu} | \Phi_{\omega'}^{\mu}) = \delta(k-k') \quad . \quad (A-1-53)$$

On peut exprimer ces fonctions à l'aide de fonctions de Bessel :

$$\Phi^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} (kx)^{\frac{1}{2}} J_{\mu}(kx) \quad . \quad (A-1-54)$$

APPENDICE 2

FONCTIONS DE BASE NORMEES DES REPRESENTATIONS "PARTIELLEMENT"
UNITAIRES DES DIFFERENTES REALISATIONS D'ALGEBRES DE LIE ETUDIEES.

1. Réalisation A_1 .

L'équation factorisable A_1 se trouve dans le paragraphe 2.5.1. Elle est invariante dans les échanges (A-1-2) et (A-1-3). On trouve que de manière générale deux solutions linéairement indépendantes de cette équation correspondant à la valeur propre $\omega = \Phi(\Phi+1)$ sont données par :

$$\varphi_1^\mu = u^{(-\mu-q+\frac{1}{2})/2} (1-u)^{(-\mu+q+\frac{1}{2})/2} F(-\mu+\Phi+1, -\mu-\Phi; \mu+q+1; u)$$

$$\varphi_2^\mu = \overline{\varphi}_1^\mu \quad , \quad (A-2-1)$$

où $u = \sin^2 \frac{a(x+p)}{2}$ et où $\overline{\varphi}_1^\mu$ est déduite de φ_1^μ par les échanges (A-1-2). Les échanges (A-1-3) laissent chaque solution invariante. Si $\mu+q$ est entier, l'une des deux solutions est singulière et ne s'écrit pas à partir d'une fonction hypergéométrique. Si l'on pose :

$$\Phi_j^\mu = e^{i\mu\tau} \varphi_j^\mu \quad (\text{avec } j=1,2) \quad ,$$

on montre que l'action des opérateurs J_+ et J_- de la réalisation A_1 sur ces fonctions s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{si } \mu+q \neq 0 \quad J_{\pm} \Phi_j^{\mu} &\propto \Phi_j^{\mu \pm 1} \\ \text{si } \mu = -q \quad \begin{cases} J_+ \Phi_1^{-q} &\propto \Phi_2^{-q+1} \\ J_- \Phi_2^{-q} &\propto \Phi_1^{-q-1} \end{cases} \end{aligned} \quad (A-2-2)$$

Par conséquent si $\mu+q$ n'est pas entier les représentations irréductibles ne contiennent que des fonctions Φ_1^{μ} ou Φ_2^{μ} . Si $-q$ appartient au spectre de la représentation les fonctions de base sont du type Φ_2^{μ} si $\mu+q \geq 0$ et Φ_1^{μ} si $\mu+q \leq 0$. Grâce aux échanges (A-1-2), toutes les fonctions de base normées du type Φ_2^{μ} peuvent être déduites de celles du type Φ_1^{μ} . D'autre part une même fonction Φ_1^{μ} peut grâce aux échanges (A-1-3) apparaître dans les fonctions de base de deux représentations différentes. On peut finalement se contenter d'étudier les conditions de normalisabilité des fonctions Φ_1^{μ} sous la forme (A-2-1). On obtient :

- a) $\mu \pm \Phi, q \pm \Phi$ non entiers, $|\mu-q| < 1$ (ce cas conduit à des représentations non bornées dont une seule fonction est normée et qui ne nous intéressent pas ici).
- b) $\mu-\Phi-1$ (ou $\mu+\Phi$) entier ≥ 0 et $\mu < -|q|+1$.
- c) $\mu-\Phi-1$ (ou $\mu+\Phi$) entier ≥ 0 , $q-\Phi-1$ (ou $q+\Phi$) entier ≥ 0
et $\mu < -q+1$.

Les conditions b) (respectivement c), si $\mu+q$ n'est pas entier) conduisent à des représentations "partiellement" unitaires bornées

inférieurement par μ_0 (qui sont irréductibles si $2\mu_0$ n'est pas entier ≤ 0) où la condition de normalisabilité s'écrit $\mu < -|q|+1$ (resp. $\mu < -q+1$). Les fonctions de base normées s'écrivent (avec les notations de l'appendice 1) :

$$\Phi^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a| (-2\mu_0+1) \Gamma(-\mu_0-q+1) \Gamma(-\mu_0-\mu+1)}{\Gamma(-\mu_0+q+1) (\mu-\mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(-\mu-q+1)} \\ \times \left(\sin \frac{z}{2} \right)^{-\mu-q+\frac{1}{2}} \left(\cos \frac{z}{2} \right)^{-\mu+q+\frac{1}{2}} F(\mu_0-\mu, -\mu-\mu_0+1; -\mu-q+1; \sin^2 \frac{z}{2}) .$$

(A-2-3)

A titre d'exemple nous donnons les représentations "partiellement" unitaires qu'on déduit des précédentes grâce aux échanges (A-1-2) et (A-1-3) :

$\downarrow \mu_0$ (irréductible si $2\mu_0$ non entier ≥ 0) avec $\mu > |q|-1$;
 $D(E_0, \Phi)$ où E_0 est la partie non entière de q et $\Phi = \mu_0(\mu_0-1)$
 avec $q = \mu_0 + N$ (N entier ≥ 0) et $|\mu| < -q+1$.

Le cas où $\mu+q$ est entier est un peu plus compliqué. Il conduit, si $2\mu_0$ est entier ≥ 0 et si $-q$ appartient au spectre de $D^{\mu_0^*}$, aux représentations unitaires (appendice 1). Sinon, on obtient également des représentations "partiellement" unitaires, où les conditions de normalisabilité sont celles de φ_2^μ si $\mu \geq -q$ et de φ_1^μ si $\mu < -q$.

2. Réalisation A_2 .

L'équation factorisable A_2 et la réalisation associée sont données dans le paragraphe 2.5.2 . Elle est également invariante dans les échanges (A-1-2) et (A-1-3). Deux solutions linéairement indépendantes correspondant à la valeur propre $\omega = \Phi(\Phi+1)$ sont données par:

$$\varphi_1^\mu = u^{(-\mu-q+\frac{1}{2})/2} (1-u)^{\Phi+\frac{1}{2}} F(-\mu+\Phi+1, -q+\Phi+1; -\mu-q+1; u)$$

$$\varphi_2^\mu = \overline{\varphi_1^\mu} \quad (\text{A-2-4})$$

où $u = \text{th}^2 \frac{a'(x+p)}{2}$ et où $\overline{\varphi_1^\mu}$ est déduite de φ_1^μ par les échanges (A-1-2). Les échanges (A-1-3) laissent chaque solution invariante. Si $\mu+q$ est entier, l'une des deux solutions est singulière. Avec les mêmes notations que dans le paragraphe précédent, on écrit des équations identiques aux équations (A-2-2) et les conséquences pour les espaces de représentation sont les mêmes. On peut se contenter d'étudier les conditions de normalisabilité des fonctions φ_1^μ . On obtient :

- a) $-\mu+\Phi+1, -q+\Phi+1$ non entiers ≤ 0 , $\mu < -q+1$, $\Phi+\frac{1}{2} = i \sigma$ (σ réel) .
- b) $-\mu+\Phi+1$ entier ≤ 0 , $\mu < -q+1$, $\Phi+\frac{1}{2} > 0$

(ou une condition analogue en échangeant μ et q).

La condition a) conduit à des représentations "partiellement" unitaires non bornées $D(E_0, \Phi)$ avec $\Phi+\frac{1}{2} = i \sigma$ où la condition de normalisabilité s'écrit $\mu < -q+1$. Les fonctions de base normées sont, avec les notations de l'appendice 1 :

$$\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a'| \Gamma(\frac{1}{2}-\mu+i\sigma) \Gamma(\frac{1}{2}-q+i\sigma)}{\Gamma(2i\sigma)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(-\mu-q+1)} \quad (\text{A-2-5})$$

$$\times \left(\text{sh} \frac{z}{2} \right)^{-\mu-q+\frac{1}{2}} \left(\text{ch} \frac{z}{2} \right)^{\mu+q-\frac{1}{2}-2i\sigma} F\left(\frac{1}{2}-\mu+i\sigma, \frac{1}{2}-q+i\sigma; -\mu-q+1; \text{th}^2 \frac{z}{2}\right) ;$$

elles ne sont pas normées au sens strict mais suivant :

$$(\Phi_{\omega}^{\mu} | \Phi_{\omega'}^{\mu}) = \delta(\sigma - \sigma') \quad (\text{A-2-6})$$

La condition b) conduit à des représentations "partiellement" unitaires bornées inférieurement par $\mu_0 = \Phi+1$ ($\mu_0 > \frac{1}{2}$), où la condition de normalisabilité est $\mu < -q+1$. Les fonctions de base normées sont :

$$\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \left[\frac{|a'| \Gamma(\mu_0-q) \Gamma(-\mu_0-q+1) (2\mu_0-1)}{\Gamma(\mu_0+\mu) (\mu-\mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{\mu-\mu_0}}{\Gamma(-\mu-q+1)} \\ \times \left(\text{sh} \frac{z}{2} \right)^{-\mu-q+\frac{1}{2}} \left(\text{ch} \frac{z}{2} \right)^{\mu+q-2\mu_0+\frac{1}{2}} F(\mu_0-\mu, \mu_0-q; -\mu-q+1; \text{th}^2 \frac{z}{2}) \quad (\text{A-2-7})$$

Comme dans le cas de la réalisation A_1 , il existe d'autres représentations "partiellement" unitaires : elles se déduisent de celles-ci en utilisant les échanges (A-1-2) et (A-1-3).

3. Réalisation B.

L'équation factorisable B se trouve dans le tableau (2). Elle est invariante dans les échanges (A-1-2). Deux solutions linéairement indépendantes correspondant à $\omega = \Phi(\Phi+1)$ sont :

$$\begin{aligned}\varphi_1^\mu &= z^{\Phi+\frac{1}{2}} e^{-qz} F(-\mu+\Phi+1; 2\Phi+2; 2qz) \\ &= z^{\Phi+\frac{1}{2}} e^{qz} F(\mu+\Phi+1; -2\Phi+2; -2qz)\end{aligned}\tag{A-2-8}$$

$$\begin{aligned}\varphi_2^\mu &= z^{-\Phi-\frac{1}{2}} e^{qz} F(\mu-\Phi; -2\Phi; -2qz) \\ &= z^{-\Phi-\frac{1}{2}} e^{-qz} F(-\mu-\Phi; -2\Phi; 2qz) .\end{aligned}$$

Les échanges (A-1-3) laissent chaque solution invariante. Avec les mêmes notations que pour la réalisation A_1 , l'action des opérateurs J_+ et J_- de la réalisation B sur les fonctions de base associées à φ_1^μ et φ_2^μ s'écrit :

$$J_\pm \varphi_i^\mu \propto \varphi_i^{\mu \pm 1} \quad (i=1,2) .\tag{A-2-9}$$

Les conditions de normalisabilité peuvent s'écrire, aussi bien pour φ_1^μ que φ_2^μ :

- a) $\mu = \mu_0 + N$ (N entier ≥ 0), $\Phi + \frac{1}{2} = \pm(\mu_0 - \frac{1}{2})$, $q > 0$, $\mu_0 > \frac{1}{2}$.
- b) $\mu = \mu_0 - N$ (N entier ≥ 0), $\Phi + \frac{1}{2} = \pm(\mu_0 + \frac{1}{2})$, $q < 0$, $\mu_0 < -\frac{1}{2}$.
- c) $\mu \pm \Phi$ non entier, $\Phi + \frac{1}{2} = i \sigma$.

On trouve alors que toutes les fonctions de base normées appartiennent aux représentations unitaires de la réalisation B obtenues dans l'appendice 1. L'expression de ces fonctions est donnée dans cet appendice.

4. Réalisation C' .

L'équation factorisable C' et la réalisation associée sont données dans le tableau (2). L'équation est invariante dans les échanges

$$\begin{cases} \mu = -\mu' \\ \omega = \omega' + b \mu' \end{cases} \quad (\text{A-2-10})$$

$$\begin{cases} b = -b' \\ \omega = \omega' + b(\mu' + 1) \end{cases} \quad (\text{A-2-11})$$

Deux solutions linéairement indépendantes sont, sauf si μ est entier, données par :

$$\begin{aligned} \varphi_1^\mu &= x^{-2\mu+1} e^{-bx^2/4} F\left(-\mu - \frac{\omega}{b}; 1-\mu; \frac{bx^2}{4}\right) \\ \varphi_2^\mu &= \overline{\varphi_1^\mu} \end{aligned} \quad (\text{A-2-12})$$

où $\overline{\varphi_1^\mu}$ est déduite de φ_1^μ par les échanges (A-2-10). Les échanges (A-2-11) laissent chaque solution invariante. L'action des opérateurs J_+ et J_- de la réalisation C' sur les fonctions de base associée à φ_1^μ et φ_2^μ est, avec les notations utilisées pour A_1 :

$$\begin{aligned} \text{si } \mu \neq 0 \quad J_\pm \Phi_i^\mu &\propto \Phi_i^{\mu \pm 1} \quad (i=1,2) \\ \text{si } \mu = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} J_+ \Phi_1^0 \propto \Phi_2^1 \\ J_- \Phi_2^0 \propto \Phi_1^{-1} \end{array} \right. & \quad (\text{A-2-13}) \end{aligned}$$

Comme pour A_1 et A_2 , certaines représentations irréductibles (celles où μ est entier) contiennent les deux types de solutions

(φ_1^μ si $\mu \leq 0$, φ_2^μ si $\mu \geq 0$).

Les conditions de normalisabilité de la fonction φ_1^μ sous la forme (A-2-12) sont :

$$b > 0, \mu = \mu_0 + N \quad (N \text{ entier } \geq 0), \omega = -b\mu_0, \mu < 1;$$

on obtient ainsi des représentations partiellement unitaires bornées inférieurement par μ_0 , $\uparrow \mu_0^b$ dont les fonctions de base sont normées,

si $b > 0$, tant que $\mu < 1$; elles s'écrivent :

$$\Phi^\mu(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \left[\frac{b \Gamma(-\mu_0 + 1)}{(\mu - \mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(-)^{\mu - \mu_0}}{\Gamma(-\mu + 1)} \\ \times z^{(-\mu + \frac{1}{2})/2} e^{-z/2} F(-\mu + \mu_0; 1 - \mu; z) , \quad (\text{A-2-14})$$

avec $z = b \frac{x^2}{4}$.

Il existe d'autres représentations partiellement unitaires, qu'on peut déduire de celles-ci grâce aux échanges (A-2-10) et (A-2-11); par exemple :

$$\downarrow_{\mu_0}^b , \quad b < 0 \quad \text{avec la condition } \mu < 1 \quad (\text{échanges (A-2-10)}) ;$$

$R(E_0, \omega, b)$, $b > 0$, $\omega = -b(N-1)$ (N entier ≥ 0), avec la condition $\mu < 1$ (échanges (A-2-11)).

5. Réalisation C'' .

L'équation factorisable C'' et la réalisation associée sont dans le tableau (2). L'équation est invariante dans l'échange $\mu \rightarrow -\mu$. Deux solutions linéairement indépendantes sont, si μ n'est pas entier :

$$\varphi_1^\mu = x^{\mu + \frac{1}{2}} e^{\mp kx} F(\mu + \frac{1}{2}; 2\mu + 1; \pm 2kx)$$

$$\varphi_2^\mu = \overline{\varphi}_1^\mu ,$$

où $k = i\sqrt{\omega}$ si $\omega > 0$ et $k = \sqrt{-\omega}$ si $\omega < 0$ et où $\overline{\varphi}_1^\mu$ est déduite de φ_1^μ par l'échange $\mu \rightarrow -\mu$. L'action des opérateurs J_+ et J_- sur les fonctions de base déduites de ces solutions est donnée par les équations (A-2-13). On trouve, à partir des conditions de

normalisabilité de φ_1^μ , qu'il existe des représentations "partiellement" unitaires, $Q(E_0, \omega)$ avec $\omega > 0$, dont les fonctions de base sont normées (suivant $(\Phi_\omega^\mu | \Phi_{\omega'}^\mu) = \delta(k-k')$) si $\mu < 1$. En utilisant l'échange $\mu \rightarrow -\mu$ on trouve d'autres représentations "partiellement" unitaires du type $Q(E_0, \omega)$ avec $\omega > 0$ où la condition est $\mu > -1$.

6. Réalisation D'.

Pour cette réalisation, nous utilisons les résultats rappelés dans l'appendice 1. L'équation factorisable admet comme solutions indépendantes

$$\varphi_1^\mu = e^{-z/2} F(-\frac{\mu}{2}; \frac{1}{2}; z) \quad (\text{A-2-16})$$

$$\varphi_2^\mu = z^{\frac{1}{2}} e^{-z/2} F(-\frac{\mu}{2} + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; z)$$

où $z = \frac{2}{b} (\frac{bx}{2} + d)^2$.

L'action des opérateurs J_+'' et J_-'' (cf. appendice 1) sur ces fonctions est :

$$\begin{aligned} J_+'' \varphi_1^\mu &\propto \varphi_2^{\mu+1} \\ J_-'' \varphi_2^\mu &\propto \varphi_1^{\mu-1} \end{aligned} \quad (\text{A-2-17})$$

Les représentations irréductibles sont donc formées de fonctions de base qui sont alternativement de type φ_1^μ et φ_2^μ . En examinant les conditions pour que ces fonctions soient normalisables on trouve qu'il est nécessaire que μ soit entier, et que toutes les solutions normées de l'équation appartiennent aux deux représentations unitaires du tableau (4) :

$$\begin{array}{c} \uparrow b^* \\ 0 \end{array} \quad \text{si } b > 0 \quad \text{et} \quad \begin{array}{c} 0^* \\ \downarrow -1 \end{array} \quad \text{si } b < 0 \quad .$$

APPENDICE 3

CALCUL DE CERTAINS COEFFICIENTS DE CLEBSCH-GORDAN DU GROUPE $SO(2,1)$.

Les coefficients de Clebsch-Gordan (C. C. G.) sont définis par l'équation (3-5-4) et la relation d'orthonormalité (3-5-6). L'équation (3-5-9) écrite pour l'opérateur J_3 entraîne que :

$$\langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle = 0 \quad \text{si} \quad \mu \neq \mu_1 + \mu_2 \quad .$$

Les deux autres équations (3-5-9), correspondant aux opérateurs J_+ et J_- conduisent à des relations de récurrence entre C. C. G. ; si on note α_{\pm}^{μ} , β_{\pm}^{μ} et γ_{\pm}^{μ} les éléments de matrice de J_+ et J_- dans les trois représentations auxquelles appartiennent respectivement $|\omega \mu\rangle$, $|\omega_1 \mu_1\rangle$ et $|\omega_2 \mu_2\rangle$, ces relations sont :

$$\alpha_+^{\mu+1} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu+1 \rangle = \beta_+^{\mu+1} \langle \omega_1 \mu_1 - 1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle + \gamma_+^{\mu+1} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 - 1 | \omega \mu \rangle$$

(A-3-1)

$$\alpha_-^{\mu} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu-1 \rangle = \beta_-^{\mu} \langle \omega_1 \mu_1 + 1 \omega_2 \mu_2 | \omega \mu \rangle + \gamma_-^{\mu} \langle \omega_1 \mu_1 \omega_2 \mu_2 + 1 | \omega \mu \rangle \quad .$$

(A-3-2)

Si certaines des représentations présentes sont bornées, ces équations

permettent, avec la condition d'orthonormalité, de calculer explicitement les C. C. G. (c'est ainsi qu'on calcule en général les C. C. G. de $SO(3)$ par exemple). Pour les représentations continues de $SO(2,1)$ il est possible d'utiliser la méthode de continuation analytique (Holman et Biedenharn 1968). Nous nous limitons ici au seul cas que nous utilisons dans les applications, celui où $|\omega_1 \mu_1\rangle$ et $|\omega_2 \mu_2\rangle$ appartiennent respectivement aux représentations $\uparrow_{\mu_0 1}^*$ et $\uparrow_{\mu_0 2}^*$. La réduction du produit de ces deux représentations en représentations irréductibles s'écrit :

$$\uparrow_{\mu_0 1}^* \times \uparrow_{\mu_0 2}^* = \sum_{p=0, \infty} \uparrow_{\mu_0 1 + \mu_0 2 + p}^* . \quad (A-3-3)$$

Les trois représentations des C. C. G. que nous calculons sont donc du type $\uparrow_{\mu_0}^*$ et nous écrivons ces derniers sous la forme :

$$\langle \mu_0 1 \mu_1 \mu_0 2 \mu_2 | \mu_0 \mu \rangle ;$$

on a toujours $\mu = \mu_1 + \mu_2$ et $\mu_0 = \mu_0 1 + \mu_0 2 + p$ (p entier ≥ 0). Nous rappelons que les coefficients α , β et γ des relations (A-1-1) et (A-1-2) sont donnés par :

$$\begin{aligned} \alpha_{\pm}^{\mu} &= \pm \sqrt{(\mu - \mu_0)(\mu + \mu_0 - 1)} \\ \beta_{\pm}^{\mu_1} &= \pm \sqrt{(\mu_1 - \mu_0 1)(\mu_1 + \mu_0 1 - 1)} \\ \gamma_{\pm}^{\mu_2} &= \pm \sqrt{(\mu_2 - \mu_0 2)(\mu_2 + \mu_0 2 - 1)} \end{aligned} \quad (A-3-4)$$

En utilisant un certain nombre de fois la relation (A-3-2) avec $\mu = \mu_0$, on peut calculer tous les C. C. G. de la forme $\langle \mu_0 1 \mu_1 \mu_0 2 \mu_2 | \mu_0 \mu_0 \rangle$ en fonction de l'un d'eux ; par exemple :

$$\langle \mu_{01}^{\mu_1} \mu_{02}^{\mu_2} | \mu_0 \mu_0 \rangle = (-)^{\mu_2 - \mu_{02}} \frac{\beta_-^{\mu_1+1} \dots \beta_-^{\mu_0 - \mu_{02}}}{\gamma_-^{\mu_2} \dots \gamma_-^{\mu_{02}+1}} \langle \mu_{01}^{\mu_0 - \mu_{02}} \mu_{02}^{\mu_{02}} | \mu_0 \mu_0 \rangle \quad (\text{A-3-5})$$

De façon analogue, la relation (A-3-1) permet de calculer un C. C. G.

$\langle \mu_{01}^{\mu_1} \mu_{02}^{\mu_2} | \mu_0 \mu \rangle$ en fonction d'un certain nombre de C. C. G. où μ est remplacé par $\mu-s$ (s donné) :

$$\begin{aligned} \langle \mu_{01}^{\mu_1} \mu_{02}^{\mu_2} | \mu_0 \mu \rangle &= \frac{1}{\alpha_+^{\mu} \dots \alpha_+^{\mu-s+1}} \\ &\times \sum_{p=0, s} \binom{s}{p} \beta_+^{\mu_1} \dots \beta_+^{\mu_1 - p + 1} \gamma_+^{\mu_2} \dots \gamma_+^{\mu_2 - s + p + 1} \\ &\times \langle \mu_{01}^{\mu_1 - p} \mu_{02}^{\mu_2 - s + p} | \mu_0 \mu - s \rangle \quad (\text{A-3-6}) \end{aligned}$$

On peut donc finalement écrire, en utilisant l'équation (A-3-6) avec

$s = \mu - \mu_0$, puis l'équation (A-3-5) :

$$\begin{aligned} \langle \mu_{01}^{\mu_1} \mu_{02}^{\mu_2} | \mu_0 \mu \rangle &= \frac{1}{\alpha_+^{\mu} \dots \alpha_+^{\mu_0+1}} \quad (\text{A-3-7}) \\ &\times \sum_{p=0, s} \binom{\mu - \mu_0}{p} \beta_+^{\mu_1} \dots \beta_+^{\mu_1 - p + 1} \gamma_+^{\mu_2} \dots \gamma_+^{\mu_2 - \mu + \mu_0 + p + 1} \\ &\times (-)^{\mu_2 - \mu_{02} - \mu + \mu_0 + p} \frac{\beta_-^{\mu_1 - p + 1} \dots \beta_-^{\mu_0 - \mu_{02}}}{\gamma_-^{\mu_2 - \mu + \mu_0 + p} \dots \gamma_-^{\mu_{02} + 1}} \langle \mu_{01}^{\mu_0 - \mu_{02}} \mu_{02}^{\mu_{02}} | \mu_0 \mu_0 \rangle \end{aligned}$$

En utilisant les expressions (A-3-4) des coefficients α , β et

γ , on obtient :

$$\begin{aligned}
\langle \mu_{01} \mu_1 \mu_{02} \mu_2 | \mu_0 \mu \rangle = & \\
& (-)^{\mu_2 - \mu_{02} - \mu + \mu_0} [\Gamma(2\mu_0) \Gamma(2\mu_{02}) (\mu_0 - \mu_{01} - \mu_{02})! \Gamma(\mu_0 + \mu_{01} - \mu_{02})]^{\frac{1}{2}} \\
& \times \left[\frac{(\mu - \mu_0)! (\mu_1 - \mu_{01})! (\mu_2 - \mu_{02})! \Gamma(\mu_1 + \mu_{01}) \Gamma(\mu_2 + \mu_{02})}{\Gamma(\mu + \mu_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \times \sum_p \frac{(-)^p}{p! (\mu - \mu_0 - p)! (\mu_1 - \mu_{01} - p)! \Gamma(\mu_1 + \mu_{01} - p) \Gamma(\mu_0 - \mu_1 + \mu_{02} + p) (\mu_0 - \mu_1 - \mu_{02} + p)!} \\
& \times \langle \mu_{01} \mu_0 - \mu_{02} \mu_{02} \mu_{02} | \mu_0 \mu_0 \rangle \quad . \quad (A-3-8)
\end{aligned}$$

Le C. C. G. $\langle \mu_{01} \mu_0 - \mu_{02} \mu_{02} \mu_{02} | \mu_0 \mu_0 \rangle$ peut être calculé (à une phase près) grâce à la relation d'orthonormalité. Il suffit d'écrire que :

$$\sum_{\mu_1 + \mu_2 = \mu_0} \langle \mu_{01} \mu_1 \mu_{02} \mu_2 | \mu_0 \mu_0 \rangle^2 = 1 \quad . \quad (A-3-9)$$

On trouve ainsi (à une phase arbitraire près) :

$$\langle \mu_{01} \mu_0 - \mu_{02} \mu_{02} \mu_{02} | \mu_0 \mu_0 \rangle = \left[\frac{\Gamma(\mu_0 + \mu_{01} + \mu_{02} - 1) \Gamma(\mu_0 - \mu_{01} + \mu_{02})}{\Gamma(2\mu_0 - 1) \Gamma(2\mu_{02})} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (A-3-10)$$

et, finalement :

$$\begin{aligned}
\langle \mu_{01} \mu_1 \mu_{02} \mu_2 | \mu_0 \mu \rangle = & \quad (A-3-11) \\
& (-)^{\mu_2 - \mu_{02} - \mu + \mu_0} \left[\frac{(\mu - \mu_0)! (\mu_1 - \mu_{01})! (\mu_2 - \mu_{02})! \Gamma(\mu_1 + \mu_{01}) \Gamma(\mu_2 + \mu_{02})}{\Gamma(\mu + \mu_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \times \left[(2\mu_0 - 1) \Gamma(\mu_0 + \mu_{01} + \mu_{02} - 1) (\mu_0 - \mu_{01} - \mu_{02})! \Gamma(\mu_0 - \mu_{01} + \mu_{02}) \Gamma(\mu_0 + \mu_{01} - \mu_{02}) \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \times \sum_p \frac{(-)^p}{p! (\mu - \mu_0 - p)! (\mu_1 - \mu_{01} - p)! \Gamma(\mu_1 + \mu_{01} - p) \Gamma(\mu_0 - \mu_1 + \mu_{02} + p) (\mu_0 - \mu_1 - \mu_{02} + p)!}
\end{aligned}$$

Signalons qu'on peut d'ailleurs exprimer ces C. C. G. par un certain nombre d'expressions différentes. En effet, la somme sur p qui apparaît dans l'équation (A-3-11) est liée à une fonction hypergéométrique généralisée de la forme :

$${}_3F_2(a_1, a_2, a_3; b_1, b_2; 1) = \sum_n \frac{\Gamma(a_1+n) \Gamma(a_2+n) \Gamma(a_3+n) \Gamma(b_1) \Gamma(b_2)}{n! \Gamma(a_1) \Gamma(a_2) \Gamma(a_3) \Gamma(b_1+n) \Gamma(b_2+n)} ;$$

de telles expressions sont liées entre elles par un grand nombre d'identités, qu'on démontre de façon générale en utilisant la relation :

$$F(a, b; c; 1) = \frac{\Gamma(c) \Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a) \Gamma(c-b)} \quad (c-a-b > 0) ,$$

en encore :

$$1 = \sum_n \frac{\Gamma(a+n) \Gamma(b+n) \Gamma(c-a) \Gamma(c-b)}{n! \Gamma(c+n) \Gamma(a) \Gamma(b) \Gamma(c-a-b)}$$

(qui contient comme cas particuliers les diverses formes du théorème d'addition des coefficients du binôme). Un certain nombre d'identités de ce type sont données par Cunningham (1972).

A titre d'exemple nous donnons la formule suivante

$$\begin{aligned} & \sum_p \frac{(-)^p}{p! (a_1-p)! (a_2-p)! (a_3-p)! (b_1+p)! (b_2+p)!} \\ &= (-)^{a_1} \frac{(a_1+a_2+a_3+b_1+b_2+1)!}{a_2! a_3! (a_1+b_1)! (a_2+b_2)! (a_3+b_2)!} \\ & \times \sum_t (-)^t \frac{(a_1+a_2+b_2-t)! (a_1+a_3+b_2-t)!}{t! (a_1-t)! (a_1+b_2-t)! (a_1+a_2+a_3+b_1+b_2+1-t)!} , \end{aligned}$$

qui permet de montrer que la formule donnée par Holman et Biedenharn (1968) est identique à l'expression (A-3-11), à une différence de phase $(-)^{\mu_0 - \mu_1 - \mu_2}$ près (qui provient du choix de phase arbitraire dans l'équation (A-3-10)) .

APPENDICE 4

Soient deux réalisations B de $\mathfrak{so}(2,1)$ de même paramètre a caractérisées par les paramètres q_1 et q_2 . Les opérateurs $J_{q_1^\pm}$ et $J_{q_2^\pm}$ sont donnés par les équations (4-5-1) et vérifient les équations (4-5-2) :

$$J_{q_1^\pm} - J_{q_2^\pm} = \mp \delta P_1^{\pm 1}, \quad \text{avec } \delta = q_1 - q_2. \quad (\text{A-4-1})$$

Nous cherchons tout d'abord à exprimer $J_{q_1^\pm}^n$ en fonction de $J_{q_2^\pm}$. Une démonstration préliminaire consiste à montrer que (quel que soit q):

$$(P_0^{\mp 1} J_\pm P_{-1}^0)^n = P_0^{\mp n} J_\pm P_{-n}^0. \quad (\text{A-4-2})$$

Cette équation se démontre par récurrence, en utilisant les propriétés de commutation de J_+ et J_- avec les opérateurs P_k^m . On peut donc écrire :

$$J_{q_1^\pm}^n = P_0^{\pm n} (P_0^{\mp 1} J_{q_1^\pm} P_{-1}^0)^n P_n^0. \quad (\text{A-4-3})$$

Or, d'après les équations (A-4-1), on a :

$$P_0^{\mp 1} J_{q_1^\pm} P_{-1}^0 = P_0^{\mp 1} J_{q_2^\pm} P_{-1}^0 \mp \delta$$

Comme δ est un scalaire, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 J_{q_1^\pm}^n &= P_0^{\pm n} \left\{ \sum_p (\mp)^p \binom{n}{p} \delta^p (P_0^{\mp 1} J_{q_2^\pm} P_{-1}^0)^{n-p} \right\} P_n^0 \\
 &= P_0^{\pm n} \left\{ \sum_p (\mp)^p \binom{n}{p} \delta^p P_0^{\mp(n-p)} J_{q_2^\pm}^{n-p} P_{-(n-p)}^0 \right\} P_n^0 \\
 &= \sum_p (\mp)^p \binom{n}{p} \delta^p P_0^{\pm p} J_{q_2^\pm}^{n-p} P_p^0 \quad . \quad (A-4-4)
 \end{aligned}$$

Par conséquent, on a :

$$J_{q_1^\pm}^n P_k^m = \sum_p (\mp)^p \binom{n}{p} \delta^p P_0^{\pm p} J_{q_2^\pm}^{n-p} P_{k+p}^m \quad .$$

On utilise alors la formule (4-3-11) ou (4-3-12) ; les coefficients qui y interviennent peuvent s'écrire $B_+^i(m)$ ou $B_-^i(m-i)$ mais ils ne correspondent pas à la représentation à laquelle appartient P_k^m , mais à celle à laquelle appartient P_{k+p}^m . Pour éviter toute ambiguïté nous utilisons leur forme explicite :

$$\begin{aligned}
 \text{pour } B_+^i(m) &: \prod_{\sigma=1, i} (k+p+m+\sigma-1) \\
 \text{pour } B_-^i(m-i) &: \prod_{\sigma=1, i} (k+p-m+i-\sigma) = \prod_{\sigma=1, i} (k+p-m+\sigma-1)
 \end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi :

$$J_{q_1^\pm}^n P_k^m = \sum_{p, i} (\mp)^p \delta^p \binom{n}{p} \binom{n-p}{i} \prod_{\sigma=1, i} (k+p+m+\sigma-1) P_{k+p}^{m \pm i \pm p} J_{q_2^\pm}^{n-p-i} \quad (A-4-5)$$

ou encore :

$$J_{q_1^\pm}^n P_k^m = \sum_{p, \ell} (\mp)^p \delta^p \frac{n!}{p!(\ell-p)!(-n-\ell)!} \prod_{\sigma=1, \ell-p} (k+p+m+\sigma-1) P_{k+p}^{m \pm \ell} J_{q_2^\pm}^{n-\ell} \quad . \quad (A-4-6)$$

De manière analogue, en utilisant les équations (4-3-13) et (4-3-14) au lieu de (4-3-11) et (4-3-12), on obtient :

$$P_k^m J_{q_1^\pm}^n = \sum_{p,\ell} \binom{-}{+}^p (-)^{\ell-p} \delta^p \frac{n!}{p!(\ell-p)!(n-\ell)!} \\ \times \prod_{\sigma=1, \ell-p} (k+p^\pm m + \sigma - 1) J_{q_2^\pm}^{n-\ell} P_{k+p}^{m^\pm \ell} . \quad (\text{A-4-7})$$

Dans les expressions (A-4-6) et (A-4-7), l'échange de q_1 et q_2 correspond simplement à un changement de signe de δ .

Au terme de cet exposé, je remercie tout d'abord MM. les Professeurs P. Jacquinet et R. Chabbal de m'avoir accueillie au Laboratoire Aimé Cotton.

Que M. Kastler, mon parrain de recherches au C. N. R. S., trouve également ici l'expression de mes sentiments respectueux et reconnaissants.

Je suis heureuse d'avoir l'occasion d'exprimer ma profonde gratitude envers Serge Feneuille, qui m'a initiée à la théorie des groupes et m'a proposé ce thème de recherches. C'est grâce aux conseils, aux critiques et aux encouragements qu'il m'a prodigués que j'ai pu mener à bien le travail entrepris.

Le point de départ de cette thèse est une étude de Lloyd Armstrong, qui, lors de ses séjours au Laboratoire Aimé Cotton m'a soutenue et guidée de ses conseils bienveillants. Je lui en suis profondément reconnaissante.

Mes remerciements vont aussi à Jacques Bauche, pour une lecture critique du manuscrit qui m'a été d'une grande aide et à Mme Fontaine, qui a dactylographié ce texte avec compétence et célérité.

Enfin, je tiens à souligner que l'ambiance sympathique et chaleureuse que j'ai trouvée au Laboratoire Aimé Cotton m'a été extrêmement précieuse et j'en remercie tous les membres du laboratoire.

REFERENCES

- J. S. Alper (1970) Phys. Rev. A 2, 1603.
- L. Armstrong, Jr. (1970) J. Physique (Paris) 31, C4-17.
- L. Armstrong, Jr. (1971) J. Math. Phys. 12, 953.
- L. Armstrong, Jr. (1971) Phys. Rev. A 3, 1546.
- L. Armstrong, Jr (1972) : voir Dunlap et Armstrong (1972).
- H. Bacry et J. L. Richard (1967) J. Math. Phys. 8, 2230.
- M. Badawi, N. Bessis, G. Bessis et G. Hadinger (1973)
Phys. Rev. A 8, 727.
- G. A. Baker (1956) Phys. Rev. 103, 1119.
- V. Bargmann (1936) Z. Physik 99, 576.
- A. O. Barut (1965) Phys. Rev. B 139, 1433.
- A. O. Barut (1971) "Atoms with magnetic charges as models of hadrons"
in Topics in Mod. Physics, a tribute to
E. U. Condon, Colorado U. Press (Boulder, Colorado).
- A. O. Barut (1972) Phys. Lett. 38 B, 97.
- A. O. Barut et C. Fronsdal (1965) Proc. Roy. Soc. (London) A 287, 532.
- A. O. Barut et R. Rączka (1965) Proc. Roy. Soc. (London) A 287, 519.
- A. O. Barut et H. Kleinert (1967) Phys. Rev. 156, 1541 et 1546,
Phys. Rev. 157, 1180 et Phys. Rev. 160, 1149 .
- A. O. Barut et W. Rasmussen (1973) J. Phys. B 6, 1695 et 1713.

- M. H. Boon et T. H. Seligman (1973) J. Math. Phys. 14, 1224.
- P. H. Butler, P. E. H. Minchin et P. G. Wybourne (1971)
Atomic Data 3, 154.
- E. Chacon, M. Moshinsky, O. Navarro et C. Wulfman (1971)
Phys. Rev. A 3, 166.
- M. J. Cunningham (1972a) J. Math. Phys. 13, 33.
- M. J. Cunningham (1972b) J. Math. Phys. 13, 1108.
- B. I. Dunlap et L. Armstrong, Jr. (1972) Phys. Rev. A 6, 1370.
- C. Eckart (1930) Rev. of Mod. Phys. 2, 305.
- A. R. Edmonds (1957) "Angular Momentum in Quantum Mechanics"
Princeton University Press, Princeton N. J.
- J. P. Elliott (1958) Proc. Roy. Soc. A 245, 128.
- S. Feneuille (1967) J. Physique (Paris) 28, 61.
- R. P. Feynmann et M. Gell-Mann (1958) Phys. Rev. 109, 193.
- B. H. Flowers (1952) Proc. Roy. Soc. A 212, 248.
- V. Fock (1935) Z. Physik 98, 145.
- C. Fronsdal (1967) Phys. Rev. 156, 1665.
- M. Gell-Mann (1962) Phys. Rev. 125, 1067.
- S. Goshen et H. L. Lipkin (1959) Ann. Phys. (New York) 6, 301.
- S. Haroche (1971) Ann. de Physique 6, 189 et 327.
- A. Hautot (1970) Physica 48, 609.
- A. Hautot (1972) J. Math. Phys. 13, 710.
- T. G. Haskell et B. G. Wybourne (1972) Nuovo Cimento 12B, 185.
- T. G. Haskell et B. G. Wybourne (1973)
Proc. Roy. Soc. (London) A 334, 541.

- W. J. Holman et L. C. Biedenharn, Jr. (1966)
Ann. Phys. (New York) 39, 1.
- W. J. Holman et L. C. Biedenharn, Jr. (1968)
Ann. Phys. (New York) 47, 205.
- L. Infeld et T. E. Hull (1951) Rev. of Mod. Phys. 23, 21.
- H. A. Jahn (1950) Proc. Roy. Soc. (London) A 205, 192.
- J. M. Jauch et E. L. Hill (1940) Phys. Rev. 57, 641.
- B. R. Judd (1963) "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy"
McGraw-Hill, New York.
- H. M. Kleinert (1968) Fortschr. Physik 16
- G. F. Koster (1958) Phys. Rev. 109, 227.
- D. Layzer (1959) Ann. Phys. (New York) 8, 271.
- H. H. Marvin (1947) Phys. Rev. 71, 102.
- W. Miller, Jr. (1968) "Lie Theory and Special Functions"
Academic Press, New York and London.
- W. Miller, Jr. (1972) J. Math. Phys. 13, 648.
- P. M. Morse et H. Feshbach (1953) "Methods of theoretical Physics"
McGraw-Hill, New York.
- M. Moshinsky et C. Quesne (1971) J. Math. Phys. 12, 1772.
- M. Moshinsky, T. H. Seligman et K. B. Wolf (1972)
J. Math. Phys. 13, 901.
- R. Musto (1966) Phys. Rev. 148, 1274.
- Y. Nambu (1967) Phys. Rev. 160, 1171.
- Y. Ne'eman (1961) Nucl. Phys. 26, 222.
- S. Pasternak et R. M. Sternheimer (1962) J. Math. Phys. 3, 1280.

- R. H. Pratt et T. F. Jordan (1966) Phys. Rev. 148, 1276.
- C. Quesne et M. Moshinsky (1971) J. Math. Phys. 12, 1780.
- G. Racah (1942) Phys. Rev. 62, 438.
- G. Racah (1949) Phys. Rev. 76, 1352.
- G. Racah (1965) "Group Theory and Spectroscopy" Ergebnisse der
exakten Naturwiss. 37, Springer Verlag, Berlin.
- A. R. P. Rau (1970) Phys. Rev. A 2, 1600.
- O. Sinanoglu et J. S. Alper (1969) Phys. Rev. 177, 77.
- J. C. Slater (1929) Phys. Rev. 34, 1293.
- E. Schrödinger (1940) Proc. Roy. Irish Acad. A 46, 9.
- H. Ui (1968) Ann. Phys. (New York) 49, 69.
- B. L. Van der Waerden (1932) "Die Gruppentheoretische Methode in
der Quantum Mechanik", Springer Verlag, Berlin.
- K. H. Wang (1970) J. Math. Phys. 11, 2077.
- H. Weyl (1931) "Gruppentheorie und Quantum Mechanik"
(en anglais "Theory of Group and Quantum
Mechanics" Dover, New York).
- E. P. Wigner (1932) "Gruppentheorie" Vieweg und Sohn, Brunswick.
(an anglais "Group Theory and its Application to
Quantum Mechanics of Atomic Spectra" Academic
Press, New York).
- B. G. Wybourne (1970) "Symmetry Principles and Atomic Spectroscopy"
Wiley-Interscience, New-York.
- S. Yanagawa et T. Moriya (1970) J. Math. Phys. 11, 3244.

ANNEXE I

Classification
Physics Abstracts
 02.00, 13.00

APPLICATION DE LA MÉTHODE DE FACTORISATION ET DE LA THÉORIE DES GROUPES AU TRAITEMENT RELATIVISTE DES FONCTIONS RADIALES HYDROGÉNOÏDES

A. CRUBELLIER et S. FENEUILLE

Laboratoire Aimé Cotton, C. N. R. S. II, Orsay, Essonne

(Reçu le 18 décembre 1970)

Résumé. — On montre que l'expression relativiste des fonctions radiales des états liés d'un atome hydrogénoïde au moyen de solutions d'un problème de Kepler généralisé permet, par l'emploi simultané de la méthode de factorisation et de la théorie des groupes $[O(2, 1)]$, d'obtenir un certain nombre de résultats simples sur les éléments de matrice radiaux, diagonaux relativement à l'énergie, des opérateurs r^K et r^{-K} . Ces résultats sont appliqués au traitement relativiste de l'effet Zeeman (correction de Breit-Margenau) et de la structure hyperfine (corrections de Casimir).

Abstract. — It is shown that the relativistic expression of bound states hydrogenic radial functions by means of generalized Kepler problem solutions allows us, by simultaneously using factorization method and group theory $[O(2, 1)]$, to obtain some simple results on radial matrix elements of r^K and r^{-K} , diagonal according to the energy. These results are applied to the relativistic treatment of Zeeman effect (Breit-Margenau correction) and hyperfine structure (Casimir corrections).

I. Introduction. — Depuis les premiers travaux de Racah, la théorie des groupes continus joue un rôle très important dans l'étude de la structure atomique, mais en fait, seul fut longtemps considéré l'aspect angulaire du problème, et ce n'est que très récemment que la partie radiale des fonctions d'onde a commencé à être étudiée par la théorie des groupes. Les résultats acquis jusqu'à présent dans cette voie ne concernent d'ailleurs que le traitement non relativiste des états liés des atomes hydrogénoïdes, et le formalisme utilisé ne permet d'étudier que les éléments de matrice des opérateurs r^K et r^{-K} diagonaux relativement à l'énergie [1]. La question est donc très loin d'être résolue dans son ensemble. Parmi les nombreux problèmes qui subsistent, se pose celui de l'extension au cas relativiste des résultats obtenus dans le cas non relativiste. En effet, après les progrès réalisés dans le traitement des corrélations électroniques, l'évaluation des corrections relativistes reste un des problèmes essentiels de la théorie de la structure atomique. Là encore, l'aspect angulaire de la question a été étudié de façon assez détaillée dans le cadre des méthodes de Racah, alors que les parties radiales des fonctions d'onde, même dans le cas simple des atomes hydrogénoïdes, ont été seulement envisagées comme solutions d'équations différentielles et restent ainsi d'un emploi assez malaisé.

Le but de cet article est de montrer que l'expression relativiste des fonctions radiales des états liés d'un atome hydrogénoïde au moyen des solutions d'un

problème de Kepler généralisé [2] permet, par l'emploi simultané de la méthode de factorisation et de la théorie des groupes, d'obtenir un certain nombre de résultats simples sur les éléments de matrice radiaux, diagonaux relativement à l'énergie, des opérateurs r^K et r^{-K} .

Nous rappelons tout d'abord les points essentiels des résultats d'Infeld et Hull [2] qui permettent d'exprimer les fonctions radiales du problème de Dirac-Coulomb à partir de solutions d'un problème de Kepler généralisé (sec. 2). Nous nous intéressons ensuite aux deux factorisations possibles de l'équation radiale d'un problème de Kepler généralisé : 1) factorisation du type F [2] qui conduit à une propriété d'orthogonalité analogue à celle de Pasternack et Sternheimer [3] et à un certain nombre de relations simples entre intégrales radiales (sec. 3), 2) factorisation du type B [2] qui introduit directement la possibilité d'étendre au problème de Kepler généralisé le traitement qui a été proposé par Armstrong [1] dans le cas non relativiste et qui repose sur l'utilisation du groupe non compact $O(2, 1)$ (sec. 4). Enfin, nous présentons divers exemples d'application des résultats à des problèmes physiques particuliers (sec. 5).

II. Fonctions radiales de Dirac-Coulomb et problème de Kepler généralisé. — Si l'on admet que le noyau peut être considéré comme une particule ponctuelle de masse infinie, le traitement relativiste d'un atome hydrogénoïde se réduit à celui d'un électron dans un

champ coulombien. L'équation de Dirac correspondante s'écrit alors [4] :

$$\left\{ -i\hbar(\alpha \cdot \text{grad}) + \beta E_0 - \frac{Ze^2}{r} \right\} |u\rangle = E_u |u\rangle; \quad (1)$$

dans cette expression, (α, β) représente le vecteur de Dirac à quatre composantes, $E_0 = \mu c^2$ est l'énergie

de l'électron au repos, et Ze est la charge du noyau. Les solutions de l'équation (1) peuvent être écrites :

$$|nljm\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{r} G_{nlj} |ljm\rangle \\ \frac{i}{r} F_{nlj} |\bar{l}j\bar{m}\rangle \end{bmatrix} \quad (2)$$

où

$$\bar{l} = 2j - l \quad \text{et} \quad |ljm\rangle = \sum_{m_s, m_l} \left\langle \frac{1}{2} m_s, m_l \middle| jm \right\rangle Y_{lm_l} \chi_{\frac{1}{2}m_s} Y_{l m_l} \quad \text{et} \quad \chi_{\frac{1}{2}m_s}$$

représentant respectivement une harmonique sphérique et un spineur à deux composantes. Les fonctions radiales G_{nlj} et F_{nlj} doivent être normalisées de façon telle que :

$$\int_0^\infty (F_{nlj}^2 + G_{nlj}^2) dr = 1, \quad (3)$$

et vérifient les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} G_{nlj} + \frac{\kappa}{r} G_{nlj} &= \left\{ (1 + \varepsilon) \frac{\mu c}{\hbar} + \frac{\alpha Z}{r} \right\} F_{nlj} \\ \frac{d}{dr} F_{nlj} + \frac{\kappa}{r} F_{nlj} &= \left\{ (1 - \varepsilon) \frac{\mu c}{\hbar} - \frac{\alpha Z}{r} \right\} G_{nlj} \end{aligned} \quad (4)$$

où :

$$\begin{aligned} \kappa &= \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) = \pm \left(l \mp \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right), \\ \varepsilon &= \frac{E}{E_0} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}. \end{aligned}$$

Divers traitements de ce système d'équations sont possibles mais nous ne nous intéressons ici qu'à celui dans lequel on passe par l'intermédiaire d'un problème de Kepler généralisé. Ce dernier est défini par l'équation radiale suivante :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{\lambda(\lambda + 1)}{\rho^2} - \frac{1}{v^2} \right\} R_v^\lambda = 0 \quad (5)$$

où $v = N + \gamma$ et $\lambda = L + \gamma$ ($\gamma > 0$) ; si nous ne considérons que les solutions discrètes, N est un entier positif ou nul, et L est un entier inférieur à N , positif, négatif ou nul. L'équation (5) peut être factorisée de deux manières différentes (B et F), et si l'on pose :

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= (\kappa - \alpha Z)^{1/2}, \quad \gamma_2 = (\kappa + \alpha Z)^{1/2}, \quad \gamma = (\kappa^2 - \alpha^2 Z^2)^{1/2}, \\ a &= \frac{\mu c \varepsilon \alpha Z}{\hbar} \end{aligned}$$

et $v = n - |\kappa| + \gamma$, celle du type F conduit au résultat suivant dû à Infeld et Hull [2] :

$$F_{nlj} = \left\{ \frac{(\varepsilon a/2)^{1/2}}{2\gamma} \right\} [(\gamma_1 + \gamma_2)(\varepsilon \kappa - \gamma)^{1/2} R_v^{\gamma-1}(ar) + (\gamma_2 - \gamma_1)(\varepsilon \kappa + \gamma)^{1/2} R_v^\gamma(ar)] \quad (6a)$$

$$G_{nlj} = \left\{ \frac{(\varepsilon a/2)^{1/2}}{2\gamma} \right\} [(\gamma_2 - \gamma_1)(\varepsilon \kappa - \gamma)^{1/2} R_v^{\gamma-1}(ar) + (\gamma_1 + \gamma_2)(\varepsilon \kappa + \gamma)^{1/2} R_v^\gamma(ar)] \quad (6b)$$

$$\varepsilon = \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{v^2} \right)^{-1/2}. \quad (6c)$$

En conséquence, seuls sont à considérer dans l'équation (5) les cas particuliers $L = 0$ et $L = -1$, mais il est apparu préférable d'étudier les propriétés des fonctions R_v^λ de façon aussi générale que possible avant d'en faire une application particulière au problème de Dirac-Coulomb.

III. Factorisation du type F. — La factorisation du type F permet de définir des opérateurs échelles reliant les diverses solutions de l'équation (5) correspondant à une même valeur de v . Plus précisément, Infeld et Hull [2] ont montré que ces solutions satisfont des relations suivantes :

$$R_v^{\lambda-1} = +\mathcal{J}_v^\lambda R_v^\lambda, \quad (7a)$$

$$R_v^\lambda = -\mathcal{J}_v^\lambda R_v^{\lambda-1}, \quad (7b)$$

$$R_v^{\nu-1} = \left(\frac{2}{v} \right)^{\nu+1/2} \Gamma^{-1/2}(2\nu+1) \rho^\nu \exp\left(-\frac{\rho}{v}\right), \quad (7c)$$

où :

$$\pm \mathcal{J}_v^\lambda = A_{v\lambda}^{-1} \left\{ \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{\lambda} \pm \frac{d}{d\rho} \right\} \quad (7d)$$

et

$$A_{v\lambda} = \frac{(v^2 - \lambda^2)^{1/2}}{(v\lambda)}. \quad (7e)$$

Or, celles-ci ne sont que la généralisation directe ($l \rightarrow \lambda, n \rightarrow v$) des équations analogues satisfaites par les solutions de l'équation radiale non relativiste du problème de Kepler. Ces équations ont permis récemment à l'un d'entre nous [5] d'obtenir des relations simples entre intégrales radiales hydrogénéoïdes et de démontrer en particulier la propriété d'orthogonalité trouvée par Pasternack et Sternheimer [3]. La généralisation est immédiate, et l'on obtient en particulier, si K est inférieur à $\lambda + \lambda' + 1$,

$$\begin{aligned} &- 2KA_{v\lambda+1} \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-(K+1)} R_v^{\lambda'+1} d\rho \\ &- \frac{2K}{\lambda+1} \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-(K+1)} R_v^\lambda d\rho \\ &+ [\lambda'(\lambda'+1) - \lambda(\lambda+1) + K(2\lambda+1-K)] \\ &\times \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-(K+2)} R_v^\lambda d\rho \\ &+ \left(\frac{1}{v'^2} - \frac{1}{v^2} \right) \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-K} R_v^\lambda d\rho = 0, \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\begin{aligned}
 & 2KA_{v\lambda} \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-(K+1)} R_v^{\lambda-1} d\rho + \\
 & + \frac{2K}{\lambda} \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-(K+1)} R_v^\lambda d\rho \\
 & + [\lambda'(\lambda' + 1) - \lambda(\lambda + 1) - K(2\lambda + 1 + K)] \\
 & \times \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-(K+2)} R_v^\lambda d\rho \\
 & + \left(\frac{1}{v'^2} - \frac{1}{v^2} \right) \int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-K} R_v^\lambda d\rho = 0. \quad (8b)
 \end{aligned}$$

Le raisonnement par récurrence qui avait permis de démontrer la règle de sélection de Pasternack et Sternheimer [3] est encore valable et nous obtenons :

$$\int_0^\infty R_v^{\lambda'} \rho^{-K} R_v^\lambda d\rho = 0$$

si

$$\begin{cases} 1 < K < |\lambda - \lambda'| + 2 \\ K < \lambda + \lambda' + 3. \end{cases} \quad (9)$$

En outre, en utilisant simultanément les équations (8a) et (8b), on peut montrer que, pour K inférieur à $2\lambda + 1$ et différent de zéro :

$$\begin{aligned}
 & (2\lambda + K - 1) \int_0^\infty R_v^\lambda \rho^{-K} R_v^\lambda d\rho + (K - 1 - 2\lambda) \times \\
 & \times \int_0^\infty R_v^{\lambda-1} \rho^{-K} R_v^{\lambda-1} d\rho \\
 & + 2(K - 1) \left[\frac{v}{(v^2 - \lambda^2)^{1/2}} \right] \times \\
 & \times \int_0^\infty R_v^\lambda \rho^{-K} R_v^{\lambda-1} d\rho = 0. \quad (10)
 \end{aligned}$$

Cette équation est particulièrement intéressante dans le cas : $\lambda = \gamma$ ($L = 0$). En effet, dans un traitement relativiste, les éléments de matrice radiaux de r^{-K} , diagonaux relativement à v , sont de divers types, mais dans tous les cas, les équations (6a) et (6b) montrent qu'ils peuvent être obtenus à partir de :

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty R_v^\gamma(ar) r^{-K} R_v^\gamma(ar) dr, \\
 & \int_0^\infty R_v^{\gamma-1}(ar) r^{-K} R_v^{\gamma-1}(ar) dr
 \end{aligned}$$

et

$$\int_0^\infty R_v^\gamma(ar) r^{-K} R_v^{\gamma-1}(ar) dr.$$

Or, si K est inférieur à $2\gamma + 1$, l'équation (10) permet d'exprimer l'intégrale radiale non diagonale à partir des seules valeurs moyennes de r^{-K} dont l'expression littérale peut être obtenue sans difficulté, comme nous le verrons dans la section suivante.

IV. Factorisation du type B. Théorie des groupes. — a) RAPPELS SUR LA FACTORISATION DU TYPE B ET SES CONSÉQUENCES. — Si l'on fait les changements de variables et de fonctions suivants dans l'équation (5) :

$$\zeta = \frac{2\rho}{v}, \quad \chi = \text{Log } \zeta,$$

$$Q_v^\lambda(\zeta) = P_v^\lambda(\chi) = \mathcal{N}_{v\lambda} \zeta^{-1/2} R_v^\lambda(\rho),$$

celle-ci devient [2] :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\chi^2} + v \exp(\chi) - \left(\lambda + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{\exp(2\chi)}{4} \right\} P_v^\lambda(\chi) = 0. \quad (11)$$

Cette équation, comme bien sûr l'équation (5), reste invariante dans les substitutions suivantes :

$$v \rightarrow -v, \quad \lambda + \frac{1}{2} \rightarrow -\lambda - \frac{1}{2}.$$

Nous n'étudierons ici que les solutions correspondant à v et $\lambda + \frac{1}{2}$ positifs.

L'équation (11), d'après Infeld et Hull [2], peut être factorisée suivant le type B ; dans ce cas, c'est $-(\lambda + \frac{1}{2})^2$ qui joue le rôle d'une valeur propre alors que c'était $-1/v^2$ dans la factorisation du type F. Les opérateurs échelles sont à présent :

$$\pm H_v = \frac{\exp(\chi)}{2} - v + \frac{1}{2} \pm \frac{d}{d\chi}, \quad (12)$$

et ils relient cette fois les diverses solutions de l'équation (11) correspondant à une même valeur de λ :

$$\begin{aligned}
 +H_v P_v^\lambda &= \{ -(\lambda + \frac{1}{2})^2 + (v - \frac{1}{2})^2 \}^{1/2} P_{v-1}^\lambda = \\
 &= \{ (v + \lambda)(v - \lambda - 1) \}^{1/2} P_{v-1}^\lambda, \quad (13a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -H_{v+1} P_v^\lambda &= \{ -(\lambda + \frac{1}{2})^2 + (v + \frac{1}{2})^2 \}^{1/2} P_{v+1}^\lambda = \\
 &= \{ (v - \lambda)(v + \lambda + 1) \}^{1/2} P_{v+1}^\lambda. \quad (13b)
 \end{aligned}$$

A partir des résultats généraux de la référence [2], on peut montrer que les solutions P_v^λ de carré sommable (pour $\lambda + \frac{1}{2}$ et v positifs) sont telles que $v - \lambda - 1$ soit entier, positif ou nul. Ces dernières, si nous choisissons la variable ζ , s'expriment d'ailleurs simplement en fonction des polynômes de Laguerre ; plus précisément, en imposant la condition de normalisation suivante :

$$\int_{-\infty}^\infty \{ P_v^\lambda(\chi) \}^2 d\chi = \int_0^\infty \{ Q_v^\lambda(\zeta) \}^2 \frac{d\zeta}{\zeta} = 1,$$

on obtient :

$$\begin{aligned}
 Q_v^\lambda(\zeta) &= \left\{ \frac{(v - \lambda - 1)!(2\lambda + 1)}{\Gamma^3(v + \lambda + 1)} \right\}^{1/2} \times \\
 &\times \exp\left(-\frac{\zeta}{2}\right) \zeta^{\lambda+1/2} L_{v-\lambda-1}^{2\lambda+1}(\zeta); \quad (14)
 \end{aligned}$$

dans ce cas, le facteur $\mathcal{N}_{v\lambda}$ a pour expression :

$$\mathcal{N}_{v\lambda} = v(2\lambda + 1)^{1/2}.$$

b) INTRODUCTION DU FORMALISME DE LA THÉORIE DES GROUPES. — Les résultats précédents permettent d'introduire le formalisme de la théorie des groupes : en effet, le domaine de variation de ν , lorsque λ est donné, montre que les fonctions correspondantes P_ν^λ forment la base d'une représentation d'un groupe $O(2, 1)$ [6] et, de plus, les générateurs de ce groupe s'obtiennent aisément à partir des opérateurs $\pm H$ introduits précédemment.

Si l'on pose :

$$\varphi_\nu^\lambda(\chi, \tau) = (2\pi)^{-1/2} \exp(i\nu\tau) P_\nu^\lambda(\chi) \quad (15)$$

$$J_3 = -i\partial_\tau, \quad (16a)$$

$$J_\pm = \exp(\pm i\tau) \left\{ \mp \frac{\exp(\chi)}{2} \mp i\partial_\tau + \frac{1}{2} + \partial_\chi \right\}, \quad (16b)$$

on montre que :

d'une part,

$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm, \quad (17a)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_3, \quad (17b)$$

et d'autre part,

$$J_3 \varphi_\nu^\lambda = \nu \varphi_\nu^\lambda, \quad (18a)$$

$$J_\pm \varphi_\nu^\lambda = \pm \{ (\nu \mp \lambda) (\nu \pm \lambda \pm 1) \}^{1/2} \varphi_{\nu \pm 1}^\lambda; \quad (18b)$$

ces résultats, à un changement de variables près, sont rigoureusement identiques à ceux de la référence [1]. Comme dans celle-ci, nous définissons un espace de Hilbert engendré par les fonctions φ_ν^λ grâce au produit scalaire suivant :

$$(\varphi_\nu^\lambda | \varphi_{\nu'}^{\lambda'}) = \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_\nu^{\lambda*} \varphi_{\nu'}^{\lambda'} d\tau d\chi; \quad (19)$$

ce dernier est d'ailleurs égal à : $\delta(\nu, \nu') \delta(\lambda, \lambda')$ puisque :

$$\begin{aligned} (\varphi_\nu^\lambda | \varphi_{\nu'}^{\lambda'}) &= \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} \exp(i\nu'\tau - i\nu\tau) d\tau \int_{-\infty}^{\infty} P_\nu^\lambda(\chi) P_{\nu'}^{\lambda'}(\chi) d\chi \\ &= \delta(\nu, \nu') \int_{-\infty}^{\infty} P_\nu^\lambda(\chi) P_{\nu'}^{\lambda'}(\chi) d\chi, \end{aligned}$$

et que l'on a alors deux fonctions P_ν^λ , fonctions propres d'un opérateur hermitique, qui sont orthogonales si les valeurs propres associées λ et λ' sont différentes. Avec ce produit scalaire :

$$(J_+ \varphi_\nu^\lambda | \varphi_{\nu'}^{\lambda'}) = -(\varphi_\nu^\lambda | J_- \varphi_{\nu'}^{\lambda'}), \quad (20)$$

et en conséquence, les fonctions φ_ν^λ correspondant à une même valeur de λ forment la base d'une représentation irréductible unitaire d'un groupe $O(2, 1)$. La valeur propre correspondante de l'opérateur de Casimir :

$$Q = J_- J_+ + J_3^2 + J_3 \quad (21)$$

est égale à $\lambda(\lambda + 1)$ et le spectre de J_3 est : $\nu = N + \gamma \geq \lambda + 1$ (N entier). Dans la notation de

Barut-Fronsdal [6], il s'agit de la représentation $D^+(-\lambda - 1)$, que l'on notera ici $D_+(\lambda)$ pour des raisons de commodité.

Par ailleurs, on peut montrer, comme dans la référence [1], que les opérateurs $\exp(iq\tau + K\chi)$ [ou $\exp(iq\tau) \zeta^K$] sont des opérateurs tensoriels vis-à-vis de l'algèbre de groupe définie ci-dessus, puisqu'en effet :

$$[J_3, \exp(iq\tau + K\chi)] = q \exp(iq\tau + K\chi), \quad (22a)$$

$$\begin{aligned} [J_\pm, \exp(iq\tau + K\chi)] &= \\ &= (K \pm q) \exp(iq\tau \pm i\tau + K\chi). \end{aligned} \quad (22b)$$

Les opérateurs tensoriels irréductibles correspondants sont obtenus en imposant les conditions suivantes :

$K > 0 :$

$$\begin{cases} q \geq K, q - K \text{ entier, représentation } \mathcal{D}^+(-K), \\ q \leq -K, q + K \text{ entier, représentation } \mathcal{D}^-(-K), \end{cases}$$

$K < 0 : |q| \leq -K, K$ entier

ou demi-entier, représentation $\mathcal{D}(-K)$;

toutes ces représentations sont non unitaires [6].

Nous nous trouvons donc en présence d'une algèbre de groupe identique à celle qui a été introduite par Armstrong [1] dans l'étude des fonctions radiales hydrogénoïdes non relativistes ; nous utilisons le même produit scalaire pour définir un espace de Hilbert, et finalement, la seule différence réside dans le fait que nous considérons toutes les représentations $D_+(\lambda)$ (λ quelconque $> -\frac{1}{2}$) et non plus seulement les représentations $D_+(l)$ (l entier > 0). Cependant, le processus de calcul de la référence [1] se généralise point par point, nous ne le répéterons donc pas ici, et nous reporterons seulement les résultats obtenus dans le paragraphe suivant.

c) RÉSULTATS. — Les intégrales radiales entre fonctions R_ν^λ , des opérateurs ρ^K et ρ^{-K} ($K > 0$) qui sont diagonales en ν peuvent s'exprimer en fonctions d'éléments de matrice d'opérateurs tensoriels du type précédent. Pour ρ^K , cependant, l'opérateur correspondant à une valeur nulle de q (seul cas qui nous intéresse) appartient à une représentation non totalement réductible ; le traitement sera donc moins complet que pour les opérateurs ρ^{-K} .

Dans ce dernier cas, une légère simplification apparaît par rapport aux résultats d'Armstrong [1]. En effet, si λ n'est ni entier ni demi-entier (ce qui sera toujours le cas dans l'application au problème de Dirac-Coulomb), la décomposition du produit de Kronecker $\mathcal{D}(-K) \times D_+(\lambda)$ se réduit à :

$$\sum_{k=0}^{2K} \mathcal{D}_+(\lambda - K + k).$$

Dans cette décomposition, seules sont unitaires les représentations pour lesquelles $k - K + \lambda + 1$ est positif ; par ailleurs, elles n'admettent pour bases les fonctions $\varphi_\nu^{\lambda'}$ ($\lambda' = \lambda - K + k$) qu'à la condition que

$\lambda' + \frac{1}{2}$ soit positif. En conséquence, le développement suivant :

$$|\varphi_v^{\lambda'}\rangle = \sum_{v,q} A(\lambda v, Kq | \lambda' v') t_q^{(K)} |\varphi_v^\lambda\rangle,$$

où les $t_q^{(K)}$ sont définis par :

$$t_q^{(K)} = (-1)^q \frac{K!}{\{(K+q)!(K-q)!\}^{1/2}} \exp(iq\tau - K\chi), \tag{23}$$

peut être toujours écrit si :

$$\lambda' + \frac{1}{2} > 0, \quad \lambda - K \leq \lambda' \leq \lambda + K.$$

A partir de là, tous les résultats de la référence [1]

restent valables si l'on effectue les remplacements suivants :

$$n \rightarrow v, \quad l \rightarrow \lambda, \quad x! \rightarrow \Gamma(x+1).$$

On dispose ainsi pour évaluer l'intégrale radiale de ρ^{-K} diagonale en v des formules suivantes :

$$\int_0^\infty R_v^{\lambda'}(\rho) \rho^{-K} R_v^\lambda(\rho) d\rho = \left(\frac{2}{v}\right)^K \frac{1}{2v \{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)\}^{1/2}} (\varphi_v^{\lambda'} | t_0^{(K-2)} | \varphi_v^\lambda),$$

$$(\varphi_v^{\lambda'} | t_q^{(K)} | \varphi_v^\lambda) = A(\lambda v, Kq | \lambda' v') (\lambda' \parallel t^{(K)} \parallel \lambda) \tag{24}$$

où :

$$A(\lambda v, Kq | \lambda' v') = (-1)^{K+q} \times$$

$$\times \left\{ \frac{\Gamma(\lambda + \lambda' - K + 1)(K + \lambda' - \lambda)!(K + \lambda - \lambda')! \Gamma(v + \lambda + 1)(v' - \lambda' - 1)!(2\lambda' + 1)}{\Gamma(K + \lambda + \lambda' + 2)(K + q)!(K - q)! \Gamma(v' + \lambda' + 1)(v - \lambda - 1)!} \right\}^{1/2}$$

$$\times \sum_x (-1)^x \left\{ \frac{(K + v - \lambda' - 1 - x)! \Gamma(\lambda + v' + K + 1 - x)}{x!(K + \lambda - \lambda' - x)! \Gamma(v + \lambda + 1 - x)(v' - \lambda' - 1 - x)!} \right\}$$

et

$$(\lambda' \parallel t^{(K)} \parallel \lambda) = (-1)^K K! \left\{ \frac{(2\lambda + 1) \Gamma(\lambda + \lambda' - K + 1)}{(K + \lambda - \lambda')!(K + \lambda' - \lambda)! \Gamma(\lambda + \lambda' + K + 2)} \right\}^{1/2}.$$

Les coefficients $A(\lambda v, Kq | \lambda' v')$ ne sont différents de zéro qu'à la condition suivante :

$$K - 2 \geq |\lambda' - \lambda|;$$

on retrouve donc ainsi la règle de sélection de Pasternack et Sternheimer généralisée, donnée dans la section 3. En outre, il est important de signaler que la quasi-identité de la forme algébrique des coefficients $A(\lambda v, Kq | \lambda' v')$ et des coefficients de Clebsch-Gordan du groupe $O(3)$ trouvée initialement par Armstrong [1] subsiste ici, et, quand elles sont connues [7], on peut utiliser les expressions littérales de ces coefficients de Clebsch-Gordan correspondant à une valeur donnée de K .

En ce qui concerne les opérateurs ρ^K , nous ren-

controns, comme nous l'avons signalé plus haut, la même difficulté qu'Armstrong [1]. Il est cependant possible d'étudier le cas particulier $q = 0$, ce qui conduit aux résultats suivants :

$$\int_0^\infty R_v^{\lambda'}(\rho) \rho^K R_v^\lambda(\rho) d\rho = \left(\frac{v}{2}\right)^K \frac{1}{2v \{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)\}^{1/2}} (\varphi_v^{\lambda'} | p_0^{(K+1)} | \varphi_v^\lambda),$$

$$(\varphi_v^{\lambda'} | p_0^{(K)} | \varphi_v^\lambda) = C(\lambda v, K0 | \lambda' v') (\lambda' \parallel p^{(K)} \parallel \lambda), \tag{25}$$

où :

$$p_q^{(K)} = \zeta^{K+1} \exp(iq\tau),$$

$$C(\lambda v, K0 | \lambda' v') = \left\{ \frac{\Gamma(v + \lambda + 1)(v - \lambda - 1)!(v - \lambda' - 1)!}{\Gamma(v + \lambda' + 1)} \right\} \times$$

$$\times \sum_t \frac{(K - \lambda' + v - 1 - t)!}{(K + \lambda' - v + 1 + t)! \Gamma(v + \lambda - t + 1) t! (v - \lambda' - 1 - t)! (v - \lambda - 1 - t)!},$$

et

$$(\lambda' \parallel p^{(K)} \parallel \lambda) = (-1)^{\lambda'-\lambda} \{(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)\}^{1/2} \frac{(K + \lambda' - \lambda)! \Gamma(K + \lambda + \lambda' + 2)}{(\lambda' - \lambda)! K!}.$$

Il n'y a plus ici aucune règle de sélection.

Une dernière remarque s'impose : toutes les formules écrites ci-dessus peuvent être regardées comme une généralisation directe des résultats d'Armstrong [1], valables pour les fonctions d'onde radiales hydrogénéoïdes non relativistes ; on pourra donc, sans passer à nouveau par l'intermédiaire de la théorie des groupes, utiliser les formules des intégrales radiales hydrogénéoïdes, et en particulier celles des valeurs moyennes de ρ^K et ρ^{-K} , en effectuant les changements suivants : $n \rightarrow \nu$, $l \rightarrow \lambda$.

V. Application au traitement relativiste des atomes hydrogénéoïdes. — Les éléments de matrice radiaux des opérateurs r^K et r^{-K} apparaissent dans de nombreux problèmes physiques particuliers et les résultats obtenus dans les sections précédentes sont susceptibles de nombreuses applications. Parmi celles-ci, nous avons choisi l'effet Zeeman et la structure hyperfine.

En ce qui concerne l'effet Zeeman, le facteur de Landé relativiste a pour expression [8] :

$$g_R(nlj) = \frac{2\mu c}{h} (-1)^{l+j+\frac{1}{2}} \frac{(2j+1)}{2j(j+1)} \int_0^\infty F_{nlj} r G_{nlj} dr.$$

Nos résultats, associés à la relation classique :

$$\langle r \rangle_{nl} = \frac{1}{2} \{ 3n^2 - l(l+1) \},$$

conduisent après quelques manipulations algébriques élémentaires à la relation suivante :

$$\begin{aligned} g_R(nlj) &= (-1)^{l+j+\frac{1}{2}} \frac{(2j+1)(2\kappa-1)}{4j(j+1)} \times \\ &\quad \times \left\{ 1 - \frac{2\kappa}{(2\kappa-1)}(1-\varepsilon) \right\} \\ &= g_{NR}(lj) \left\{ 1 - \frac{2\kappa}{(2\kappa-1)}(1-\varepsilon) \right\}, \end{aligned} \quad (26)$$

où $g_{NR}(lj)$ est la valeur non relativiste du facteur de Landé. Si nous rapprochons ce résultat de celui de Margenau [8] :

$$g_R(nlj) = g_{NR}(lj) \left\{ 1 - \frac{4\kappa}{(2\kappa-1)} \int_0^\infty F_{nlj}^2 dr \right\},$$

nous obtenons :

$$\int_0^\infty F_{nlj}^2 dr = \frac{1}{2}(1-\varepsilon),$$

résultat qui, d'ailleurs, aurait pu être trouvé plus directement à partir des résultats donnés par Infeld et Hull [2]. Quoi qu'il en soit, nous avons ainsi une forme générale de la correction de Breit-Margenau [8] qui s'exprime à l'aide des seuls nombres quantiques. Rappelons que celle-ci est toujours négative, et que, même pour les atomes très lourds, elle ne dépasse pas, en valeur absolue, quelque 10^{-3} . Pour le niveau fondamental ($7s^2S_{1/2}$) du Francium par exemple, l'application de la formule (26) conduit à une déviation

de $-5,8 \times 10^{-3}$ par rapport à la valeur non relativiste ($g = 2$) si nous ne tenons compte d'aucun effet d'écran ($Z = 87$).

Dans le cas de la structure hyperfine (dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique), il intervient les deux types d'intégrales suivants [9] :

$$\int_0^\infty F_{nlj'} r^{-2} G_{nlj} dr \quad \text{et} \quad \int_0^\infty (F_{nlj'}^2 + G_{nlj}^2) r^{-3} dr.$$

Si j est égal à j' , notre formalisme permet d'évaluer les deux intégrales précédentes et nous obtenons :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty F_{nlj} r^{-2} G_{nlj} dr &= \left\{ \frac{a^2 \varepsilon \alpha Z (2\varepsilon\kappa - 1)}{\gamma \nu^3 (4\gamma^2 - 1)} \right\}, \quad (27) \\ \int_0^\infty (F_{nlj}^2 + G_{nlj}^2) r^{-3} dr &= \\ &= \frac{a^3 \varepsilon \kappa}{2\gamma^3 \nu^3} \left\{ \frac{(\varepsilon\kappa - \gamma)}{(\gamma - \frac{1}{2})(\gamma - 1)} + \frac{(\varepsilon\kappa + \gamma)}{(\gamma + \frac{1}{2})(\gamma + 1)} \right\} + \\ &+ \frac{2a^3 \varepsilon \alpha Z}{\gamma^2 \nu^3 (4\gamma^2 - 1)} \{ (\varepsilon^2 \kappa^2 - \gamma^2)(\nu^2 - \gamma^2) \}^{1/2} \end{aligned} \quad (28)$$

Si nous appliquons l'équation (27) au cas d'une orbitale $5p$ ($j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$), nous obtenons pour $Z = 50$ (cas de Xel) :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty F_{5p1/2} r^{-2} G_{5p1/2} dr &= 2,6858 \frac{\hbar}{2\mu c} \langle r^{-3} \rangle_{5p}, \\ \int_0^\infty F_{5p3/2} r^{-2} G_{5p3/2} dr &= -1,0651 \frac{\hbar}{2\mu c} \langle r^{-3} \rangle_{5p} \end{aligned}$$

alors que le traitement approché de Casimir [10] conduit respectivement à :

$$2,6116 \frac{\hbar}{2\mu c} \langle r^{-3} \rangle_{5p}$$

et

$$-1,0545 \frac{\hbar}{2\mu c} \langle r^{-3} \rangle_{5p}.$$

Les différences bien qu'assez faibles ne sont pas cependant négligeables.

VI. Conclusion. — Partant des méthodes de factorisation décrites par Infeld et Hull, et de travaux récents sur l'application de la théorie des groupes au problème des fonctions radiales, nous avons développé un formalisme qui conduit à un certain nombre de résultats généraux et simples, susceptibles d'applications diverses dans le traitement relativiste des atomes hydrogénéoïdes. De nombreuses difficultés subsistent cependant ; en particulier, le problème des éléments de matrice non diagonaux n'est pas résolu et il reste la question de savoir dans quelle mesure les résultats

valables pour les atomes hydrogénoïdes peuvent être utiles à l'étude des atomes à plusieurs électrons. Ce travail doit donc être considéré comme une contribution à l'étude de ce vaste et intéressant problème que constitue l'étude des fonctions radiales atomiques au moyen de la théorie des groupes.

Remerciements. — Nous tenons à remercier ici le Professeur Lloyd Armstrong Jr. pour la communication, avant publication, de son manuscrit sur la théorie des groupes et les fonctions radiales, ainsi que pour les discussions fructueuses que nous avons eues ensemble sur ce sujet.

Bibliographie

- [1] ARMSTRONG (L.), *Suppl. J. Physique*, 1970, C-4, 5.
 - [2] INFELD (L.) et HULL (T. E.), *Rev. Mod. Phys.*, 1951, 23, 21.
 - [3] PASTERNAK (S.) et STERNHEIMER (R. M.), *J. Math. Phys.*, 1962, 3, 1280.
 - [4] Pour toute référence à ce sujet, voir par exemple : BETHE (H. A.) et SALPETER (E. E.), « Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms », Springer-Verlag, Berlin, 1957.
 - [5] FENEUILLE (S.), *C. R. Acad. Sci., Paris*, 1970, B 271, 992.
 - [6] BARUT (A. O.) et FRONSDAL (C.), *Proc. Roy. Soc.*, 1965, A 287, 532.
 - [7] EDMONDS (A. R.), « Angular Momentum in Quantum Mechanics », Princeton University Press, Princeton, 1957.
 - [8] MARGENAU (H.), *Phys. Rev.*, 1940, 57, 383.
 - [9] CASIMIR (H. B. G.), « On the Interaction Between Atomic Nuclei And Atoms », Freeman and Co., San Francisco, 1963.
 - [10] KOPFERMANN (H.), « Nuclear Moments », Academic Press, New York, 1958.
-

ANNEXE II

NON-COMPACT GROUPS AND THE HARMONIC OSCILLATOR*
by A. Crubellier and S. Feneuille

I INTRODUCTION

For many years, Second Quantization had played a very important role in the theory of Atomic and Nuclear Structure, but its field of application became much wider when the tensorial character of fermion creation and annihilation operators was examined in the orbital, spin and quasi-spin spaces¹. In particular, the use of this tensorial character and of the standard Racah tensor algebra² is the most natural way to obtain the various Lie groups with respect to which the fermion states have well-defined symmetry properties³. In this paper, we show that it is possible to study the tensorial character in the orbital and quasi-spin spaces of spinless boson creation and annihilation operators (the generalization to bosons with spin would be straightforward). By using this tensorial character, it is possible to define double tensors which form various Lie algebras. Under the operations of the corresponding real Lie groups, the boson states have well-defined symmetry properties, and this allows us to show that, in three dimensions, the states of the harmonic oscillator can be studied according to their transformation properties with respect to the various groups of the chains:

$$\text{Sp}(6) \begin{cases} \rightarrow \text{SO}(3) \times \text{SO}(2,1) \\ \rightarrow \text{SU}(3) \rightarrow \text{SO}(3) \end{cases}$$

**While this paper was being prepared, we received two preprints (submitted to J. Math. Phys.) by M. Moshinsky and C. Quesne in which a different presentation of essentially the same problem is given.*

The group $SO(2,1)$, though not purely radial in character, is very similar to that introduced by Armstrong⁴ to study the radial wave-functions of the harmonic oscillator, in three dimensions, and it allows us to recover the results of Armstrong in a very natural way.

II TENSORIAL CHARACTER OF BOSON CREATION AND ANNIHILATION OPERATORS

We consider $2k + 1$ boson creation operators:

$b_0^\dagger, b_{\pm 1}^\dagger, \dots, b_{\pm k}^\dagger$ and $2k + 1$ boson annihilation operators $b^0, b^{\pm 1}, \dots, b^{\pm k} [(b^q)^\dagger = b_q^\dagger]$ satisfying the following commutation relations:

$$[b_q^\dagger, b_{q'}^\dagger] = 0, [b^q, b^{q'}] = 0, [b^q, b_q^\dagger] = \delta_q^q. \quad (1)$$

If we define K_0, K_+ and K_- , by

$$K_0 = \sum_q q b_q^\dagger b^q, \\ K_{\pm} = \sum_q \{k(k+1) - q(q\pm 1)\}^{\frac{1}{2}} b_{q\pm 1}^\dagger b^q, \quad (2)$$

they satisfy the following commutation relations:

$$[K_0, K_{\pm}] = \pm K_{\pm}, \quad [K_+, K_-] = 2K_0, \quad (3)$$

and it follows that they can be considered as the three components of an angular momentum \mathbf{K} . Moreover, by using equations (1), we find that

$$[K_0, b_q^\dagger] = q b_q^\dagger,$$

Non-compact groups and the harmonic oscillator

$$[K_{\pm}, b_q^{\dagger}] = \{k(k+1) - q(q\pm 1)\}^{\frac{1}{2}} b_{q\pm 1}^{\dagger}, \quad (4)$$

and therefore, we see that the $2k+1$ operators b_q^{\dagger} form the components of a tensor \mathbf{b}^{\dagger} of rank k with respect to \mathbf{K} . For annihilation operators, we must first define:

$$b_q = (-1)^{k-q} b^{-q} \quad (5)$$

to obtain the components of a tensor \mathbf{b} of rank k with respect to \mathbf{K} .

For fermions, the introduction of quasi-spin¹ allows us to regard a creation operator and the corresponding annihilation operator as two aspects of a single entity. For bosons, we follow the same procedure, and we define Q_0 , Q_+ and Q_- by:

$$\begin{aligned} Q_0 &= \frac{1}{4}(2k+1)^{\frac{1}{2}} [\{\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b}\}^{(0)} + \{\mathbf{b}\mathbf{b}^{\dagger}\}^{(0)}] \\ Q_+ &= -\frac{1}{2}(2k+1)^{\frac{1}{2}} \{\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b}^{\dagger}\}^{(0)} \\ \text{and } Q_- &= \frac{1}{2}(2k+1)^{\frac{1}{2}} \{\mathbf{b}\mathbf{b}\}^{(0)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Equations (1) and (5) allow us to derive the following commutation relations:

$$[Q_0, Q_{\pm}] = \pm Q_{\pm}, \quad [Q_+, Q_-] = 2Q_0. \quad (7)$$

Therefore, the operators Q_0 , Q_+ and Q_- can be considered as the three components of an angular momentum \mathbf{Q} . Moreover, by using equations (1) and (5), it is straightforward to show that b_q^{\dagger} and b_q behave under commutation with \mathbf{Q} like the two components of a tensor of rank $\frac{1}{2}$. More precisely, b_q^{\dagger} corresponds to the component: $m_Q = \frac{1}{2}$ and b_q to $m_Q = -\frac{1}{2}$. Thus

if we write:

$$b_q^\dagger = b_{\frac{1}{2}q}^{\left(\frac{1}{2}k\right)} \quad \text{and} \quad b_q = b_{-\frac{1}{2}q}^{\left(\frac{1}{2}k\right)}, \quad (8)$$

we may say that the $(4k+2)$ operators $b_{\frac{1}{2}q}^{\left(\frac{1}{2}k\right)}$ ($\pi = \pm\frac{1}{2}$) form the components of the double tensor $\mathbf{b}^{\left(\frac{1}{2}k\right)}$. With this notation equations (1) reduce now to:

$$[b_{\frac{1}{2}q}^{\left(\frac{1}{2}k\right)}, b_{\frac{1}{2}q'}^{\left(\frac{1}{2}k\right)}] = (-1)^{\frac{1}{2}+k+\pi+q} \delta_{-q}^q \delta_{-\pi}^\pi. \quad (9)$$

\mathbf{Q} being totally scalar with respect to \mathbf{K} , it follows that \mathbf{K} and \mathbf{Q} commute and we can define double tensors:

$$\mathbf{X}^{(KK)} = \{b_{\frac{1}{2}k}^{\left(\frac{1}{2}k\right)} b_{\frac{1}{2}k}^{\left(\frac{1}{2}k\right)}\}^{(KK)}$$

in the ordinary way². In particular, we can rewrite:

$$\mathbf{K} = \{k(k+1)(2k+1)/6\}^{\frac{1}{2}} \mathbf{X}^{(01)}$$

and

$$\mathbf{Q} = \{(2k+1)/8\}^{\frac{1}{2}} \mathbf{X}^{(10)}.$$

However, these double tensors are actually operators only if $K+K$ is odd, since we can show easily from equation (9) that:

$$\mathbf{X}^{(KK)} = -(4k+2)^{\frac{1}{2}} \delta(K,0) \delta(K,0), \quad (10)$$

when $K+K$ is even.

III LIE ALGEBRAS AND LIE GROUPS

Equation (7) and the standard techniques of Racah algebra can be used to derive the following commutation relation:

$$\begin{aligned}
[X_{\pi Q}^{(K K)}, X_{\pi' Q'}^{(K' K')}] &= \sum 2 (-1)^{\pi'' - Q''} \{ 1 - (-1)^{K+K'+K'+K''+K''} \} \\
&\times \{ (2K+1)(2K'+1)(2K''+1)(2K+1)(2K'+1)(2K''+1) \}^{\frac{1}{2}} \\
&\begin{Bmatrix} K & K' & K'' \\ k & k & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} K & K' & K'' \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} K & K' & K'' \\ Q & Q' & -Q'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & K' & K'' \\ \pi & \pi' & -\pi'' \end{pmatrix} X_{\pi'' Q''}^{(K'' K'')}.
\end{aligned} \tag{11}$$

where the sum runs over K'' , K'' , π'' , and Q'' . It follows that the $(2k+1)(4k+3)$ operators $X_{\pi Q}^{(K K)}$ ($K+K$ odd) form a Lie algebra. If we compare equation (11) to the commutation relation of double tensors (with respect to spin and to orbit) for fermions with spin $\frac{1}{2}$ and corresponding to a given subshell $(nl)^2$, it is clear that this algebra is of the type C_{2k+1} , according to the Cartan's classification⁵. Moreover, as in that case, we get:

$$C_{2k+1} \supset B_1^Q \times B_k \supset B_1^Q \times B_1^K, \tag{12}$$

where the Lie algebras B_1^Q , B_k and B_1^K are defined by:

$$B_1^Q: \mathbf{X}^{(10)}; \quad B_k: \mathbf{X}^{(0K)} (K \text{ odd} < 2k); \quad B_1^K: \mathbf{X}^{(01)}.$$

We consider now the normalized N-boson state:

$$\begin{aligned}
&|n_{-k} \dots n_0 \dots n_k\rangle \\
&= [(n_{-k}!) \dots (n_0!) \dots (n_k!)]^{-\frac{1}{2}} (b_{-k}^\dagger)^{n_{-k}} \dots (b_0^\dagger)^{n_0} \dots (b_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle
\end{aligned}$$

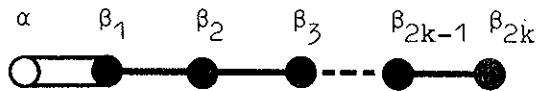
($N = n_{-k} + \dots + n_0 + \dots + n_k$) where the vacuum state $|0\rangle$ is defined by

$$b^q |0\rangle \equiv 0 \text{ for any } q. \tag{13}$$

It is clear that all the states corresponding to a given parity of N form a basis of an infinite representation for the algebra C_{2k+1} , and it is not difficult to show that this representation is irreducible. Moreover, by writing the unitarity conditions on the parameters of the group⁶, we can obtain the real Lie group for which this representation is unitary: it is the non-compact symplectic group $Sp(4k+2)$ in the notation of Barut and Raczka. The chain of real Lie groups corresponding to the chain of Lie algebras given by equation (12) is therefore:

$$Sp(4k+2) \supset SO(2,1) \times SO(2k+1) \supset SO(2,1) \times SO(3). \quad (14)$$

In order to characterize the various boson-state representations which appear in this chain, we can use the method described by Joseph⁷. In fact, Joseph studies only unitary and orthogonal groups, but it is straightforward to generalize his results to symplectic groups. It is not worthwhile to describe again the method given by Joseph, but we may recall that the key of this method is the use of Dynkin diagrams⁸. The Dynkin diagram for C_{2k+1} is:



and to each boson-state corresponds a weight denoted⁷:

$\alpha \quad \beta_1 \quad \beta_2 \quad \dots \quad \beta_{2k}$

In this notation, the lowest weights are respectively for N

Non-compact groups and the harmonic oscillator

even

$$\boxed{\frac{1}{2} \ 0 \ 0 \ \dots \ 0}$$

and for N odd

$$\boxed{\frac{3}{2} \ -1 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0}$$

The reduction of these two representations in the various subgroups of the chain given by (14) is

$$\begin{aligned} \boxed{\frac{1}{2} \ 0 \ \dots \ 0} &\rightarrow \sum_{\ell \text{ even}} \mathbf{D}^+(-\frac{\ell}{2} - \frac{3}{4}) \times [\ell 0 \ \dots \ 0] \\ \boxed{\frac{3}{2} \ -1 \ \dots \ 0} &\rightarrow \sum_{\ell \text{ odd}} \mathbf{D}^+(-\frac{\ell}{2} - \frac{3}{4}) \times [\ell 0 \ \dots \ 0] \end{aligned} \quad (15)$$

where the \mathbf{D}^+ are positive discrete irreducible representations of $SO(2,1)$ in the notations of Barut and Fronsdal⁹ and the $[\ell 0 \ \dots \ 0]$ are finite unitary irreducible representations of $SO(2k+1)$ in the notation of Wybourne¹⁰. The branching rules for $SO(2k+1) \supset SO(3)$ are not so simple² but they are given by Wybourne¹⁰ for many values of k .

In addition, it is well known¹¹ that the boson-states can be classified according to their transformation properties under the operations of the group $SU(2k+1)$. The generators of this group are:

$$X \begin{pmatrix} K & K \\ 0 & Q \end{pmatrix}$$

if we exclude the case for which $K = 1, K = Q = 0$. The chain of groups is now:

$$Sp(4k+2) \supset SU(2k+1) \supset SO(2k+1) \supset SO(3), \quad (16)$$

and the corresponding reductions of the representations are:

$$\boxed{\frac{1}{2} \ 0 \ \dots \ 0} \rightarrow \sum_{N \text{ even}} \{NOO\dots 0\}$$

$$\boxed{\frac{3}{2} \ -1 \ \dots \ 0} \rightarrow \sum_{N \text{ odd}} \{NOO\dots 0\}$$

$$\begin{aligned} \{NO\dots 0\} \rightarrow [NO\dots 0] + [N-2, 0\dots 0] + \dots + [00\dots 0] \text{ if } N \text{ even} \\ [10\dots 0] \text{ if } N \text{ odd,} \end{aligned} \quad (17)$$

where $\{ \}$ are finite unitary irreducible representations of $SU(2k+1)$ ¹⁰.

At this point, two remarks must be made. First, the group $Sp(4k+2)$ is not a dynamical group for the considered problem, since the boson states split into *two* irreducible representations of $Sp(4k+2)$ ¹². Besides, our formalism is only valid for k integer because if k is half-integer, the quasi-spin operators of equation (6) vanish. However, by considering the commutation relations of the uncoupled operators¹³:

$$b_q^\dagger b^{q'}, \quad b_q^\dagger b_q^\dagger, \quad \text{and } b^q b^{q'},$$

it is possible to show that we can nevertheless classify boson-states according to their properties under the operations of the previous chains of groups (equations (14) and (16)) even if k is half-integral.

IV APPLICATIONS TO THE THREE-DIMENSIONAL ISOTROPIC HARMONIC OSCILLATOR

The boson formalism for a particle in an isotropic harmonic potential is well-known¹⁴. We define:

$$x_0 = z, \quad x_{\pm 1} = \mp 2^{-\frac{1}{2}}(x \pm iy)$$

$$b^q = 2^{-\frac{1}{2}}(-1)^q(x_{-q} + ip_{-q})$$

$$(b^q)^\dagger = b_q^\dagger = 2^{-\frac{1}{2}}(x_q - ip_q), \quad (q = 0, \pm 1).$$

From the commutation relations between coordinates and momenta, it follows that b^0, b^1, b^{-1} and $b_0^\dagger, b_1^\dagger, b_{-1}^\dagger$ satisfy equations (1), and all the results given in the previous sections are valid for this particular set of operators. Moreover, if we take units in which $\hbar = M = \omega = 1$ (M being the mass and $\frac{\omega}{2\pi}$ the frequency of the oscillator), the Hamiltonian of the considered system can be written:

$$H = 2Q_0.$$

It follows that the eigenstates of H are the boson operator states defined in the previous section, (the vacuum state being the ground state) and that the corresponding eigenvalues are $N + \frac{3}{2}$. The vector \mathbf{K} can be identified with the usual orbital angular momentum \mathbf{L} , and the simultaneous eigenstates of K^2 and H are, in spherical coordinates:

$$|N\ell m\rangle = \left\{ \frac{(\frac{1}{2}N - \frac{1}{2}\ell)! 2}{\Gamma(\frac{1}{2}N + \frac{1}{2}\ell + \frac{3}{2})} \right\}^{\frac{1}{2}} r^\ell e^{-r^2/2} L_{\frac{N-\ell}{2}}^{\ell+\frac{1}{2}}(r^2) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

The chain of groups (14) and (16) become:

$$\text{Sp}(6) \begin{cases} \rightarrow \text{SO}(2,1) \times \text{SO}(3) \\ \rightarrow \text{SU}(3) \rightarrow \text{SO}(3) \end{cases}$$

To evaluate matrix elements, the group $\text{SO}(2,1) \times \text{SO}(3)$ is particularly interesting. The action of the various components of \mathbf{L} on the eigenstates $|N\ell m\rangle$ is well-known; the action of the various components of \mathbf{Q} seems to be more difficult to obtain, but we can rewrite them in the following form:

$$Q_0 = \frac{1}{2} H, \quad Q_{\pm} = \frac{1}{2} (\pm H \mp r^2 + r\partial_r + \frac{3}{2});$$

these three operators are very similar to those introduced recently by Armstrong⁴ to study the radial functions of the three-dimensional isotropic harmonic oscillator by means of the group $\text{SO}(2,1)$. More precisely, the generators defined by Armstrong are:

$$J_3 = -i\partial_t, \quad J_{\pm} = e^{\pm it}(z\partial_z \mp i\partial_t \mp \frac{z}{2})$$

where t is a new variable and $z = r^2$, and it appears that:

$$\begin{aligned} Q_0 |N\ell m\rangle &= b |N\ell m\rangle \\ Q_{\pm} |N\ell m\rangle &= \pm [(b \mp a)(b \pm a \pm 1)]^{\frac{1}{2}} |N \pm 2 \ell m\rangle \end{aligned} \quad (18)$$

($a = \frac{1}{2}(\ell - \frac{1}{2})$, $b = \frac{1}{2}(N + \frac{3}{2})$) since:

$$J_3 f_{ab} = b f_{ab}$$

and

$$J_{\pm} f_{ab} = \pm [(b \mp a)(b \pm a \pm 1)]^{\frac{1}{2}} f_{ab \pm 1}, \quad (19)$$

where⁴

Non-compact groups and the harmonic oscillator

$$f_{ab} = r^{3/2} \exp \left\{ i \left(\frac{N}{2} + \frac{3}{4} \right) t \right\} |Nlm\rangle$$

The irreducible representations defined respectively by the equations (18) and (19) are exactly the same. However, the algebra defined by \mathbf{Q} is different from the algebra defined by \mathbf{J} , since the variables involved are not the same. In particular, \mathbf{Q} acts simultaneously on radial and angular coordinates, but from the results given in Section 2, we know that:

$$r Y_{1q} = 2^{-1/2} \left[b_{\frac{1}{2} q}^{\left(\frac{1}{2} \ 1 \right)} - b_{-\frac{1}{2} q}^{\left(\frac{1}{2} \ 1 \right)} \right] (4\pi/3)^{1/2}$$

and it is possible, by using standard coupling techniques² to express any multipole operator $r^K Y_{KQ}$ in terms of double tensors; after that, we can use the Wigner-Eckart theorem in $SO(2,1)$ and $SO(3)$ respectively to evaluate the corresponding matrix elements. However, it is not useful here to give the details of such a calculation, since, by this method, we recover only some of the results given previously by Armstrong⁴.

CONCLUSION

In this paper we have given the tensorial character in the orbital and quasi-spin spaces of boson creation and annihilation operators. The consequences of this tensorial character have been briefly examined with special reference to the theory of continuous groups, application has been made to the three-dimensional isotropic harmonic oscillator, and by this procedure, we have recovered, in a very natural way, the $SO(2,1)$ algebra used by Armstrong⁴. However, the field of

application of the general results given here is certainly much wider than that. In particular, the tensorial character of creation and annihilation operators could be used in many other problems such as that of n particles in a $(2k+1)$ -dimensional isotropic oscillator potential; or that of the definition and evaluation of boson fractional parentage coefficients, for example. Some of these studies are in progress.

REFERENCES

- 1 For a reference about this subject, see for example:
B.R. Judd, *Second Quantization and Atomic Spectroscopy*,
(The Johns Hopkins Press, Baltimore 1967).
- 2 B.R. Judd, *Operator Techniques in Atomic Spectroscopy*,
(McGraw-Hill, New York 1963).
- 3 B.R. Judd and J.P. Elliott, *Topics in Atomic and Nuclear
Theory*, (University of Canterbury, New Zealand 1970).
- 4 L. Armstrong, Jr, private communication (to be published
in *J. Math. Phys.*).
- 5 G. Racah, *Group Theory and Spectroscopy*, *Ergeb. der
exakten Naturwiss.*, 37, Springer, Berlin (1965).
- 6 A.O. Barut and R. Raczka, *Proc. Roy. Soc. (London)* A287,
519 (1965).
- 7 D.W. Joseph, *J. Math. Phys.* 11, 1249 (1970).
- 8 E.B. Dynkin, *Amer. Math. Soc. Transl. II*, 6 (1967).
- 9 A.O. Barut and C. Fronsdal, *Proc. Roy. Soc. (London)*
A287, 532 (1967).

Non-compact groups and the harmonic oscillator

- 10 B.G. Wybourne, *Symmetry Principles in Atomic Spectroscopy*, (Wiley-Interscience, New York 1970).
- 11 M. Moshinsky, *Group Theory and the Many-Body Problem*, (Gordon & Breach, New York 1968).
- 12 In fact, a classical dynamical group for the problem in hand is $SU(2k+1,1)$ but it does not contain $Sp(4k+2)$.
- 13 This is the method used by M. Moshinsky and C. Quesne (see footnote).
- 14 See for example: A. Messiah, *Mécanique Quantique*, vol. 1, (Dunod, Paris 1965).

ANNEXE III

Quaternionic solutions for the relativistic Kepler problem with magnetic charges†

S FENEUILLE and A CRUBELLIER

Laboratoire Aimé Cotton, CNRS II, Orsay, Essonne, France

MS received 17 November 1971

Abstract. The relativistic Kepler problem in Dirac form is solved by means of a quaternionic method for particles having both electric and magnetic charges. The variables in spherical coordinates can be separated in a simple way and the results obtained are similar to those which are valid for the usual hydrogen atom.

1. Introduction

Although the concept of charged magnetic monopoles was introduced many years ago (Dirac 1931) in quantum theory, the relativistic Kepler problem with magnetic charges has been considered in detail only recently. First, Berrondo and McIntosh (1970) investigated the symmetry and degeneracy of the Dirac equation for a Coulomb potential with a fixed centre bearing both electric and magnetic charges; the formalism used was closely related to the 'symmetric' Hamiltonian of Biedenharn (1962) and Biedenharn and Swamy (1964) and the accidental doubling degeneracy was deduced in a way using essentially the algebra of Malkin and Manko (1969). More recently, Barut and Bornzin (1970) gave a $SO(4, 2)$ formulation of a similar problem and deduced the spectrum from group theoretical considerations only. These formalisms are very efficient in exhibiting the symmetry properties of the problem and they provide results applicable to the theory of strong interaction phenomena based on the concept of magnetic charges (Barut 1971), but they do not allow us to put the wavefunctions into a convenient form for practical calculations. Now, it was shown recently by Hautot (1970) that the use of quaternions allows a direct integration of the Dirac equation for the hydrogen atom, by separation of variables. The object of this paper is to show that the quaternionic method is well adapted to the study of the relativistic Kepler problem with magnetic charges, and that it allows us to deduce the corresponding wavefunctions from those of the well known ordinary relativistic Kepler problem in a simple way.

2. Separation of variables

If we consider the problem of a particle with mass m , electric charge e_1 and magnetic charge g_1 moving in the field of another particle with infinite mass, electric charge e_2 and magnetic charge g_2 situated at the origin, the corresponding Dirac equation can

† After this paper was written, we received a preprint of A Hautot (to be published in *J. math. Phys.*) in which a particular case of this problem was treated.

be written (Barut and Bornzin 1970)

$$\left(c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi}) + \gamma_0 mc^2 - \frac{\alpha}{r} \right) \psi = E\psi \quad (1)$$

where

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi} &= \boldsymbol{p} - \mu \boldsymbol{D}(r) \\ \mu &= e_1 g_2 - g_1 e_2 \\ \alpha &= -(e_1 e_2 + g_1 g_2) \\ \boldsymbol{D}(r) &= \frac{\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{n}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{n})}{r\{r^2 - (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{n})^2\}} \end{aligned}$$

\boldsymbol{n} being an arbitrary unit vector.

Using the notations of Hautot (1970), equation (1) in quaternionic form reads

$$\begin{aligned} \left(\nabla_3 - \frac{\mu}{ch} \sqrt{-1} D_3 \right) u &= -u \left\{ \frac{mc}{h} j + \sqrt{-1} i \left(\frac{E}{ch} + \frac{\alpha}{chr} \right) \right\} \\ &= -u Q(r) \end{aligned} \quad (2)$$

where

$$\begin{aligned} \psi &= \exp\{-(\sqrt{-1}/h)Et\}u \\ \nabla_3 &= i\partial_x + j\partial_y + k\partial_z \end{aligned}$$

and

$$D_3 = iD_x + jD_y + kD_z.$$

As in the case of the usual hydrogen atom ($\mu = 0$), it is convenient to use spherical coordinates which are separable; then

$$\nabla_3 = k e^{k\phi/2} e^{-j\theta} e^{-k\phi/2} \partial_r + i e^{-k\phi/2} e^{-j\theta} e^{-k\phi/2} \frac{1}{r} \partial_\theta + j e^{-k\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \quad (3)$$

and if we choose \boldsymbol{n} parallel to the z axis

$$D_3 = -j \frac{\cot \theta}{r} e^{-k\phi}. \quad (4)$$

Following the method described by Hautot (1970), we find that the separation of variables holds in the form

$$u \equiv \exp\left\{\frac{1}{2}(k + 2\sqrt{-1}M)\phi\right\} e^{j\theta/2} \Theta(\theta) R(r) \quad (5)$$

if $[\Theta, k] = 0$, which implies that $\Theta = \Theta_1 + k\Theta_4$; since $u(r, \theta, \phi) = u(r, \theta, \phi + 2\pi)$, M must be a half-odd integer and the equations satisfied respectively by $\Theta(\theta)$ and $R(r)$ are

$$j \left(\frac{d\Theta}{d\theta} + \frac{1}{2} \cot \theta \Theta \right) - i \frac{\sqrt{-1}}{\sin \theta} \left(\frac{\mu}{ch} \cos \theta + M \right) \Theta = \Theta A \quad (6)$$

$$r \frac{dR}{dr} - r k R Q = (A - 1) R \quad (7)$$

where the quaternion A , which plays the role of a separation constant, is equal to $ai + bj$, where a and b are scalar quantities; however we can put $b = 0$ without loss of generality.

3. Quaternionic solutions

3.1. Angular variables

Since $\Theta = \Theta_1 + k\Theta_4$, equation (6) is equivalent to a system of two scalar coupled differential equations, and this system can be expressed in real form by putting

$$\begin{aligned} Y_4 &= -\Theta_1 + \sqrt{-1}\Theta_4 \\ Y_1 &= \pm(\Theta_1 + \sqrt{-1}\Theta_4) \end{aligned}$$

and

$$\kappa = \mp a\sqrt{-1}.$$

More precisely, Y_1 and Y_4 satisfy the following equations:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} Y_1 + \frac{1}{2} \cot \theta Y_1 + \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\mu}{c\hbar} \cos \theta + M \right) Y_1 &= \kappa Y_4 \\ \frac{d}{d\theta} Y_4 + \frac{1}{2} \cot \theta Y_4 - \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\mu}{c\hbar} \cos \theta + M \right) Y_4 &= -\kappa Y_1. \end{aligned} \quad (8)$$

By decoupling the system (8), we obtain the second order differential equations

$$\frac{d^2}{d\theta^2} Y_i + \cot \theta \frac{d}{d\theta} Y_i + \left(\sigma_i - \frac{(M - K_i \cos \theta)^2}{\sin^2 \theta} \right) Y_i = 0 \quad i = 1, 4 \quad (9)$$

where

$$\sigma_1 = -\frac{1}{2} - \frac{\mu}{c\hbar} + \kappa^2 \quad K_1 = -\frac{1}{2} - \frac{\mu}{c\hbar}$$

and

$$\sigma_4 = -\frac{1}{2} + \frac{\mu}{c\hbar} + \kappa^2 \quad K_4 = \frac{1}{2} - \frac{\mu}{c\hbar}.$$

Equation (9) is exactly the same as encountered in the symmetric top problem, but here, neither M nor K is an integer. The easiest way to solve it is to use the factorization method (A-type); in fact, the results obtained by Infeld and Hull (1951) for the symmetric top are still valid, and we can get quadratically integrable solutions only if $K \pm M$ is an integer. M being a half-odd integer, equations (9) show that $\mu/c\hbar$ must be an integer which is nothing else but the Dirac quantization condition (Dirac 1948 and Hurst 1968). In this case, the solutions can be expressed in terms of Jacobi polynomials and are labelled by a quantum number j defined by

$$\begin{aligned} \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 &= \sigma + K^2 + \frac{1}{4} = \kappa^2 + \left(\frac{\mu}{c\hbar} \right)^2 \\ j - |M|, j - |K| &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (10)$$

M and K being half-odd integers, j must be a positive half-odd integer. For a given value of j , there are two distinct solutions for Θ according to the sign of κ . More precisely, changing the sign of κ is equivalent to multiplying Θ by $k\sqrt{-1}$.

3.2. Radial variables

Formally, equation (7) is the same as for the usual hydrogen atom ($\mu = 0$); the only difference is that in general $\kappa = -a\sqrt{-1}$ is no longer an integer. However this point is not essential in the resolution of radial equations obtained for the usual hydrogen atom (Bethe and Salpeter 1957), and all the results we need can be derived from that case by replacing $(j + \frac{1}{2})^2$ by $(j + \frac{1}{2})^2 - (\mu/ch)^2$ in the formulae. In particular it allows us to find the energy spectrum

$$E_n = mc^2 \left\{ 1 + \left(\frac{\alpha}{ch} \right)^2 \left[n + \left\{ \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(\frac{\alpha}{ch} \right)^2 - \left(\frac{\mu}{ch} \right)^2 \right\}^{1/2} \right]^{-2} \right\}^{-1/2} \quad (11)$$

for a small coupling constant

$$\left(\frac{\alpha}{ch} \right)^2 < \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \left(\frac{\mu}{ch} \right)^2$$

if g_1, g_2 is not zero, $(\alpha/ch)^2$ is large ($> 137/4$) then, we must start from the results given by Case (1950).

In any case, as for the usual hydrogen atom, the radial part of the wavefunction can be written (Hautot 1970)

$$R = (R_1 + iR_2)(1 - j) \quad (12)$$

where R_1 and R_2 are scalar quantities; the system of radial equations may be expressed in real form by putting

$$\begin{aligned} G &= r(R_1 + \sqrt{-1}R_2) \\ F &= -r(R_2 + \sqrt{-1}R_1) \end{aligned}$$

we obtain the usual system of two coupled differential equations (Bethe and Salpeter 1957)

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dr} + \frac{\kappa}{r}G &= \frac{1}{ch} \left(mc^2 + E + \frac{\alpha}{r} \right) F \\ \frac{dF}{dr} - \frac{\kappa}{r}F &= \frac{1}{ch} \left(mc^2 - E - \frac{\alpha}{r} \right) G \end{aligned} \quad (13)$$

where F and G are respectively the small and the large component, but here κ is not necessarily an integer.

4. Invariants

It is well known (Berrondo and McIntosh 1970) that the three components of the angular momentum operator

$$\mathcal{J} = \mathcal{L} + \mathcal{S} \quad (14)$$

where $\mathcal{L} = (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi}) - (\mu/cr)\mathbf{r}$, commute with the Dirac Hamiltonian for the considered system. $|\mathcal{J}|^2$ and \mathcal{J}_z are compatible invariants and we can show that the wavefunctions obtained above are eigenfunctions for these two operators. In quaternionic form (Hautot 1970)

$$S_x = \frac{1}{2}ih\sqrt{-1} \quad S_y = \frac{1}{2}jh\sqrt{-1} \quad S_z = \frac{1}{2}kh\sqrt{-1} \quad (15)$$

therefore

$$\mathcal{J}_z = -h\sqrt{-1}\partial_\phi + \frac{1}{2}kh\sqrt{-1} \quad (16)$$

and

$$\mathcal{J}_z \psi_{n,\kappa,j,M} = Mh \psi_{n,\kappa,j,M}. \quad (17)$$

Moreover, if, following Hautot (1970), we define \mathcal{L}_3 by

$$\mathcal{L}_3 = i\mathcal{L}_x + j\mathcal{L}_y + k\mathcal{L}_z$$

it is clear that

$$|\mathcal{J}|^2 = -\mathcal{L}_3 \mathcal{L}_3 + 2h\sqrt{-1}\mathcal{L}_3 + \frac{3}{4}h^2.$$

Now

$$\frac{\sqrt{-1}}{h}\mathcal{L}_3 = j e^{-k\phi} \hat{c}_0 - i e^{-k\phi/2} e^{-j\theta} e^{-k\phi/2} \frac{1}{\sin\theta} \hat{c}_\phi - i e^{-k\phi} \mu \frac{\sqrt{-1}}{ch \sin\theta}.$$

From equations (6) and (12)

$$\mathcal{L}_3 \psi_{n,\kappa,j,M} = h\sqrt{-1} \psi_{n,\kappa,j,M} (1 + k\kappa\sqrt{-1}) - \frac{\mu}{c} k e^{k\phi/2} e^{-j\theta} e^{-k\phi/2} \psi_{n,\kappa,j,M}$$

and consequently

$$|\mathcal{J}|^2 \psi_{n,\kappa,j,M} = h^2 \left\{ \kappa^2 + \left(\frac{\mu}{ch} \right)^2 - \frac{1}{4} \right\} \psi_{n,\kappa,j,M} = h^2 j(j+1) \psi_{n,\kappa,j,M}. \quad (18)$$

The $O(3)$ invariance symmetry generated by \mathcal{J} provides no information about the radial part of the wavefunctions. However, the use of the broken symmetry $O(2, 1)$ (Bacry and Richard 1967, Crubellier and Feneuille 1971) for the radial wave equations (13) is still possible even if μ is not zero, because the fact that κ is an integer for the usual hydrogen atom is not essential in this theory. Thus, all the results obtained by this method and concerning especially radial matrix elements are still valid provided that we replace $(j + \frac{1}{2})$ by $\{(j + \frac{1}{2})^2 - (\mu/c\hbar)^2\}^{1/2}$.

Acknowledgments

We would like to thank Dr A Hautot for reading the manuscript and for pointing out to us his unpublished work on Dirac's equations in the presence of magnetic fields.

References

- Bacry H and Richard J L 1967 *J. math. Phys.* **8** 2230-3
 Barut A O 1971 *Topics in Modern Physics* (Boulder, Colorado: Colorado Associated University Press)

- Barut A O and Bornzin G L 1970 *J. math. Phys.* **12** 841-6
Berrondo M and McIntosh H V 1970 *J. math. Phys.* **11** 125-41
Bethe H A and Salpeter E E 1957 *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Berlin: Springer-Verlag)
Biedenharn L C 1962 *Phys. Rev.* **126** 845-51
Biedenharn L C and Swamy N V V J 1964 *Phys. Rev.* **133** B1353-60
Case K M 1950 *Phys. Rev.* **80** 797-806
Crubellier A and Feneuille S 1971 *J. Phys., Paris* **32** 405-11
Dirac P A M 1931 *Proc. R. Soc. A* **133** 60-72
----- 1948 *Phys. Rev.* **74** 817-30
Hautot A P 1970 *Physica* **48** 609-19
Hurst C A 1968 *Ann. Phys.* **50** 51-75
Infeld L and Hull T E 1951 *Rev. mod. Phys.* **23** 21-68
Maikin I A and Manko V I 1969 *Sov. J. nucl. Phys.* **9** 110-3

ANNEXE IV

APPLICATION DE LA METHODE DE FACTORISATION
ET DE LA THEORIE DES GROUPES
AU PROBLEME DE L'ELECTRON DE LANDAU RELATIVISTE.

A. CRUBELLIER et S. FENEUILLE

Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bâtiment 505, 91405 Orsay, France.

Abstract

The relativistic problem of the free Landau electron is investigated by means of the factorization method and group theory. The Dirac equation is written in quaternionic form, which allows the variables to be separated in cylindrical coordinates (z, ρ, φ) . Then, the radial equations are factorized in two different ways (C type and B type), and the corresponding Lie algebras ($G(0,1)$ and $SO(2,1)$ respectively) are introduced. The first one is closely related to the invariance algebra $G(0,1)$ of the system. The second one, which introduces a supplementary variable without physical meaning, allows us to define some simple tensor operators such as ρ^n (n integer); the evaluation of their matrix elements leads to some radial integrals which can be of physical interest.

Short title : THEORIE DES GROUPES ET ELECTRON DE LANDAU RELATIVISTE .

1 - Introduction.

L'interprétation dans le cadre de la théorie des algèbres de Lie des propriétés des équations factorisables (Infeld et Hull 1951) permet d'introduire les techniques de la théorie des groupes dans l'étude des systèmes quantiques exactement solubles. En effet, ainsi que l'a montré Miller (1968), à toute équation factorisable peut être associée la réalisation d'une algèbre de Lie par des opérateurs différentiels du premier ordre à deux variables (dont l'une est une variable auxiliaire). Les solutions de l'équation sont alors très simplement associées à des fonctions de base de représentations de l'algèbre et les conditions de normalisation sont reliées à l'unitarité de ces représentations. De plus, on peut introduire des opérateurs tensoriels dont les éléments de matrice peuvent être calculés à l'aide du théorème de Wigner-Eckart. Ces éléments de matrice sont directement reliés à ceux qui sont pris entre états physiques. Ceci est particulièrement important pour l'application de la méthode à des cas physiques, soit pour utiliser la théorie des perturbations lorsque le système étudié peut constituer une première approximation pour un système plus complexe, soit pour calculer des probabilités de transition.

Le cadre général de la méthode a été décrit dans un article précédent (Crubellier 1973). Nous décrivons ici un exemple d'application de cette méthode : l'étude de l'électron de Landau relativiste. Cet exemple, dont les solutions sont désormais classiques (Johnson et Lippman 1949) fournit en effet une illustration particulièrement significative de la méthode employée, alors que les problèmes physiques déjà étudiés par cette méthode (Armstrong 1970, 1971 a et b, Crubellier et Feneuille 1971, Cunningham 1972,

Dunlap et Armstrong 1972, Feneuille et Crubellier 1972) n'en soulignaient que certains aspects particuliers. En effet les équations radiales sont des équations factorisables du type C, qu'on transforme aisément en équations du type B. En conséquence, deux algèbres de nature très différente peuvent être introduites. La première, de type $G(0,1)$, est étroitement reliée à l'algèbre d'invariance du système (qui comprend les rotations autour de Oz et les translations). Au contraire, la seconde, de type B_1 , n'est pas une algèbre d'invariance, mais elle permet l'introduction d'opérateurs tensoriels simples. Signalons qu'une symétrie $Sp(2)$ analogue à la symétrie $SO(2,1)$ trouvée ici a été utilisée pour l'électron de Landau non relativiste par Boon et Seligman (1973). Il serait cependant difficile de généraliser ce résultat au cas relativiste.

Dans une première partie nous rappelons comment le formalisme quaternionique décrit par Hautot (1970) permet d'effectuer la séparation des variables, essentielle avant toute étude de ce type.

Il est montré ensuite que la recherche de la fonction d'onde radiale quaternionique normée se ramène à celle des solutions normées de deux équations réelles du premier ordre.

Dans une troisième partie, l'algèbre d'invariance, qui engendre les rotations autour de Oz et les translations, est introduite, sous la forme quaternionique. Le spectre d'énergie du système est déduit des propriétés des représentations de cette algèbre.

Enfin, les équations radiales réelles sont résolues suivant la méthode décrite dans l'article déjà cité (Crubellier 1973), avec une attention particulière à la factorisation du type B qui conduit à la définition d'opérateurs tensoriels simples.

2 - Séparation des variables.

L'équation de Dirac de l'électron dans un champ magnétique uniforme \vec{B} s'écrit, avec les notations usuelles :

$$[c(\underline{\alpha} \cdot \underline{\pi}) + \beta m_0 c^2] \Psi = E \Psi , \quad (1)$$

où $\underline{\pi} = \underline{p} + \frac{e}{c} \underline{A}$; $-e$ est la charge de l'électron et \underline{A} le potentiel vecteur. Pour ce dernier si on impose que :

$$\text{div } \underline{A} = 0 ,$$

on peut écrire (jauge dite symétrique) :

$$\underline{A} = - \frac{1}{2} (\underline{r} \times \underline{B}) ,$$

et si $\underline{B} = (0, 0, B)$, $\underline{A} = (-\frac{1}{2} B y, \frac{1}{2} B x, 0)$.

La séparation des variables est grandement facilitée si on utilise le formalisme quaternionique décrit par Hautot (1970). Avec les notations de cet auteur, l'équation (1) sous forme quaternionique s'écrit :

$$(\nabla_{\mathfrak{J}} + \sqrt{-1} \frac{e}{c\hbar} \underline{A}_{\mathfrak{J}})u = uQ , \quad (2)$$

où :

$$Q = - \frac{1}{c\hbar} (i \sqrt{-1} E + j m_0 c^2) ,$$

$$\nabla_{\mathfrak{J}} = i \partial_x + j \partial_y + k \partial_z ,$$

$$\underline{A}_{\mathfrak{J}} = i A_x + j A_y + k A_z ,$$

et la fonction d'onde u est une fonction quaternionique.

La symétrie du système suggère d'utiliser des coordonnées cylindriques.

On a alors :

$$\nabla_{\mathfrak{J}} = e^{k\varphi/2} (i \partial_\rho + j \frac{1}{\rho} \partial_\varphi + k \partial_z) e^{-k\varphi/2}$$

$$\underline{A}_{\mathfrak{J}} = e^{k\varphi/2} j \frac{B}{2} \rho e^{-k\varphi/2} .$$

Si on pose $u = e^{k\varphi/2} v$, v est solution de l'équation :

$$\left\{ i \partial_\rho + j \left[\frac{1}{\rho} \left(\partial_\varphi + \frac{k}{2} \right) + \sqrt{-1} \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right] + k \partial_z \right\} v = vQ .$$

Cette équation est séparable, c'est-à-dire que v peut s'écrire comme produit de fonctions quaternioniques d'une seule variable :

$$v = Z(z) \Phi(\varphi) R(\rho) .$$

On obtient évidemment :

$$Z(z) = \exp \left(\sqrt{-1} \frac{p_z}{\hbar} z \right)$$

$$\Phi(\varphi) = \exp \left(\sqrt{-1} M\varphi \right) .$$

p_z n'est pas quantifié ; par contre, puisque :

$$u(\varphi + 2\pi) = u(\varphi) ,$$

M doit prendre des valeurs demi-entières. Enfin, la fonction quaternionique radiale $R(\rho)$ est solution de l'équation suivante :

$$\left[i \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{2\rho} \right) + j \sqrt{-1} \left(\frac{M}{\rho} + \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right) + k \sqrt{-1} \frac{p_z}{\hbar} \right] R(\rho) = R(\rho) Q . \quad (3)$$

3 - Equations radiales.

L'équation (3) est équivalente à un système de 4 équations différentielles scalaires du premier ordre couplées. Ce système est dégénéré ; on peut montrer sans difficulté que $(R_1 + kR_4)$ et $(iR_2 + jR_3)$ sont solutions de la même équation du second ordre. On peut donc écrire :

$$(iR_2 + jR_3) = (R_1 + kR_4) U ,$$

où U est un quaternion de la forme $iA + jB$, indépendant de ρ ; on

montre aisément que pour que la fonction d'onde radiale, qui s'écrit alors :

$$R = (R_1 + kR_4)(1 + U) ,$$

soit solution de l'équation (3), il faut et il suffit que U vérifie la condition :

$$k \sqrt{-1} \frac{p_z}{\hbar} (U^2 - 1) = [Q, U] , \quad (4)$$

et que $(R_1 + kR_4)$ soit solution de l'équation :

$$\left[i \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{1}{2\rho} \right) + j \sqrt{-1} \left(\frac{M}{\rho} + \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right) \right] (R_1 + kR_4) = (R_1 + kR_4) \left[Q - k \sqrt{-1} \frac{p_z}{\hbar} U \right] .$$

En outre, si l'on pose :

$$R_1 = R_+ + R_- ,$$

$$R_4 = \sqrt{-1} (R_+ - R_-) ,$$

et $R_{\pm} = \rho^{-\frac{1}{2}} F_{\pm} ,$

F_+ et F_- sont solutions du système suivant :

$$\begin{cases} \left(-\frac{d}{d\rho} + \frac{M}{\rho} + \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right) F_+ = \alpha F_- \\ \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{M}{\rho} + \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right) F_- = \alpha' F_+ , \end{cases}$$

où α et α' sont des coefficients complexes qui dépendent du choix de

U ; la condition (4) sur U est équivalente à :

$$\alpha\alpha' = \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{c^2 \hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2} .$$

On peut donc choisir U de façon telle que :

$$\alpha = \alpha' = \sqrt{\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{c^2 \hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2}} = \lambda .$$

Dans ce cas F_+ et F_- peuvent être choisis réels et on montre facilement de plus que :

$$\int F_+^2 d\rho = \int F_-^2 d\rho . \quad (5)$$

Finalement F_+ et F_- sont les solutions respectives des deux équations suivantes :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{(M \mp \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} - \left(\frac{eB}{2c\hbar} \right)^2 \rho^2 - \frac{eB}{c\hbar} (M \pm \frac{1}{2}) + \lambda^2 \right\} F_{\pm} = 0 , \quad (6)$$

vérifiant la condition (5) et telles que la condition de normalisation suivante soit satisfaite :

$$\int \text{scalaire} (\bar{R}^* R) \rho d\rho = 1 . \quad (7)$$

Compte tenu du choix fait pour U , la condition (7) s'écrit :

$$\int F_+^2 d\rho = \int F_-^2 d\rho = \frac{p_z^2 c^2}{8E^2} = \mathcal{N}^2 . \quad (8)$$

Les différentes composantes de la fonction radiale sont alors les suivantes :

$$R_1 = \rho^{-\frac{1}{2}} (F_+ + F_-)$$

$$R_4 = \sqrt{-1} \rho^{-\frac{1}{2}} (F_+ - F_-)$$

$$R_2 = \rho^{-\frac{1}{2}} (aF_+ + bF_-)$$

$$R_3 = \sqrt{-1} \rho^{-\frac{1}{2}} (aF_+ - bF_-) ,$$

$$\text{où : } a = - \frac{p_z}{\hbar} \left[\sqrt{-1} \frac{E - m_0 c^2}{c\hbar} + \lambda \right]$$

$$b = \frac{p_z}{\hbar} \left[\sqrt{-1} \frac{E + m_0 c^2}{c\hbar} - \lambda \right] .$$

4 - Invariantes.

Le système est évidemment invariant dans une translation quelconque et dans toute rotation autour de Oz . L'opérateur infinitésimal de rotation autour de Oz s'écrit en notation quaternionique (Hautot 1970) :

$$J_z = -\sqrt{-1} \partial_\varphi + \sqrt{-1} \frac{k}{2} ,$$

et il commute avec l'opérateur $H_z = \nabla_z + \sqrt{-1} \frac{e}{c\hbar} A_z$, c'est-à-dire que la fonction $J_z u$ est solution de (2) pour la même valeur de E que u ; en fait on a :

$$J_z u = M u ,$$

et, en d'autres termes, J_z est un invariant du système.

Par contre l'opérateur infinitésimal $T_{\underline{n}} = (\underline{n} \cdot \underline{\nabla})$, correspondant aux translations dans une direction définie par le vecteur unité \underline{n} , ne commute pas avec l'opérateur H_z . En effet une translation entraîne pour le potentiel vecteur un changement de jauge et donc modifie la phase des fonctions d'onde. On peut, comme l'ont montré Opechowski et Tam (1969), définir des opérateurs de translation "magnétiques", qui commutent avec H_z et sont donc des invariantes du système, mais dont l'expression dépend du choix de jauge initial. Avec la jauge symétrique utilisée ici, ces opérateurs infinitésimaux sont, pour les translations de direction \underline{n} :

$$T'_{\underline{n}} = [\underline{n} \cdot (\underline{\nabla} - \sqrt{-1} \frac{e}{c\hbar} \underline{A})] .$$

Si l'on définit pour ces opérateurs la base suivante :

$$T'_z = \partial_z$$

$$T'_\pm = T'_x \pm \sqrt{-1} T'_y = e^{\pm \sqrt{-1} \varphi} \left[\partial_\rho \mp \frac{-\sqrt{-1} \varphi}{\rho} \pm \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right] ,$$

on constate alors que T'_z commute avec tous les autres invariants et que J_z , T'_+ et T'_- satisfont les relations de commutation suivantes :

$$[J_z, T'_\pm] = \pm T'_\pm$$

$$[T'_+, T'_-] = -\frac{2eB}{c\hbar}.$$

Par conséquent les opérateurs J_z , T'_+ , T'_- et $S = \frac{2eB}{c\hbar} I$ (où I est l'opérateur identité) forment la base d'une algèbre de Lie non semi-simple de type $G(0,1)$ (suivant les notations de Miller (1968)). L'opérateur C_{01} défini par :

$$C_{01} = T'_+ T'_- - J_z S$$

est un invariant de l'algèbre, qui peut être réécrit :

$$C_{01} = -\left(H_z H_z + \partial_z^2\right) - \frac{eB}{c\hbar},$$

ce qui conduit à :

$$C_{01} u = \left\{ -\left(Q^2 - \frac{p_z^2}{\hbar^2}\right) - \frac{eB}{c\hbar} \right\} u = -\left(\lambda^2 + \frac{eB}{c\hbar}\right) u.$$

Pour une valeur donnée de l'énergie (donc de λ^2 ou de la valeur propre ω de l'invariant C_{01}), les fonctions u forment une représentation unitaire de l'algèbre d'invariance. Pour que les fonctions u soient normalisables, ces représentations doivent nécessairement être des représentations unitaires du type \downarrow_{s, M_0} (avec les notations de Miller (1968)) où $M_0 + \frac{1}{2} \gg 0$. Pour une telle représentation, le spectre de J_z est donné par $M = M_0 - p$ (p entier $\gg 0$) et la valeur propre ω de C_{01} est liée à M_0 et à la valeur propre s de S par :

$$\omega = -s(M_0 + 1).$$

Or on a ici $s = \frac{2eB}{c\hbar}$ et $\omega = -\left(\lambda^2 + \frac{eB}{c\hbar}\right)$; d'autre part la relation

$M = M_0 - p$ (p entier ≥ 0) liée à la condition $M_0 + \frac{1}{2} \geq 0$ entraîne que :

$$M_0 = \frac{M + |M + \frac{1}{2}|}{2} + N \quad (N \text{ entier } \geq 0) .$$

Finalement le spectre d'énergie est donné par :

$$\frac{E^2 - m_0^2 c^4}{c^2 \hbar^2} = \frac{p_z^2}{\hbar^2} + \frac{2eB}{c\hbar} \left[\frac{M + \frac{1}{2} + |M + \frac{1}{2}|}{2} + N \right] . \quad (9)$$

5 - Fonctions radiales. Algèbre $SO(2,1)$.

La fonction d'onde radiale $R(\rho)$ est complètement caractérisée par la donnée de F_+ et F_- ; celles-ci sont les solutions des équations (6) qui vérifient les conditions (8). Or ces équations sont des équations factorisables du type C . Il a été montré (Crubellier 1973) que les solutions sont reliées à des fonctions de base de représentations unitaires d'une algèbre $G(0,1)$. Cette algèbre a pour base les opérateurs J_3 , J_+ , J_- et $-S$ définis par :

$$\begin{aligned} J_3 &= -\sqrt{-1} \partial_\tau \\ J_\pm &= e^{\pm\sqrt{-1}\tau} \left[\mp \partial_\rho + \frac{-\sqrt{-1} \partial_\tau \pm \frac{1}{2}}{\rho} - \frac{eB}{2c\hbar} \rho \right] \\ S &= + \frac{2eB}{c\hbar} I . \end{aligned}$$

Si on identifie la variable supplémentaire τ qu'on introduit ainsi avec la variable physique φ , on constate que cette algèbre est étroitement liée à celle du paragraphe précédent. En fait, étant donnée l'expression de u en fonction de F_+ et F_- , qu'on peut écrire :

$$u = \rho^{-\frac{1}{2}} Z(z) \left\{ (1 + \sqrt{-1} k) e^{\sqrt{-1}(M-\frac{1}{2})\varphi} F_+ + (1 - \sqrt{-1} k) e^{\sqrt{-1}(M+\frac{1}{2})\varphi} F_- \right\} (1+U) ,$$

on montre à partir des propriétés d'invariance du système que les fonctions $e^{\sqrt{-1}(M\pm\frac{1}{2})\varphi} F_{\pm}$ sont fonctions de base de la représentation unitaire \uparrow_{s, M_0} de deux algèbres $G(0,1)$ qui ont pour base :

$J_3 \pm \frac{1}{2}$, J_+ , $-J_-$ et S . On en déduit aisément que ces mêmes fonctions sont des fonctions de base des représentations unitaires $\uparrow_{-s, M_0 \mp \frac{1}{2}}$ de l'algèbre qui a pour base J_3 , J_+ , J_- et S .

Cependant, bien que le type C de factorisation des équations (6) soit lié à l'algèbre d'invariance, il apparaît préférable de transformer ces équations en équations factorisables du type B, et d'introduire ainsi une algèbre de type B_1 (différente de celle introduite par Yanagawa (1973)), qui n'est pas une algèbre d'invariance mais qui permet de définir des opérateurs tensoriels simples et de calculer aisément leurs éléments de matrice. La méthode utilisée est décrite en détail dans l'article déjà cité (Crubellier 1973) et nous n'en rappelons ici que les points essentiels.

Si l'on écrit une équation factorisable B sous la forme :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - d^2 e^{2ax} + 2ad \mu e^{ax} - a^2 \left(\omega + \frac{1}{4} \right) \right] \varphi_{\omega}^{\mu} = 0 \quad (10)$$

l'algèbre B_1 introduite a pour base :

$$J_3 = -\sqrt{-1} \partial_{\tau}$$

$$J_{\pm} = \frac{1}{a} e^{\pm\sqrt{-1}\tau} \left[\partial_x \mp d e^{ax} \pm a(-\sqrt{-1} \partial_{\tau} \pm \frac{1}{2}) \right] ,$$

où τ est une variable auxiliaire. Si les fonctions φ_{ω}^{μ} sont normées suivant la condition :

$$\int \left(\varphi_{\omega}^{\mu} \right)^2 dx = 1 , \quad (11)$$

les fonctions $\Phi_{\omega}^{\mu} = e^{\sqrt{-1} \mu \tau} \varphi_{\omega}^{\mu}$ forment pour ω donné une base orthonormée d'une représentation unitaire de l'algèbre réelle $SO(2,1)$ liée à l'algèbre B_1 . ω est la valeur propre de l'opérateur de Casimir de l'algèbre et les valeurs de μ forment le spectre de J_3 dans cette représentation. Les représentations unitaires ainsi formées sont (Barut and Fronsdal 1965, Crubellier 1973) :

1) si $\frac{d}{a} > 0$, $\uparrow_{\mu_0}^*$ avec $\mu_0 - \frac{1}{2} > 0$; on a alors $\omega = \mu_0(\mu_0 - 1)$ et le spectre de J_3 est $\mu = \mu_0 + p$ (p entier ≥ 0).

2) si $\frac{d}{a} < 0$, $\downarrow_{\mu_0}^*$ avec $\mu_0 + \frac{1}{2} < 0$; on a alors $\omega = \mu_0(\mu_0 + 1)$ et le spectre de J_3 est $\mu = \mu_0 - p$ (p entier ≥ 0).

3) $D_p(E_0 \Phi)^*$ (représentations dites principales), où $\Phi + \frac{1}{2}$ est imaginaire pur ; on a alors $\omega = \Phi(\Phi + 1)$ et le spectre de J_3 est $\mu = E_0 + p$ (p entier).

Les opérateurs définis par :

$$T_q^{(k)} = e^{\sqrt{-1} q \tau} e^{kx}$$

forment des bases de représentations d'opérateurs tensoriels de l'algèbre. Ces représentations ne sont irréductibles que dans certains cas particuliers :

1) $2k$ entier < 0 et $-k - |q| = 0, 1, \dots, -k$ (représentation finie D^{-k}).

2) $2k$ entier ≥ 0 et soit $q \leq -k$ (représentation \downarrow_{-k}), soit $q \geq k$ (représentation \uparrow_k).

On peut cependant calculer également les éléments de matrice de certains opérateurs $T_q^{(k)}$ qui n'appartiennent pas à des représentations irréductibles. L'expression de ces éléments de matrice a été obtenue

(Crubellier 1973) pour des fonctions bra et ket appartenant à des représentations du type $\uparrow \mu_0^*$.

La transformation des équations (6) en équations du type B est réalisée au moyen des changements suivants :

$$\rho = e^{x/2}$$

$$F_{\pm} = e^{x/4} \varphi_{\pm} .$$

Ces équations deviennent alors :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{eB}{4c\hbar} \right)^2 e^{2x} - \frac{eB}{4c\hbar} \left(M \pm \frac{1}{2} + \frac{c\hbar}{eB} \lambda^2 \right) e^x - \frac{1}{4} \left(M \mp \frac{1}{2} \right)^2 \right] \varphi_{\pm} = 0 , \quad (12)$$

et les conditions (8) sont remplacées par :

$$\int \varphi_+^2 e^x dx = \int \varphi_-^2 e^x dx = 2N^2 . \quad (13)$$

Les équations (12) sont du type (10) si on fait les identifications suivantes :

$$a = 1$$

$$d = \frac{eB}{4c\hbar}$$

$$\mu_{\pm} = - \frac{1}{2} \left(M \pm \frac{1}{2} + \frac{1}{4d} \lambda^2 \right)$$

$$\omega_{\pm} + \frac{1}{4} = \frac{1}{4} \left(M \mp \frac{1}{2} \right)^2 .$$

Puisque $\frac{d}{a} > 0$ et $\omega + \frac{1}{4} > 0$, les seules représentations qui interviennent sont les représentations du type $\uparrow \mu_0^*$ ($\mu_0 - \frac{1}{2} > 0$) .

D'après les valeurs de ω_+ et ω_- on a :

$$\mu_{0\pm} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left| M \mp \frac{1}{2} \right| ,$$

et donc, puisque $\mu_{\pm} = \mu_{0\pm} + N_{\pm}$ (N_+ et N_- étant des entiers ≥ 0),

on a :

$$\lambda^2 = \frac{eB}{c\hbar} \left(M - \frac{1}{2} + \left| M - \frac{1}{2} \right| + 2N_+ - 2 \right)$$

$$= \frac{eB}{c\hbar} \left(M + \frac{1}{2} + \left| M + \frac{1}{2} \right| + 2N_- \right) .$$

On remarque que pour $M < 0$ et $N_- = 0$, on a $F_+ = 0$ (et donc N_+ n'a plus de signification), ce qui permet d'écrire finalement le spectre d'énergie sous la forme (9) .

En ce qui concerne les fonctions d'onde, si on note $\varphi_{\mu_0}^{\mu}$ les fonctions de base (normées suivant la condition (11)) des représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$, on a :

$$\varphi_{\pm} = C_{\pm} \varphi_{\mu_0 \pm}^{\mu_{\pm}} .$$

La présence des coefficients C_+ et C_- est due à la différence entre les conditions de normalisation (11) et (13) .

La forme explicite des fonctions $\varphi_{\mu_0}^{\mu}$ est la suivante :

$$\varphi_{\mu_0}^{\mu} = \left[\frac{(\mu - \mu_0)! (2\mu_0 - 1)!}{(\mu_0 + \mu - 1)! 3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-d(e^x)} (2de^x)^{\mu_0 - \frac{1}{2}} L_{\mu - \mu_0}^{2\mu_0 - 1} (2de^x) ,$$

où $L_n^a(x)$ est un polynôme de Laguerre ; on a, ici, $e^x = \rho^2$.

A partir des éléments de matrice des opérateurs $T_q^{(k)}$, pris entre des fonctions de base de représentations $\uparrow_{\mu_0}^*$, on peut calculer les intégrales radiales des opérateurs ρ^n , où n est entier. En effet celles-ci font intervenir les intégrales :

$$\int F_+^2 \rho^n d\rho , \int F_-^2 \rho^n d\rho \text{ et } \int F_+ F_- \rho^n d\rho ,$$

qui sont reliées simplement à des éléments de matrice de $T_q^{\left(\frac{n}{2} + 1\right)}$: la dernière intégrale, par exemple, s'écrit :

$$\begin{aligned} \int F_+ F_- \rho^n d\rho &= \frac{1}{2} \int \varphi_+ \varphi_- e^{(\frac{n}{2} + 1)x} dx \\ &= \frac{C_+ C_-}{2} \int \varphi_{\mu_{o+}}^{\mu_+} \varphi_{\mu_{o-}}^{\mu_-} e^{(\frac{n}{2} + 1)x} dx \\ &= \frac{C_+ C_-}{2} \left(\Phi_{\mu_{o+}}^{\mu_+} | T_{\mu_+ - \mu_-}^{(\frac{n}{2} + 1)} | \Phi_{\mu_{o-}}^{\mu_-} \right) . \end{aligned}$$

Une application particulière du calcul d'intégrales radiales est la détermination des coefficients C_+ et C_- . Ils sont en effet définis par :

$$C_{\pm}^2 \int (\varphi_{\mu_{o\pm}}^{\mu_{\pm}})^2 e^x dx = 2 \mathcal{N}^2$$

Or l'intégrale qui intervient ici est égale à un élément de matrice diagonal de l'opérateur $T_0^{(1)}$, dont l'expression générale est (Crubellier 1973) :

$$\left(\Phi_{\mu_o}^{\mu} | T_0^{(1)} | \Phi_{\mu_o}^{\mu} \right) = \frac{a}{2d} (2\mu_o - 1) .$$

Par conséquent :

$$C_{\pm} = \mathcal{N} \left[\frac{eB}{c\hbar (2\mu_{o\pm} - 1)} \right]^{\frac{1}{2}} .$$

Nous avons déjà signalé que le principal avantage de cette méthode d'étude des systèmes quantiques exactement solubles réside dans la possibilité de définir des opérateurs tensoriels simples et de calculer leurs éléments de matrice. Plus précisément dans le cas considéré, on calcule ainsi les intégrales radiales de ρ^n (n entier). Si l'on introduit au préalable un potentiel $V(z)$ qui lève la dégénérescence des niveaux d'énergie, ces intégrales radiales peuvent être utilisées

dans un calcul de perturbation. On pourrait ainsi étudier le système noyau électron dans un champ magnétique intense, en considérant le potentiel coulombien comme une perturbation (Hasegawa et Howard 1961). Il faut remarquer qu'on peut également, pour étudier ce même système, définir un potentiel effectif fonction de ρ et de z , qu'on développe au voisinage de la zone de plus grande attraction (Gajewski 1970). Avec cette approximation, on obtient des équations séparées qu'on peut transformer en équations factorisables du type B : on pourrait alors faire une étude en tous points analogue à celle développée ici et en utiliser les résultats dans un calcul perturbatif.

Références

- Armstrong L Jr 1970 J. Physique, Paris 31 C4-17-23
- Armstrong L Jr 1971 Phys. Rev. A 3 1546-50
- Armstrong L Jr 1971 J. Math. Phys. 12 953-7
- Barut A O and Fronsdal 1965 Proc. Roy. Soc. (London) A287 532-48
- Boon M H and Seligman T H 1973 J. Math. Phys. 14 1224-7
- Crubellier A 1973, to be published in the proceedings of the meeting
"Group Theoretical Methods in Physics"
(Nijmegen Netherland), edited by A. Janner.
- Crubellier A and Feneuille S 1971 J. Physique, Paris 32 405-11
- Cunningham M J 1972 J. Math. Phys. 13 33-9
- Dunlap B I and Armstrong L Jr 1972 Phys. Rev. A6 1370-4
- Feneuille S and Crubellier A 1972 J. Phys. A 5 944-9
- Gajewski R 1970 Physica 47 575-95
- Hasegawa H and Howard R E 1961 J. Phys. Chem. Solids 21 179-98
- Hautot A P 1970 Physica 48 609-19
- Infeld L and Hull T E 1951 Rev. of Mod. Phys. 23 21-68
- Johnson M H and Lippman B A 1949 Phys. Rev. 76 828-32
- Miller W Jr 1968 "Lie Theory and Special Functions"
(New York and London : Academic Press)
- Opechowski W and Tam W G 1969 Physica 42 529-56
- Yanagawa S 1973 Phys. Rev. D 7 2412-4

ANNEXE V

Application of the theory of Lie algebras
to exactly soluble quantum systems.

A. CRUBELLIER

Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S.II, 91405 Campus d'Orsay, France.

Abstract :

Starting from Miller's Lie algebraic interpretation of the properties of factorizable second order differential equations, the solutions of exactly soluble quantum systems are examined using group theory. These solutions are associated to basis functions of irreducible representations of the corresponding Lie algebras, and the normalization conditions are related to the unitarity of these representations. Tensor operators are then defined, which allows us to calculate some matrix elements of physical interest. This procedure is illustrated by some examples.

I. INTRODUCTION

One of the most powerful methods for solving eigenvalues problems appearing in quantum theory is the factorization method, originated by Schrödinger [1] and due in its definitive form to Infeld and Hull [2].

Miller, in his book : Lie Groups and Special Functions [3], has shown that there is a complete equivalence between this method and the study of realizations of the Lie algebras $G(\alpha, \beta)$ by differential operators in two variables. He used this approach for the study of the special functions : Bessel functions, confluent hypergeometric and hypergeometric functions (see also [4]).

This method can also be used for the study of the wavefunctions of quantum system whose Schrödinger or Dirac equations are separable into factorizable second order differential equations. This was done for the first time by Armstrong [5, 6] for the radial wavefunctions of the hydrogenic atom, utilizing an $SO(2,1)$ symmetry. The main contribution of Armstrong in that paper is the introduction, in this non compact group, of the concept of tensor operators. This concept is extremely useful and has been extensively used in the application of compact groups to the theory of atomic structure [7,8].

Another study of the relation between factorization method and group theory has been done by Carlstone [9] (but it does not allow one to define tensor operators). Various similar approaches have already been used for some other physical problems :

- 1) The harmonic oscillator in three dimensions [10] (see also [11,12]),
- 2) Hulthén potential in one dimension [13],
- 3) Relativistic Kepler problem with and without magnetic charges [14,16] (see also [17,21]).

However it is possible to give a general formulation, which allows us to study group theoretically any soluble quantum system. The main points of this generalization are described in this paper and they are illustrated by a few examples (the details will be published elsewhere).

In section II, we recall the main results of Miller concerning the relation between the factorizable equations and the associated Lie algebras. Then, after recalling how the irreducible and unitary representations of the considered Lie (abstract) algebras can be characterized, we investigate in more detail the relation between the normalization conditions for the wavefunctions and the unitary conditions for the representations.

In section III, we give for each realization of the considered Lie algebras the tensor operators which are functions only of the two variables, and we give an example of calculation of matrix elements of such tensor operators.

Section IV is devoted to survey the various physical problems which can be investigated by these techniques and a detailed discussion of one example is given.

II. ALGEBRAS AND REPRESENTATIONS.

The only algebras which are of interest to us for the study of factorizable equations are of the type $G(\alpha, \beta)$ which has been defined by Miller [3]. We first recall the definition of these algebras. They are spanned by four infinitesimal operators, J_3, J_+, J_- and E , satisfying the following commutation relations :

$$\begin{aligned} [J_3, J_{\pm}] &= \pm J_{\pm} \\ [J_+, J_-] &= 2\alpha^2 J_3 - \beta E \\ [J_3, E] &= [J_{\pm}, E] = 0, \end{aligned} \tag{II.1}$$

where α and β are complex numbers. In fact only three cases for the values of α and β have to be considered :

- 1) If α is different from zero, all the $G(\alpha, \beta)$ algebras are isomorphic to $G(1, 0)$; which is itself the direct sum of the algebra spanned by E and of the simple Lie algebra B_1 (in Cartan's notation) spanned by J_3, J_+ and J_- .
- 2) The algebras $G(0, \beta)$ are all isomorphic to $G(0, 1)$, which is not semi simple since E obviously spans a proper abelian ideal.
- 3) Finally $G(0, 0)$ is a direct sum of the algebra spanned by E and of the algebra spanned by the three other operators. The latter is called \mathcal{C}_3 by Miller and it is also not semi simple since J_+ and J_- span a proper abelian ideal.

Thus it is clear that we can restrict our attention to the three algebras $B_1, G(0, 1)$ and \mathcal{C}_3 .

In the following, we will need an invariant of these algebras. One of the invariants of $G(\alpha, \beta)$ is given by Miller :

$$C_{\alpha\beta} = J_+ J_- + \alpha^2 J_3^2 - \alpha^2 J_3 - \beta J_3 E \quad (\text{II.2})$$

and obviously C_{10} , C_{01} and C_{00} are respectively invariants of B_1 , $G(0,1)$ and \mathcal{C}_3 . They will be called in each case Ω .

As shown by Miller [3], a realization of a Lie algebra of the type $G(\alpha,\beta)$ (or equivalently of one of the algebras B_1 , $G(0,1)$ or \mathcal{C}_3) can be associated to Infeld and Hull's factorizable equations of the types A, B, C and D (the types E and F can also be studied using a Lie algebra, but indirectly ; they are related respectively to A and B types). We give in table 1 a list of these equations and the corresponding Lie algebras. We are concerned only with real equations in one real variable. In order to utilize Lie algebra in our study, it is necessary to introduce a supplementary variable, which can be taken as either real or imaginary. It will be introduced such that $J_3 = -i\partial_\tau$ always. Finally our notation is very similar to that of Infeld and Hull [2]. However the ladder operators defined by these authors must be slightly modified in order to put the commutation relations in a standard form. Moreover we have transformed a little bit the equations in order to introduce explicitly the respective eigenvalues μ and ω of the operators J_3 and Ω . We note that the equations also contain other parameters (a, b, d) ; the role of these parameters is discussed further below.

With these notations, the eigenfunctions of J_3 and Ω , which are basis functions of representations of the algebra, can be written for each realization :

$$\Phi_{\omega}^{\mu}(x, \tau) = e^{i\mu\tau} \varphi_{\omega}^{\mu}(x) , \quad (\text{II.3})$$

where $\varphi_{\omega}^{\mu}(x)$ is a solution of the corresponding differential equation.

To be quantum solutions the wavefunctions have to be normalized.

It can be shown that, if the factorizable equation in its standard form (cf table 1) is obtained from the Schrödinger or Dirac equation without changing the variable, the normalization condition can always be written

$$\int_{\text{D}} \varphi_{\omega}^{\mu}(x)^2 dx = 1 , \quad (\text{II.4})$$

where the integral runs over the whole domain of x . Then if we introduce in the space of the functions $\Phi(x, \tau)$ a scalar product defined by :

$$(\Phi | \Phi') = \int_0^{2\pi} \frac{d\tau}{2\pi} \int_{\text{D}} dx \Phi(x, \tau)^* \Phi'(x, \tau) , \quad (\text{II.5})$$

it is clear that the normalization condition (II.4) implies that :

$$(\Phi_{\omega}^{\mu} | \Phi_{\omega}^{\mu}) = 1 . \quad (\text{II.6})$$

Thus the wavefunctions are associated with normalized basis functions of some representations of the Lie algebra. In order to characterize these representations, we first recall the irreducibility and unitarity conditions of the representations of the three abstract Lie algebras B_1 , $G(0,1)$ and \mathcal{C}_3 .

The classification of the irreducible representations of the Lie algebras $G(\alpha, \beta)$ is given by Miller [3]. If the eigenvalues of J_3 are non degenerate (for an irreducible representation if one eigenvalue is simple they are all simple), any irreducible representation has a countable basis consisting of eigenvectors of J_3 such that $\mu = E_0 + p$ (where $-\frac{1}{2} \leq E_0 < \frac{1}{2}$ and p belongs to a set of integers). The basis vectors can be written $|\omega\mu\rangle$ for B_1 and \mathcal{C}_3 and $|\omega\mu e\rangle$

for $G(0,1)$, where e is the eigenvalue of E .

Thus we have, for B_1 and \mathcal{C}_3 :

$$\begin{aligned} J_3 |\omega\mu\rangle &= \mu |\omega\mu\rangle \\ J_+ |\omega\mu\rangle &= \alpha_+^{\mu+1} |\omega, \mu+1\rangle \\ J_- |\omega\mu\rangle &= \alpha_-^\mu |\omega, \mu-1\rangle \\ \Omega |\omega\mu\rangle &= \omega |\omega\mu\rangle \end{aligned} \quad (II.7)$$

Because of the expressions of Ω , one has obviously for B_1 and \mathcal{C}_3 respectively:

$$\omega = \alpha_+^\mu \alpha_-^\mu + \mu^2 - \mu \quad (II.8)$$

and
$$\omega = \alpha_+^\mu \alpha_-^\mu .$$

Similarly we have for $G(0,1)$:

$$\begin{aligned} J_3 |\omega e \mu\rangle &= \mu |\omega e \mu\rangle \\ J_+ |\omega e \mu\rangle &= \alpha_+^{\mu+1} |\omega e, \mu+1\rangle \\ J_- |\omega e \mu\rangle &= \alpha_-^\mu |\omega e, \mu-1\rangle \\ E |\omega e \mu\rangle &= e |\omega e \mu\rangle \\ \Omega |\omega e \mu\rangle &= \omega |\omega e \mu\rangle \end{aligned} \quad (II.10)$$

where
$$\omega = \alpha_+^\mu \alpha_-^\mu - \mu e . \quad (II.11)$$

All the irreducible representations of the three abstract Lie algebras (whose eigenvalues of J_3 are simple) are given in table 2. In fact there are various techniques to obtain them. One of them, very similar to the method of Joseph [22] (and also to the factorization method itself), appears to be particularly convenient. The basis is constructed using the shift operators, which is very practical for obtaining explicitly the basis functions of the irreducible representations of the realizations that we consider.

Unitarity conditions for irreducible representations of the real forms of these complex Lie algebras are also given in table 2.

The properties of the two real forms of B_1 , that is $SO(3)$ and $SO(2,1)$ (algebras of the two real Lie groups $SO(3)$ and $SO(2,1)$), are well known (see for example Barut and Fronsdal [23]).

The unitarity conditions may be written :

$$\begin{aligned} (J_3)^+ &= J_3 \\ (J_{\pm})^+ &= \epsilon J_{\mp} \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

where ϵ is equal to +1 for $SO(3)$ and to -1 for $SO(2,1)$.

For $G(0,1)$ and \mathcal{C}_3 , the real forms are respectively called S_4 and \mathcal{E}_3 by Miller and the unitarity conditions are :

$$\begin{aligned} J_3^+ &= J_3 \\ (J_{\pm})^+ &= \epsilon J_{\mp} \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

(where ϵ can take the value +1 in some representations and -1 in the others), and for $G(0,1)$:

$$E^+ = E$$

For the two latter algebras, the results given in table 2 are not exactly those of Miller [3], which concern the irreducible representations of $G(0,1)$ and \mathcal{C}_3 induced by and inducing unitary representations of the local real Lie groups S_4 and E_3 . Thus our conditions are less restrictive than those of Miller.

Although the wavefunctions $\phi_w^{\mu}(x)$ are related to normalized basis vectors of some representations of the realizations, it is not obvious that these representations are in any case unitary, unless the algebra is an invariant algebra of the system. Nevertheless it is

important to find first the basis functions of the unitary representations of the realizations. With the scalar product which has been defined in Eq. (II.5), it can be shown that the relationships between the operators and their adjoints are such that the unitary representations of each realization of table 1 are unitary representations of a real Lie algebra. The correspondence is the following :

$$\begin{aligned}
 A_1 &\rightarrow SO(3) \\
 A_2, A_3, B &\rightarrow S_4 \\
 C', D' &\rightarrow S_4 \\
 C'', D'' &\rightarrow \mathcal{C}_3 .
 \end{aligned}$$

(For the C and D realizations Eqs. (II.12) appear with $\epsilon = +1$, thus the unitarity conditions must contain the condition $\alpha_+^{\mu*} = +\alpha_-^{\mu}$).

This is true provided that the domain of the operators is contained in a space V of functions $\Phi(x\tau)$ which are periodic in τ (except for a non periodic dependence which is the same for all the functions of the space) and vanish at the limits of the domain of x . The functions which can be constructed using Eqs. (II.7) or (II.10) with the explicit form of the shift operators of table 1 are not necessarily contained in a space V (even if the unitarity conditions of the abstract algebra (table 2) are met). However one can show that, if certain relationships exist between the parameters of the differential equations (a, b, d), and the eigenvalues μ and ω , the eigenfunctions will belong to V. These relationships are described in table 3. There are, in addition to these unitary representations, non unitary representations which contain some normalizable basis functions : these are described in table 4. In order to simplify this table, we have used

the fact that the equations of table 1 are invariant under some formal exchanges between the parameters and the eigenvalues, which are also listed. We see in this table that in some cases (B and D) all normalized basis functions belong to unitary representations. Unfortunately this is not generally true, which introduces some complications in the use of the formalism. We do not give here the explicit form of the basis functions. It is only noted that, according to Miller's results, they are related to the special functions : Bessel functions for C'' , confluent hypergeometric functions for B, C' and D' (for the bounded representations it becomes Laguerre or Hermite polynomials), and hypergeometric functions for A₁ and A₂ .

III. TENSOR OPERATORS, MATRIX ELEMENTS

As it has been previously seen, Lie algebra theory is very useful for finding and labeling the normalizable solutions of factorizable equations.

This might seem to be of rather formal interest, since at the present time the most part of exactly soluble quantum systems has been already solved.

The important point is that this formulation enables one to find tensor operators and then to calculate their matrix elements. The practicality of this approach for the study of perturbations or transition probabilities depends of course on the form of these tensor

operators. In any case, it avoids explicit use of special functions and provides a systematic way of calculation, directly related to the symmetry properties of the system.

The tensor operators T_{μ}^{ω} of the algebras are defined by commutation relations which are (with exactly the same notation that is used in the previous section) :

$$\begin{aligned} [J_z, T_{\mu}^{\omega}] &= \mu T_{\mu}^{\omega} \\ [J_+, T_{\mu}^{\omega}] &= \alpha_{+}^{\mu+1} T_{\mu+1}^{\omega} \\ [J_-, T_{\mu}^{\omega}] &= \alpha_{-}^{\mu} T_{\mu-1}^{\omega} \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

For $G(0,1)$, we have the supplementary relation :

$$[E, T_{\mu}^{\omega}] = e T_{\mu}^{\omega} .$$

For each realization of table 1, we consider only tensor operators which are functions of the two variables x and τ , that is of the form :

$$T_{\mu}^{\omega} = e^{i\mu\tau} F_{\mu}^{\omega}(x)$$

For the applications, the important point is neither the irreducibility nor the unitarity of the representations of tensor operators, but the possibility to obtain some functions $F_{\mu}^{\omega}(x)$ which are as simple as possible, so that one can write the physical operators (perturbation or transition operators) as a sum of tensor operators.

One can show that, for all the representations of tensor operators, $F_{\mu}^{\omega}(x)$ can be written as a linear combination of two functions, $U_{\mu}^{\omega}(x)$ and $V_{\mu}^{\omega}(x)$ where $V_{\mu}^{\omega}(x) = U_{-\mu}^{\omega}(x)$. We give in table 5 a list of the functions $U_{\mu}^{\omega}(x)$ for the different realizations.

For the tensor operators which have been defined, the matrix elements can be written :

$$\langle \Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\mu''}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\tau}{2\pi} \int_D dx e^{-i(\mu - \mu'' - \mu')\tau} \Phi_{\omega}^{\mu}(x) F_{\mu''}^{\omega''}(x) \varphi_{\omega'}^{\mu'}(x). \quad (\text{III.3})$$

If $\mu - \mu'' - \mu'$ is integer it becomes :

$$= \delta_{\mu, \mu' + \mu''} \int_D dx \varphi_{\omega}^{\mu}(x) F_{\mu - \mu'}^{\omega''}(x) \varphi_{\omega'}^{\mu'}(x) \quad , \quad (\text{III.4})$$

and the only integrals of interest here are of this type. The possibility of using the Wigner-Eckart theorem in the computation of the matrix elements must be discussed. If it applies the calculation can be separated in two parts : Clebsch-Gordan coefficients and reduced matrix elements. A number of Clebsch-Gordan coefficients of interest have been computed, in particular for $SO(2,1)$ [24,25] and also S_4 [26]. However, even if it applies for the non compact groups which are involved here, there remains some difficulties which may prevent the use of the Wigner-Eckart theorem. The most important one is that we are interested, as shown in the previous part, in some basis functions of non-unitary representations. Moreover, we will even use some representations of tensor operators which are not completely reducible.

However we can use the group properties in another way. In fact, most of the methods used for computing Clebsch-Gordan coefficients (ref [24,25] for example) are based on recurrence relations. This enables us to use, as Armstrong does in ref. [10], similar relations between matrix elements and to compute them directly. This procedure

is convenient in particular because we can test the validity at each step of the calculation.

The recurrence relations are obtained from the two equations :

$$\langle \Phi_{\omega}^{\mu} | J_{\pm} T_{\mu''}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle - \langle \Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\mu''}^{\omega''} J_{\pm} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle = \langle \Phi_{\omega}^{\mu} | [J_{\pm}, T_{\mu''}^{\omega''}] | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle \quad (\text{III.5})$$

(which hold if all the matrix elements are non infinite).

Then, if the unitarity conditions (II.12) or (II.13) are satisfied for the functions which are involved, one can write :

$$\epsilon \alpha_{+}^{\mu+1} \langle \Phi_{\omega}^{\mu+1} | T_{\mu''}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle - \beta_{-}^{\mu'} \langle \Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\mu''}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'-1} \rangle = \gamma_{-}^{\mu''} \langle \Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\mu''-1}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle \quad (\text{III.6})$$

$$\epsilon \alpha_{-}^{\mu} \langle \Phi_{\omega}^{\mu-1} | T_{\mu''}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle - \beta_{+}^{\mu'+1} \langle \Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\mu''}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'+1} \rangle = \gamma_{+}^{\mu''+1} \langle \Phi_{\omega}^{\mu} | T_{\mu''+1}^{\omega''} | \Phi_{\omega'}^{\mu'} \rangle$$

where the α_{\pm} , β_{\pm} , γ_{\pm} coefficients are respectively the matrix elements of J_{\pm} in the representations of the algebra of which Φ_{ω}^{μ} , $\Phi_{\omega'}^{\mu'}$ and $T_{\mu''}^{\omega''}$ are basis vectors.

We do not give here a complete list of the matrix elements which can be obtained in this way, but only those which we need for the application we study here : that is the matrix elements in which the wavefunctions are basis functions of representations of the type $\uparrow_{\mu_0}^*$ of the realization B of $SO(2,1)$. The interesting tensor operators are :

1) $P_q^k = e^{iq\tau} e^{-kx}$, where $2k$ is a nonnegative integer, which form for $k-|q| = 0, 1, 2, \dots, k$ a basis for a representation D^k (which is of course non unitary for $SO(2,1)$).

2) $Q_q^k = e^{iq\tau} e^{kx}$, where $2k$ is an integer ≥ 0 . They form for $q \leq -k$ and for $q \geq k$ two irreducible representations, respectively \downarrow_{-k} and \uparrow_k , but for the applications we shall need the particular value $q=0$,

which never belongs to an irreducible representation.

The matrix elements are finally given by the following formulas :

$$\begin{aligned}
 & \left(\Phi_{\mu_0}^{\mu} \left| P_{\mu-\mu'}^k \right| \Phi_{\mu_0}^{\mu'} \right) \\
 &= \left[\frac{\Gamma(2\mu_0) \Gamma(2\mu_0') \Gamma(\mu+\mu_0) (\mu'-\mu_0)!}{\Gamma(\mu'+\mu_0') (\mu-\mu_0)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\Gamma(k+\mu_0+\mu_0')} \\
 & \times \sum_t (-)^t \frac{(k+\mu-\mu_0'-t)! \Gamma(k+\mu_0+\mu'-t)}{t! (\mu'-\mu_0'-t)! \Gamma(\mu+\mu_0-t) (k+\mu_0-\mu_0'-t)!} \\
 & \times \left(\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} \left| P_{\mu_0-\mu_0'}^k \right| \Phi_{\mu_0}^{\mu_0'} \right) \tag{III.7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left(\Phi_{\mu_0}^{\mu} \left| Q_{\mu-\mu'}^k \right| \Phi_{\mu_0}^{\mu'} \right) \\
 &= \left[\frac{\Gamma(2\mu_0) \Gamma(2\mu_0') \Gamma(\mu+\mu_0) (\mu-\mu_0)! (\mu'-\mu_0')!}{\Gamma(\mu'+\mu_0')} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{(k-\mu_0+\mu_0'-1)!}{(k+\mu-\mu'-1)!} \\
 & \times \sum_p \frac{(k+\mu-\mu_0'-p-1)!}{p! (\mu-\mu_0-p)! (\mu'-\mu_0'-p)! \Gamma(\mu+\mu_0-p) (k-\mu+\mu_0'+p-1)!} \\
 & \times \left(\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} \left| Q_{\mu_0-\mu_0'}^k \right| \Phi_{\mu_0}^{\mu_0'} \right) \tag{III.8}
 \end{aligned}$$

The two matrix elements which remain in the previous formulas are easy to evaluate, because of the particularly simple form of basis functions of smallest (or largest) μ of the bounded below (or above) representations. One obtains here :

$$\left(\Phi_{\mu_0}^{\mu_0} \left| e^{i(\mu_0-\mu_0')\tau} e^{Kx} \right| \Phi_{\mu_0}^{\mu_0'} \right) = \left(\frac{\mathbf{a}}{2\mathbf{d}} \right)^K \frac{\Gamma(K+\mu_0+\mu_0'-1)}{[\Gamma(2\mu_0-1) \Gamma(2\mu_0'-1)]^{\frac{1}{2}}} \tag{III.9}$$

which holds for any K .

There are some selection rules on these matrix elements, which come from the decomposition of the Kronecker products ; for example the first matrix element is different from zero only if $k \geq |\mu_0 - \mu'_0|$. For the second, if $Q_{\mu-\mu'}^k$ belongs to the representation \uparrow_k , that is if $\mu - \mu' \geq k$, the matrix element is different from zero only if $k \leq \mu'_0 - \mu_0$.

IV. PHYSICAL EXAMPLES.

A great number of examples can be studied in such a way. The procedure is the following : First the Schrödinger or Dirac equation of the system is separated in some coordinates (it is not always straightforward, especially for Dirac equations). Then the separated equation is, if necessary, transformed in such a way that a factorizable equation A, B, C or D is obtained. After that the results of part II are in principle sufficient to obtain the eigenvalues and eigenfunctions (in fact some complication may be involved when the factorizable equation is obtained by a change of the variable). Finally we are able to calculate the integrals of the tensor operators we have defined in part III. However some restrictions may appear on the quantum numbers which are in the integrals we are able to calculate (this may happen also when the factorizable equation is obtained by changing the variable).

We describe the main points of this procedure for one particular example : the relativistic Kepler problem, which has been studied by

the same technique (with another notation) in ref. [14].

The well known radial equations coming from the Dirac equation of the hydrogenic atom (see for example [27]), which is separable in spherical coordinates, are, in atomic units :

$$\begin{cases} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right) G(r) = \left(1 + E + \frac{\alpha Z}{r}\right) F(r) \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right) F(r) = \left(1 - E - \frac{\alpha Z}{r}\right) G(r) \end{cases} \quad (\text{IV.1})$$

where $F(r)$ and $G(r)$ are the two radial wavefunctions, $\kappa = \pm(j + \frac{1}{2})$, j is the angular momentum and E the energy. We deal only with bounded states (that is : $1-E > 0$).

Let us set :

$$\begin{aligned} r &= e^x \\ F(r) &= \sqrt{1-E} (\Psi_-(x) - \Psi_+(x)) \\ G(r) &= \sqrt{1+E} (\Psi_-(x) + \Psi_+(x)) . \end{aligned} \quad (\text{IV.2})$$

The system (IV.1) becomes :

$$\begin{cases} \left(\frac{d}{dx} - \sqrt{1-E^2} e^x + E\delta\right) \Psi_-(x) = -(\kappa + \delta) \Psi_+(x) \\ \left(\frac{d}{dx} + \sqrt{1-E^2} e^x - E\delta\right) \Psi_+(x) = -(\kappa - \delta) \Psi_-(x) \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

where $\delta = \frac{Z\alpha}{\sqrt{1-E^2}}$

Thus Ψ_+ and Ψ_- are solutions of the following second order differential equations :

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - (1-E^2) e^{2x} + 2\sqrt{1-E^2} (E\delta \pm \frac{1}{2}) e^x - \kappa^2 + Z^2\alpha^2\right] \Psi_{\pm} = 0 \quad (\text{IV.4})$$

with the normalization condition :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [2(\Psi_+^2 + \Psi_-^2) + 4E \Psi_+ \Psi_-] e^x dx , \quad (\text{IV.5})$$

which derives from the usual one :

$$\int_0^{+\infty} (F^2 + G^2) dr = 1 . \quad (\text{IV.6})$$

The equations (IV.4) are factorizable equations of the type B ,
in which the parameters are identified as :

$$\begin{aligned} a &= 1 \\ d &= \sqrt{1-E^2} \\ \omega + \frac{1}{4} &= \kappa^2 - Z^2 \alpha^2 \\ \mu &= \mu_{\pm} = E\delta \pm \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Two points have to be emphasized. First, d depends on the energy, thus we do not find a single realization for which the basis functions of the representations are the eigenfunctions Ψ_{\pm} , but many realizations, which are different for every value of E . Second, the normalization condition (IV.5) does not coincide with the one which derives from the definition of the scalar product that is given in sect. II . However one can show that the consequence of the second point is only that the (physically) normalized functions Ψ_{\pm} are proportionnal, instead of equal, to basis functions $\varphi_{\mu_0}^{\mu}$ of representations of the type $\uparrow_{\mu_0}^*$ of the realization of the algebra $SO(2,1)$ (with $a=1$ and $d = \sqrt{1-E^2}$). Thus one can write :

$$\Psi_{\pm} = C_{\pm} \varphi_{\mu_0}^{\mu_{\pm}} , \quad (\text{IV.7})$$

where

$$\begin{cases} \mu_0 = \gamma + \frac{1}{2} \\ \mu_{\pm} = \gamma \pm \frac{1}{2} + N . \end{cases}$$

$\gamma = \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2 Z^2}$ and N is an integer ≥ 0 . N is related to the usual radial quantum number n by $N = n - |\kappa|$.

$N=0$ is a singular case ; one can show that in this case $\Psi_- = 0$.
 The C_{\pm} are determined by the condition (IV.5) and we shall calculate them below using the matrix elements of some tensor operators .

The corresponding eigenvalues of E are given by $E\delta = \gamma + N$ and are :

$$E = \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(\gamma+N)^2}\right)^{-\frac{1}{2}} . \quad (\text{IV.8})$$

The calculation of matrix elements can of course be made only in a single realization. Thus only radial integrals diagonal in E (that is in n and j) can be calculated. The radial integrals of r^K (K integer) can be obtained directly from the matrix elements of the tensor operators P_q^k and Q_q^k (Sect. III) diagonal in μ_0 .

The constants C_{\pm} can be calculated as a first application. We first notice that if we write :

$$\begin{aligned} \Psi_+ &= -\sqrt{\delta-\kappa} \bar{\Psi}_+ \\ \Psi_- &= \sqrt{\delta+\kappa} \bar{\Psi}_- \end{aligned} \quad (\text{IV.9})$$

the system (IV.3) becomes identical to shift relations of the type (II.7) or (II.10), written for an orthonormal basis of an unitary representation $\uparrow_{\mu_0}^*$. Thus :

$$\frac{C_+}{-\sqrt{\delta-\kappa}} = \frac{C_-}{\sqrt{\delta+\kappa}} = C$$

Then C is defined by :

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ 2[(\delta+\kappa)(\varphi_{\mu_0}^{\mu-})^2 - (\delta-\kappa)(\varphi_{\mu_0}^{\mu+})^2] - 4E\sqrt{\delta^2-\kappa^2} \varphi_{\mu_0}^{\mu-} \varphi_{\mu_0}^{\mu+} \right\} e^x dx \quad (\text{IV.8})$$

and its value is obtained from the matrix elements $\langle \Phi_{\mu_0}^{\mu} | Q_{\mu-\mu}^1 | \Phi_{\mu_0}^{\mu'} \rangle$. The non diagonal one is equal to zero because of a selection rule (Q_1^1 belongs to a irreducible representation \uparrow_1), and one finally obtains :

$$C = \frac{\sqrt{1-E^2}}{2\sqrt{Z\alpha\gamma}} \quad (\text{IV.10})$$

Many other interesting radial integrals of r^K (diagonal in n and j) can be obtained ; for example the relativistic Landé factor contains the integral $\int F G r dr$ which we are able to evaluate exactly. One can also evaluate the radial integrals which appear in the atomic hyperfine structure (magnetic dipolar and electric quadrupolar). These integrals allows us to obtain the famous Casimir corrections in a completely correct way ; up to now these corrections were calculated only in an approximative and rather complicated manner. These results are given in ref. [14].

Some other examples of this procedure are described (with another notation) in refs. [6, 10, 13, 14]. There are many other problems for which such an approach is possible and suitable ; we shall give, for each type of realization, only a list of the most significant of them.

Realisations A_1 are found in the following cases : spherical harmonics, symmetric top, angular part of the (relativistic or not) Kepler problem with magnetic charges [16, 20, 21] (in all these cases, the supplementary variable τ can be identified to a physical one and the algebra is an invariant one), Pöschl-Teller and Rosen-Morse potentials [2] (which are molecular vibrationnal models).

Realizations A_2 are found for the Hulthén potential [13], the Manning-Rosen and Pöschl-Teller potential [2] (the two latter are also molecular vibrational potentials).

Realizations B and C' (it can be shown that every C' factorizable equation can be transformed into a B equation and conversely) are the most important for the applications, in particular because of the simple form of the tensor operators of the realization B.

Such realizations are obtained for the radial part of the Kepler problem with and without magnetic charges, relativistic or not [14, 21]; for the harmonic oscillator in three dimensions [10] (in this case the realization B is closely related to the quasi-spin algebra [12]); for the problem of one electron in a uniform magnetic field, relativistic or not (the realization C' is then related to an invariant algebra); and for the Morse potential [2].

The typical example for the realization D' is the linear oscillator, and similar problems are described by Infeld and Hull [2].

Finally a realization C'' is found when the wavefunctions are Bessel functions.

It appears then that there is a large domain of application of the method described in this paper. In all cases, it provides a simple and systematic means for studying exactly soluble quantum systems. Some matrix elements have been already obtained which are of interest. There are, of course, many areas in physics where these exactly soluble systems are used as a first approximation to a more

complicated system. For example, Layzer [28] has developed a perturbation scheme for the many electron atom which uses hydrogenic wavefunctions ; and the harmonic oscillator wavefunctions are often used in atomic and nuclear calculations [29] . The most interesting problem which remains is to determine if the techniques described in this paper can be used to extend and facilitate such studies.

REFERENCES

- [1] E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. A46, 9 (1940)
- [2] L. Infeld and T. E. Hull, Rev. of Mod. Phys. 23, 21 (1951).
- [3] W. Miller, Jr., "Lie Theory and Special Functions",
Academic Press, New York and London (1968)
- [4] N. Y. Vilenkin, "Special Functions and the Th. of Group rep.",
AMS transl., Providence, Rhode Island (1968)
- [5] L. Armstrong, Jr., J. Physique (Paris) 31, C4-17 (1970)
- [6] L. Armstrong, Jr., Phys. Rev. A 3, 1546 (1971)
- [7] B. R. Judd, "Operator Techniques in Atomic Spectroscopy",
McGraw-Hill, New York (1963)
- [8] S. Feneuille, J. Physique (Paris) 28, 61 (1967)
- [9] D. S. Carlstone, Am. Journ. of Phys. 40, 1459 (1972)
- [10] L. Armstrong, Jr., J. Math. Phys. 12, 953 (1971)
- [11] C. Quesne and M. Moshinsky, J. Math. Phys. 12, 1780 (1971)
- [12] A. Crubellier and S. Feneuille, "The Structure of Matter", edited
by B. G. Wybourne, University of Canterbury, New Zealand
(1972)
- [13] B. I. Dunlap and L. Armstrong, Jr., Phys. Rev. A 6, 1370 (1972)
- [14] A. Crubellier and S. Feneuille, J. Physique (Paris) 32, 405 (1971)
- [15] M. J. Cunningham, J. Math. Phys. 13, 33 (1972)
- [16] S. Feneuille and A. Crubellier, J. Phys. A 5, 944 (1972)
- [17] H. Bacry and J. L. Richard, J. Math. Phys. 8, 2230 (1967)
- [18] L. C. Biedenharn and N. V. V. J. Swamy, Phys. Rev. B 133, 1353 (1964)
- [19] N. V. V. J. Swamy, R. G. Kulkarni and L. C. Biedenharn,
J. Math. Phys. 11, 1165 (1970)

- [20] M. Berrondo and H. V. McIntosh, J. Math. Phys. 11, 125 (1970)
- [21] A. O. Barut and G. L. Bornzin, J. Math. Phys. 12, 841 (1971)
- [22] D. W. Joseph, J. Math. Phys. 11, 1249 (1970)
- [23] A. O. Barut and C. Fronsdal, Proc. Roy. Soc.(London) A287, 532 (1965)
- [24] W. J. Holman and L. C. Biedenharn, Jr., Ann. of Phys. 47, 205 (1968)
- [25] K. H. Wang, J. Math. Phys. 11, 2077 (1970)
- [26] W. Miller, Jr., J. Math. Phys. 13, 648 (1972)
- [27] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, "Quantum Mechanics of One- and
Two-Electron atoms", Academic Press, New York (1957)
- [28] D. Layzer, Ann. of Phys. 8, 271 (1959)
- [29] M. Moshinsky, "Harmonic Oscillator in Modern Physics : from Atoms
to Quarks", Gordon and Breach, New York (1969).

1 - FACTORIZABLE EQUATIONS AND ASSOCIATED LIE ALGEBRAS

Type of factorization	Equations	Associated Lie algebra	Infinitesimal operators	Name of the realization
A	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{a^2(\mu - \frac{1}{4}) + d^2 + 2ad\mu \cos a(x+p)}{\sin^2 a(x+p)} \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	B ₁	$J_3 = -i\partial\tau$	A ₁ a, d, p real
			$J_\pm = \frac{\pm i\tau}{a} \left[\mp \partial x + (-i\partial\tau \pm \frac{1}{2})a \cot a(x+p) + \frac{d}{\sin a(x+p)} \right]$	A ₂ a, d imag. p real
B	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - d^2 e^{2ax} + 2ad\mu e^{ax} - a^2(\omega + \frac{1}{4}) \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	B ₁	$J_3 = -i\partial\tau$	B a, d real
			$J_\pm = \frac{\pm i\tau}{a} \left[\partial x \mp de^{ax} \pm a(-i\partial\tau \pm \frac{1}{2}) \right]$	
C	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{\mu - \frac{1}{4}}{x^2} - \frac{b^2 x^2}{16} + \frac{b(\mu+1)+\omega}{2} \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	(if b ≠ 0, G(01)) (if b = 0, ℒ ₃)	$J_3 = -i\partial\tau$	C' b real
			$J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial x + \frac{-i\partial\tau \pm \frac{1}{2}}{x} + \frac{bx}{4} \right]$	
D	$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{bx}{2} + d\right)^2 + b(\mu + \frac{1}{2}) + \omega \right] \varphi_\omega^\mu = 0$	(if b ≠ 0, G(01)) (if b = 0, ℒ ₃)	$J_3 = -i\partial\tau$	C'' b, d real
			$J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial x + \frac{bx}{2} + d \right]$	
		(if b = 0, ℒ ₃)	$J_3 = -i\partial\tau$	D'' d real
			$J_\pm = e^{\pm i\tau} \left[\mp \partial x + d \right]$	

2 - REPRESENTATIONS OF THE LIE ALGEBRAS B_1 , $G(0,1)$, C_3 .

IRREDUCIBLES REPRESENTATIONS				UNITARY REPRESENTATIONS		
Complex Lie Algebra	Name of the I.R.	Spectrum of J_3	Eigenvalue of Ω	Real Lie Algebra	Unitarity conditions	Name of the U.R.
B_1	D^{μ_0} ($2\mu_0$ integer ≥ 0)	$\mu_0 - \mu = 0, 1, 2, \dots$	$\mu_0(\mu_0 + 1)$	$SO(3)$	$\alpha_+^{\mu^*} = \alpha_-^{\mu}$	D^{μ_0} *
	$\downarrow \mu_0$ ($2\mu_0$ not integer ≥ 0)	$\mu = \mu_0 - p$ (p integer ≥ 0)	$\mu_0(\mu_0 + 1)$	$SO(2, 1)$	μ_0 real < 0 ; $\alpha_+^{\mu^*} = -\alpha_-^{\mu}$	$\downarrow \mu_0$ *
	$\uparrow \mu_0$ ($2\mu_0$ not integer ≤ 0)	$\mu = \mu_0 + p$ (p integer ≥ 0)	$\mu_0(\mu_0 - 1)$	$SO(2, 1)$	μ_0 real > 0 ; $\alpha_+^{\mu^*} = -\alpha_-^{\mu}$	$\uparrow \mu_0$ *
$G(0, 1)$	$D(E_0 \Phi)$ ($-\frac{1}{2} \leq \Re(E_0) < \frac{1}{2}$ $\Re(\Phi + \frac{1}{2}) \geq 0$ $E_0 \pm \Phi$ not integer)	$\mu = E_0 + p$ (p integer)	$\Phi(\Phi + 1)$	$SO(2, 1)$	E_0 real; $\Re(\Phi + \frac{1}{2}) = 0$; $\alpha_+^{\mu^*} = -\alpha_-^{\mu}$	$D_p(E_0 \Phi)$ * (princ. rep.)
	$\downarrow \mu_0$ ($e \neq 0$)	$\mu = \mu_0 + p$ (p integer ≥ 0)	$-e(\mu_0 + 1)$	S_4	μ_0, e real $e > 0$ $\alpha_+^{\mu^*} = -\alpha_-^{\mu}$ $e < 0$ $\alpha_+^{\mu^*} = \alpha_-^{\mu}$	$\downarrow \mu_0$ *
	$\uparrow \mu_0$ ($e \neq 0$)	$\mu = \mu_0 + p$ (p integer ≥ 0)	$-e\mu_0$	S_4	μ_0, e real $e > 0$ $\alpha_+^{\mu^*} = \alpha_-^{\mu}$ $e < 0$ $\alpha_+^{\mu^*} = -\alpha_-^{\mu}$	$\uparrow \mu_0$ *
C_3	$R(E_0, \omega, e)$ ($\frac{1}{2} \leq \Re(E_0) < \frac{1}{2}$ $\omega + eE_0$ not integer)	$\mu = E_0 + p$ (p integer)	ω	S_4	E_0 real; $e = 0$ $\omega > 0$ $\alpha_+^{\mu^*} = \alpha_-^{\mu}$ $\omega < 0$ $\alpha_+^{\mu^*} = -\alpha_-^{\mu}$	$R(E_0, \omega, 0)$ *
	$Q(E_0, \omega)$ ($-\frac{1}{2} \leq \Re(E_0) < \frac{1}{2}$ $\omega \neq 0$)	$\mu = E_0 + p$ (p integer)	ω	C_3	E_0 real; if $\omega = \rho e^{-i\theta}$, $\alpha_+^{\mu^*} = e^{i\theta} \alpha_-^{\mu}$	$Q(E_0, \omega)$ *

3 - UNITARY REPRESENTATIONS OF THE REALIZATIONS

Complex Lie Algebra	Name of the realization	Real Lie Algebra	Unitary irreducible representations of the realization
B_1	A_1	$SO(3)$	if $2 \frac{d}{a}$ integer, $D^{\mu_0^*}$, $\mu_0 = \left\lfloor \frac{d}{a} \right\rfloor + p, p \text{ integer} \geq 0$
	A_2	$SO(2,1)$	if $\frac{d}{a} > \frac{1}{2}$ $\downarrow \mu_0^*$, $\mu_0 = -\frac{d}{a} + p, 0 \leq p \text{ integer} < \frac{d}{a} - 2$ if $\frac{d}{a} < -\frac{1}{2}$ $\uparrow \mu_0^*$, $\mu_0 = -\frac{d}{a} - p, 0 \leq p \text{ integer} < -\frac{d}{a} - \frac{1}{2}$ $D_p(E_0 \Phi)^*$, $E_0 + \frac{d}{a}$ integer
	B	$SO(2,1)$	if $\frac{d}{a} > 0$ $\uparrow \mu_0^*$ $\mu_0 > \frac{1}{2}$ if $\frac{d}{a} < 0$ $\downarrow \mu_0^*$ $\mu_0 < -\frac{1}{2}$ $D_p(E_0 \Phi)^*$
$G(01)$	C'	S_4	if $b < 0$ $\downarrow \mu_0^*$ $\mu_0 \text{ integer} \geq 0$ if $b > 0$ $\uparrow \mu_0^*$ $\mu_0 \text{ integer} \leq 0$
	D'	S_4	if $b < 0$ $\downarrow -1$ if $b > 0$ $\uparrow 0$
\mathcal{C}_3	C''	\mathcal{C}_3	$Q(0 \omega)^*$ $\omega > 0$

4 - NON UNITARY IRREDUCIBLE REPRESENTATIONS
 OF THE REALIZATIONS of B_1 , $G(0,1)$ and \mathcal{C}_3
 WHICH CONTAIN NORMALIZED BASIS FUNCTIONS .

Complex Lie Algebra	Realization	N.U.I. representations	Normalized basis vectors	exchanges which leave the fact. equ. invariant
B_1	A_1	$\uparrow \mu_0, \mu_0 < -\left \frac{d}{a}\right + 1$	$\mu < -\left \frac{d}{a}\right + 1$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow -\frac{d}{a} \\ \mu \rightarrow -\mu \end{array} \right\}$ or $\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow \mu \\ \mu \rightarrow \frac{d}{a} \end{array} \right\}$
	A_2	if $\frac{d}{a} < \frac{1}{2}$ $\uparrow \mu_0, \mu_0 > \frac{1}{2}$	$\mu < -\frac{d}{a} + 1$	$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow -\frac{d}{a} \\ \mu \rightarrow -\mu \end{array} \right\}$ or $\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{a} \rightarrow \mu \\ \mu \rightarrow \frac{d}{a} \end{array} \right\}$
		$D(E_0 \Phi), \mathcal{R}(\Phi + \frac{1}{2}) = 0$	$\mu < -\frac{d}{a} + 1$	
B	only unitary rep.			
$G(0,1)$	C'	if $b > 0$ $\uparrow \mu_0^b, \mu_0 < 1$	$\mu < 1$	$\left\{ \begin{array}{l} b \rightarrow -b \\ \mu \rightarrow -\mu \\ \omega \rightarrow \omega - b \end{array} \right\}$ or $\left\{ \begin{array}{l} \mu \rightarrow -\mu \\ \omega \rightarrow \omega + b\mu \end{array} \right\}$
	D'	only unitary rep.		
\mathcal{C}_3	C''	$Q(E_0, \omega) \quad \omega > 0$	$\mu < 1$	$\mu \rightarrow -\mu$

5 - TENSOR OPERATORS

Realization	General form of $U_{\mu}^{\omega}(x)$	particular cases and corresponding rep.
A ₁	$[\sin \frac{a(x+p)}{2}]^{\mu} F(\mu-\Phi, \mu+\Phi+1; \mu+1; \sin^2 \frac{a(x+p)}{2})$ $\omega = \Phi(\Phi+1)$	polynomials bounded rep.
A ₂	$[\operatorname{th} \frac{a''(x+p)}{2}]^{\mu} [\operatorname{ch} \frac{a''(x+p)}{2}]^{2\Phi} F(\mu-\Phi, -\Phi; \mu+1; \operatorname{th}^2 \frac{a''(x+p)}{2})$ $\omega = \Phi(\Phi+1)$	polynomials bounded rep.
B	$e^{(\Phi-1)x}$ $\omega = \Phi(\Phi+1)$	for $2k$ integer ≥ 0 e^{-kx} e^{kx} D^k $\uparrow k$ and $\downarrow -k$ *
C'	$x^{\mu} e^{-kx} F(\mu+\frac{1}{2}; 2\mu+1; 2kx)$ $k = i\sqrt{\omega} \text{ if } \omega > 0$ $k = \sqrt{-\omega} \text{ if } \omega < 0$	$J_{\mu}(\sqrt{\omega} x)$ $\omega > 0 \text{ and}$ $\mu \text{ integer}$ $R(0, \omega, 0)^*$
D'	e^{kx} $k = \pm i\sqrt{\omega} \text{ if } \omega > 0$ $k = \pm \sqrt{-\omega} \text{ if } \omega < 0$	$\sin(\sqrt{\omega} x + \mu \frac{\pi}{2} + \theta)$ $\omega > 0$ $R(E_0, \omega, 0)^*$
C''	same form as C'	Same form as C' $Q(0, \omega)^*$

**Service de Reprographie
C.N.R.S.
Gif**