

SUR UNE MÉTHODE DE RÉSOLUTION APPROCHÉE DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

par ANDRÉ HAUTOT et LOUIS POSSOZ (*)

RÉSUMÉ

Un théorème est présenté qui autorise un calcul récurrent des déterminants multidimensionaux. On montre quelles perspectives il ouvre dans le domaine de la résolution approchée de l'équation de Schrödinger. Un grand nombre d'exemples sont traités illustrant la fécondité de la méthode. A ce stade, aucun effort n'a été fait pour optimaliser le rendement de cette nouvelle approche. Cette optimisation est cependant réalisable et fera l'objet d'une publication séparée.

1. INTRODUCTION

Dans un mémoire antérieur [1] nous avons présenté tous les cas de solubilité exacte de l'équation de Schrödinger (ES) en recherchant les états propres pour chaque configuration du champ extérieur (électrique ou magnétique). C'est un travail du même genre que nous entreprenons ici mais cette fois nous étudions les potentiels électriques qui ne sont pas solubles exactement. Pour ces problèmes, l'écriture des états propres ne peut plus se faire avec un nombre fini de fonctions élémentaires. Cela signifie que nous entrons dans le domaine des solutions approchées de l'ES. Plusieurs voies s'offrent à cette fin qui ne présentent pas toutes les mêmes avantages.

— la théorie des perturbations est sans doute la plus générale; malheureusement elle souffre de multiples inconvénients. Les problèmes les plus simples traités par cette méthode (oscillateurs anharmoniques par exemple) requièrent des calculs laborieux pour un résultat final extrêmement peu satisfaisant : résultat peu précis si la perturbation n'est pas convenable (anharmonicité petite ou grande dans l'exemple cité); la solution s'exprime sous forme de série asymptotique divergente. De plus on a rarement l'occasion de calculer plusieurs termes de cette série à cause de la complexité des calculs. On peut s'affranchir partiellement de la contrainte des séries divergentes en développant le résultat final sous forme d'approximants de Padé mais c'est au prix d'un supplément de complexité dans les calculs analytiques.

— la méthode WKB est surtout efficace dans le domaine restreint où elle s'applique, c'est-à-dire pour les états fortement excités. Elle est de peu d'utilité dans les autres cas.

— la méthode variationnelle de Ritz est d'un emploi relativement simple mais des résultats quelque peu précis exigent des calculs fort longs.

(*) Adresse postale : Université de Liège, Institut de Physique, Sart Tilman par 4000 Liège I (Belgique).

Présenté par Antoine Hautot le 15 septembre 1977.

— enfin il existe une quatrième voie d'approche, de très loin la plus simple, la plus élégante et la plus précise : c'est la méthode du déterminant de Hill. Elle est fort peu connue et utilisée; c'est pourquoi nous lui consacrons ce n émoire.

1-1. La méthode du déterminant de Hill.

C'est à propos de la résolution de l'équation de Mathieu que Hill imagina d'introduire le déterminant qui porte son nom. Cette méthode s'est avérée plus féconde que celle que Mathieu lui-même avait d'abord utilisée pour construire les états propres de son équation. Actuellement, tous les ouvrages traitant de l'équation de Mathieu font référence à cette méthode [2], [3].

L'équation de Mathieu s'écrit classiquement :

$$y'' + (a - 2q \cos 2z)y = 0$$

q est donné et a est à déterminer en sorte que y soit périodique.

Il existe quatre familles de solutions périodiques. L'une d'elles s'écrit :

$$y = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \sin(2k+2)z$$

Introduisant cette forme dans l'équation de Mathieu, il vient la récurrence suivante entre les C_k :

$$-q C_{k+1} + [a - 4(k+1)^2] C_k - q C_{k-1} = 0 \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

avec $C_{-1} = C_{-2} = \dots = 0$.

Comme nous le reverrons par la suite, Hill eut l'idée de considérer cette récurrence comme un système homogène infini d'inconnues C_0, C_1, C_2, \dots . Il proposa de calculer les valeurs propres (vp) a comme racines du déterminant infini caractéristique du système.

$$\begin{vmatrix} a-4 & -q & & & \\ -q & a-16 & -q & & \\ & -q & a-36 & -q & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{vmatrix}$$

Ce déterminant étant infini, on forme les divers approximants :

$$a-4, \quad \left| \begin{array}{ccc} a-4 & -q & 0 \\ -q & a-16 & -q \\ 0 & -q & a-36 \end{array} \right|, \quad \left| \begin{array}{ccc} a-4 & -q & 0 \\ -q & a-16 & -q \\ 0 & -q & a-36 \end{array} \right|, \text{ e.c. } \dots$$

dont les racines tendent effectivement vers les vp du problème.

Au fil du temps, divers auteurs ont modifié la présentation de la théorie en substituant les fractions continues au déterminant de Hill. En un sens, ce fut une erreur car la formulation par fractions continues ne permet pas les mêmes généralisations que celle du déterminant de Hill. Dans cette optique la théorie se développe comme suit; on détaille la récurrence sous la forme :

$$-q C_1 + (a - 4) C_0 = 0$$

et

$$-q \frac{C_{k+1}}{C_k} + [a - 4(k+1)^2] - q \frac{C_{k-1}}{C_k} = 0$$

d'où

$$\frac{C_{k-1}}{C_k} = \frac{a - 4(k+1)^2}{q} - \frac{1}{\frac{C_k}{C_{k+1}}}$$

Cette dernière équation permet de calculer $\frac{C_0}{C_1}$ et de comparer avec la valeur que la première équation fournit pour cette même grandeur. Finalement, on obtient l'équation transcendante :

$$\frac{a-4}{q} - \frac{1}{\frac{a-16}{q} - \frac{1}{\frac{a-36}{q} - \dots}} = 0$$

Cette équation est très utile dans ce cas car la fraction continue converge très rapidement ce qui permet de calculer les vp de a par approximation successives en limitant la fraction continue à ses réduites. Les premières approximations donnent :

$$\frac{a-4}{q} = 0, \quad \frac{a-4}{q} - \frac{1}{\frac{a-16}{q}} = 0, \quad \frac{a-4}{q} - \frac{1}{\frac{a-16}{q} - \frac{1}{\frac{a-36}{q}}} = 0, \quad \text{etc. ...}$$

On note que ces équations sont à un facteur inessentiel près équivalentes à celles obtenues en considérant les divers approximants du déterminant de Hill.

Pour la résolution de l'équation de Mathieu, il est donc indifférent de recourir aux fractions continues ou au déterminant de Hill. Ce n'est cependant pas vrai pour d'autres problèmes où la récurrence en C_k est à plus de trois termes car, dans ces cas, seul le déterminant de Hill se généralise facilement.

Finalement, seule l'équation sphéroïdale a subi un traitement par fractions continues analogue à celui de Mathieu [4]. Il y eut encore quelques tentatives isolées dues à Kerner [5], Bouwkamp [6], Ince [7] mais toutes eurent le tort de raisonner en termes de fractions continues alors qu'il eût été plus fécond d'en revenir à la forme primitive du déterminant de Hill. Ce n'est que tout récemment que quelques auteurs [8] ont remis en honneur ce déterminant de Hill en étudiant les oscillateurs anharmoniques $x^2 + \lambda x^4$ et $x^2 + \lambda x^6$. Ce travail collectif est intéressant même s'il n'exploite que très partiellement l'outil qu'il présente.

Nous avons montré récemment [9] que la méthode était susceptible d'extensions considérables ouvrant les plus larges perspectives d'exploitation. Ce sont quelques résultats essentiels de notre exploration que nous présentons ici. Toutefois avant de passer aux applications, il convient de rappeler le principe de la méthode.

1.2. Position du problème.

Le principe de la méthode de Hill est le suivant; soit l'équation différentielle

$$L(E)\psi = 0 \tag{1}$$

où L est un opérateur différentiel du second ordre dans le cas de l'ES. Cet opérateur dépend d'un paramètre E qui est quantifiable selon les conditions aux limites que l'on impose à ψ :

- $|\psi|^2$ intégrable (cas de l'ES),
- ψ périodique (cas de l'équation de Mathieu),
- rien n'empêcherait de dicter d'autres conditions...

Pour résoudre ce problème, on recherche la solution ψ de cette équation différentielle sous la forme d'un développement en série :

- de Taylor $\psi = f(x) \sum_0^{\infty} C_k x^k$ (le facteur f doit être convenablement choisi; il peut être une constante ou une fonction dépendante du comportement asymptotique de la solution).
- de Fourier-Hilbert $\psi = \sum_0^{\infty} C_k \varphi_k$ (l'ensemble des fonctions φ_k étant orthogonal et complet).
- on pourrait proposer des développements d'autres types : besséliens, trigonométriques par exemple.

Introduisant l'une ou l'autre de ces formes dans l'équation différentielle et regroupant les coefficients des termes en x^k ou φ_k rendus constants, le cas échéant en utilisant les relations de récurrence entre les φ_k , on trouve que les C_k sont reliés entre eux par une relation récurrente. Dans la grande majorité des cas que l'on rencontre en pratique, cette récurrence revêt la forme canonique suivante :

$$A_k^{(n)} C_{k+1} + A_k^{(n-1)} C_k + \dots + A_k^{(0)} C_{k-n+1} = 0 \quad (2)$$

- elle débute avec $k = s, s + 1, \dots$ (s entier ≥ 0 fixé).
- elle contient $n + 1$ termes (elle est d'ordre n , $n \geq 1$).
- les coefficients $A_k^{(j)}$ sont généralement des polynômes en k de degré r ,
- à un facteur multiplicatif près, elle est initialisée (totalemen si $s = 0$, partiellement si $s > 0$) par les conditions $C_{-1} = C_{-2} = C_{-3} = \dots = 0$.
- le premier coefficient non nul (généralement C_0) peut être posé égal à 1 sans altérer la généralité de la solution.
- le paramètre quantifiable E apparaît généralement dans le terme $A_k^{(n-s-1)}$, cependant les exceptions existent.

Quelle que soit la valeur du paramètre quantifiable E , tout système de C_k satisfaisant (2) permet de construire une fonction ψ solution de (1). Il reste à exprimer la condition particulière à laquelle cette solution doit encore satisfaire. Pour ce faire, Hill réécrit (2) sous la forme d'un système linéaire homogène d'une infinité d'équations à une infinité d'inconnues C_0, C_1, C_2, \dots . Notons D la matrice infinie qui caractérise ce système. Il est évidemment tentant de considérer ce système comme compatible à condition que le déterminant infini $|D|$ de la matrice D s'annule. Cette condition n'est généralement vérifiée que pour une infinité discrète de valeurs de E qui se trouvent ipso facto quantifiées. C'est bien là le raisonnement que tiennent les quelques utilisateurs de la méthode de Hill [8].

Cependant, ainsi que Riesz [10] l'a fait remarquer, les choses ne sont pas si simples. En fait, le mot compatible ne peut revêtir ici le même sens que pour les systèmes linéaires homogènes finis. Par exemple, le système infini qui découle de (2) ne présente aucune incompatibilité au sens habituel du terme puisque chaque nouvelle équation du système introduit une nouvelle inconnue C_{k+1} . Cependant, Riesz a montré qu'en annulant le déterminant infini du système $|D|$, on sélectionnait des solutions C_k qui jouissent selon le cas de propriétés particulières, par exemple :

- $|C_k|$ borné
- $\sum_0^{\infty} |C_k|^2$ borné.

A ces conditions sur les C_k correspondent des conditions sur la fonction $\psi = \sum_0^{\infty} C_k x^k$ ou $\sum_0^{\infty} C_k \varphi_k$. Par exemple il est clair que $\sum_0^{\infty} |C_k|^2 < \infty$ entraîne que $\psi = \sum_0^{\infty} C_k \varphi_k$ est à carré intégrable en sorte que les valeurs propres de E cherchées sont celles qui annulent $|D|$. Par contre lorsque les C_k sont les coefficients d'un développement de Taylor la même règle ne s'applique plus nécessairement. Or il se fait que même dans ce cas, l'annulation de $|D|$ livre souvent le spectre correct des vp. Il y a là matière à réflexion futures : il serait intéressant que ces questions soient étudiées théoriquement avec la rigueur souhaitable afin qu'il en résulte un outil sûr à l'emploi. De même les questions de convergence des déterminants infinis mériteraient un examen soigneux. Ce n'est cependant pas notre but ici car seul nous intéresser provisoirement de montrer la fécondité de la méthode. Dans les diverses applications nous ne manquerons cependant jamais de remarquer certaines particularités encore obscures par manque d'information théorique.

1-3. Structure du déterminant de Hill.

Le déterminant $|D|$ qui caractérise la récurrence (2) s'écrit in extenso :

$$|D| = \begin{vmatrix} A_s^{(n-s-1)} & A_s^{(n-s)} & \dots & A_s^{(n)} \\ A_{s+1}^{(n-s-2)} & A_{s+1}^{(n-s-1)} & \dots & A_{s+1}^{(n-1)} & A_{s+1}^{(n)} \\ \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \ddots & \ddots & \ddots \end{vmatrix} \quad (3)$$

Les seuls éléments non nuls sont situés sur $n + 1$ diagonales parallèles à la diagonale principale.

Généralement, le paramètre quantifiable E apparaît dans les coefficients $A_k^{(n-s-1)}$, c'est-à-dire sur la diagonale principale du déterminant. Ce n'est cependant pas impératif pour développer la théorie. Nous nous intéressons aux vp de E qui sont les racines de $|D|$. Nous conformant à la théorie classique des déterminants infinis, nous conviendrons de considérer que ces racines s'obtiennent comme limites des racines des approximants successifs $|D^{(k)}|$ de $|D|$ lorsque ces limites existent ce qui est souvent le cas en pratique. Pour mémoire, on définit le $k^{\text{ième}}$ approximant $|D^{(k)}|$ en ne considérant dans $|D|$ que les k premières lignes et les k premières colonnes. Toutefois il est clair que des valeurs précises ne seront trouvées par cette méthode qu'à la condition de considérer des approximants de dimension suffisante.

Le calcul des racines d'approximants de dimensions de plus en plus grandes n'est possible que si le calcul des $|D^{(k)}|$ successifs peut se faire par voie récurrente. En fait, on peut montrer que les $|D^{(k)}|$ ne satisfont à une récurrence simple que si $s = 0$. Ce cas correspond à un déterminant de Hill $|D|$ qui ne comporte que deux éléments non nuls sur la première ligne. Ce cas est le plus simple et c'est le seul qui ait été abordé par le passé. Récemment, nous avons montré comment il fallait procéder dans les autres cas pour calculer les déterminants $|D^{(k)}|$ par voie récurrente [9]. Nous allons rappeler brièvement le théorème sur lequel cette importante généralisation est basée. Signalons en passant que le cas $n = 4$ et $s = 1$ a été abordé par quelques auteurs [15], [16], [17] qui ont essayé de calculer les approximants d'ordres successifs k par voie récurrente. Sauf cas extrêmement particulier, ils ne trouvent cependant pas de récurrence de longueur fixe pour tous les ordres k .

1-4. Théorème fondamental.

Soit la récurrence (2) débutant avec $k = s$. La première équation ($k = s$) permet de calculer C_{s+1} lorsque C_0, \dots, C_s sont connus. La deuxième équation ($k = s + 1$) permet de calculer C_{s+2} etc. ... La solution générale de (2) dépend donc des valeurs initiales prêtées à C_0, \dots, C_s (N.B. Pour rappel $C_{-1} = C_{-2} = \dots = 0$). Construisons $(s + 1)$ suites notées $N_k^{(j)}$ ($j = 1, \dots, s + 1$) de la manière suivante :

- elles obéissent à la récurrence (2)
- elles sont initialisées conformément au schéma :

$$N_k^{(j)} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, N_{s+1}^{(j)}, N_{s+2}^{(j)}, \dots)$$

le chiffre 1 étant en $j^{\text{ième}}$ position.

Ces suites sont visiblement linéairement indépendantes. Il est possible de démontrer le théorème suivant selon lequel l'approximant $D^{(k)}$ se calcule conformément à la relation :

$$|D^{(k)}| = (-1)^{k(s+1)} A_s^{(n)} A_{s+1}^{(n)} \dots A_{k+s-1}^{(n)} \begin{vmatrix} N_k^{(1)} & \dots & N_k^{(s+1)} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ N_{k+s}^{(1)} & \dots & N_{k+s}^{(s+1)} \end{vmatrix} \quad (4)$$

Les suites $N_k^{(j)}$ sont visiblement initialisées aux valeurs $\delta_{k,j-1}$ (pour $j = 1, \dots, s + 1$ et k allant de $1 + s - n$ à s). Cela n'est pas indispensable : on peut les initialiser de manière quelconque tout en respectant l'indépendance linéaire des $(s + 1)$ suites $N_k^{(j)}$ construites et les conditions $N_{-1}^{(j)} = N_{-2}^{(j)} = \dots = 0$. Dans ce cas plus général, la relation (4) doit être complétée :

$$|D^{(k)}| = (-1)^{k(s+1)} A_s^{(n)} \dots A_{k+s-1}^{(n)} \begin{vmatrix} N_k^{(1)} & \dots & N_k^{(s+1)} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ N_{k+s}^{(1)} & \dots & N_{k+s}^{(s+1)} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} N_0^{(1)} & \dots & N_0^{(s+1)} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ N_s^{(1)} & \dots & N_s^{(s+1)} \end{vmatrix}$$

L'intérêt de ce théorème réside dans le fait que le calcul de l'approximant $|D^{(k)}|$ qui est un déterminant $k \times k$ est ramené au calcul d'un déterminant $(s + 1) \times (s + 1)$ de dimension fixe quel que soit k . De plus, les éléments de ce déterminant se calculent sans difficulté par voie récurrente. Le lecteur intéressé par la démonstration de ce théorème se reportera à notre travail antérieur [9]. Nous ne la reproduisons pas ici afin d'épargner la place.

L'annulation du déterminant figurant au second membre de (4) fournit à la limite lorsque $k \rightarrow \infty$ les vp du paramètre quantifiable E. Il reste alors à déterminer les vp des coefficients C_0, \dots, C_s de la récurrence. Ceux-ci se calculent comme solution du système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_0 = 1 \\ C_1 N_k^{(2)} + \dots + C_s N_k^{(s+1)} \sim -N_k^{(1)} \\ \vdots \\ C_1 N_{k+s-1}^{(2)} + \dots + C_s N_{k+s-1}^{(s+1)} \sim -N_{k+s-1}^{(1)} \end{array} \right.$$

où le signe \sim signifie « à la limite lorsque $k \rightarrow \infty$ ».

Lorsque $C_0 \dots C_s$ sont déterminés, C_{s+1}, C_{s+2}, \dots se déduisent grâce à la récurrence de départ (2).

1-5. Quelques exemples les plus simples : cas où $s = 0, 1, 2$.

1-5-1. Cas $s = 0$: ce cas est le plus simple de tous. C'est d'ailleurs le seul qui, à notre connaissance, ait jamais été envisagé par d'autres auteurs.

Il n'existe qu'une seule suite $N_k^{(j)}$ soit $N_k^{(1)} = N_k$. Elle obéit à (2) avec la condition initiale $N_0 = 1$ en sorte que l'on a $N_k = C_k$.

Finalement le $k^{\text{ème}}$ approximant de $|D|$ vaut vu le théorème général :

$$|D^{(k)}| = (-1)^k A_0^{(n)} A_1^{(n)} \dots A_{k-1}^{(n)} C_k$$

Les racines de $|D^{(k)}|$ sont les mêmes que celles de C_k car les facteurs $A_j^{(n)}$ ne contiennent généralement pas le paramètre quantifiable E. Même s'ils le contenaient, il n'en résulterait aucune racine stable lorsque $k \rightarrow \infty$. Dans ce cas particulièrement simple, on peut donc travailler directement sur la récurrence (2) sans faire référence au déterminant de Hill. Une fois trouvée les vp de E, les C_k se calculent à partir de $C_0 = 1$ et de (2).

Ce cas est le seul où les $|D^{(k)}|$ satisfont une relation de récurrence simple.

1-5-2. Cas $s = 1$: dans ce cas il y a deux suites notées pour simplifier :

$$N_k^{(1)} = N_k \quad \text{et} \quad N_k^{(2)} = D_k.$$

Toutes deux satisfont la récurrence (2) et elles sont initialisées comme suit :

$$N_0 = D_1 = 1 \quad N_1 = D_0 = 0$$

Le théorème du § 1-4 permet de calculer les approximants du déterminant de Hill :

$$|D^{(k)}| = A_1^{(n)} \dots A_k^{(n)} (N_k D_{k+1} - N_{k+1} D_k)$$

On remarque que $|D^{(k)}|$ ne satisfait pas à une récurrence simple. Mais il se calcule à partir des suites N_k et D_k qui sont récurrentes. Les racines de $|D^{(k)}|$ sont identiques aux racines de $N_k D_{k+1} - N_{k+1} D_k$.

Une fois trouvées les vp de E, il devient possible de calculer les vp des coefficients C_0 et C_1 :

$$\begin{aligned} C_0 &= 1 \\ C_1 &= -\lim_{k \rightarrow \infty} (N_k / D_k) \end{aligned}$$

Les coefficients suivants s'en déduisent grâce à (2).

1-5-3. Cas $s = 2$: il y a trois suites $N_k^{(j)}$ notées pour simplifier :

$$N_k^{(1)} = N_k, \quad N_k^{(2)} = D_k \quad \text{et} \quad N_k^{(3)} = U_k$$

Toutes trois satisfont (2) et sont initialisées comme suit :

$$N_0 = D_1 = U_2 = 1$$

$$N_1 = N_2 = D_0 = D_2 = U_0 = U_1 = 0$$

Le théorème du § 1-4 permet de calculer les approximants $D^{(k)}$ du déterminant de Hill :

$$|D^{(k)}| = (-1)^k A_2^{(n)} \dots A_{k+1}^{(n)} \begin{vmatrix} N_k & D_k & U_k \\ N_{k+1} & D_{k+1} & U_{k+1} \\ N_{k+2} & D_{k+2} & U_{k+2} \end{vmatrix}$$

Les racines de $|D^{(k)}|$ sont identiques à celles du déterminant 3×3 du second membre. Les vp de E étant trouvées, il est possible de trouver les vp des coefficients C_0 , C_1 et C_2 :

$$C_0 = I$$

$$C_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} (N_k U_{k+1} - N_{k+1} U_k) / (U_k D_{k+1} - U_{k+1} D_k)$$

$$C_2 = \lim_{k \rightarrow \infty} (N_k D_{k+1} - N_{k+1} D_k) / (D_k U_{k+1} - D_{k+1} U_k)$$

1-5-4. Autres cas : les autres cas $s = 3, 4, \dots$ sont de plus en plus complexes ; ils se traitent de la même manière conformément au théorème général.

2. DESCRIPTION D'UN ALGORITHME POUR LE CALCUL DES VP DE E ET DES COEFFICIENTS C_0, \dots, C_s

Nous abordons le problème du calcul numérique des vp du paramètre quantifiable E. Appelons $S(k)$ la matrice de dimension $(s+1)$ formée des éléments :

$$S(k) = \begin{pmatrix} N_k^{(1)} & \dots & N_k^{(s+1)} \\ \vdots & & \vdots \\ N_{k+s}^{(1)} & \dots & N_{k+s}^{(s+1)} \end{pmatrix}$$

Notons $|S(k)|$ le déterminant de cette matrice. C'est un polynôme d'ordre v , croissant avec k , en E. Notons $E_j(k)$ ($j = 1, \dots, v$) les racines de ce polynôme. Si cette limite existe on a par le théorème général du § 1-4 que les vp cherchées E_j valent :

$$E_j = \lim_{k \rightarrow \infty} E_j(k)$$

On pourrait imaginer plusieurs procédés de calcul numérique des racines du polynôme $|S(k)|$. Nous proposons une méthode simple et rapide qui s'inspire d'un schéma itératif de Newton. Kerner [5] avait déjà suggéré l'emploi d'un algorithme de ce genre lors du traitement d'un problème particulier. Le principe de la méthode de Newton est bien connu. Nous le rappelons brièvement :

— soit à calculer les racines E de $|S(k)|$ lorsque $k \rightarrow \infty$; on procède à l'essai suivant : on note $E^{(0)}$ une valeur présumée pas très éloignée de la valeur exacte

et on calcule la suite des $|S(k)|$ lorsque $E = E^{(0)}$. On calcule également la suite de $\frac{d}{dE} |S(k)|$ pour $E = E^{(0)}$. Ces calculs se font numériquement très facilement puisque $|S(k)|$ donc aussi sa dérivée peuvent se calculer par voie récurrente par l'intermédiaire des $N_k^{(j)}$. L'algorithme de Newton enseigne que si le procédé converge, la valeur

$$E^{(1)} = E^{(0)} - \lim_{k \rightarrow \infty} \left[|S(k)| / \frac{d}{dE} |S(k)| \right]_{E=E^{(0)}} \quad (5)$$

est plus proche de la valeur exacte que $E^{(0)}$.

On reprend alors $E^{(1)}$ comme valeur d'essai et on recalcule une valeur $E^{(2)}$ encore meilleure, etc. ... On stoppe le calcul lorsque le résultat n'est plus altéré par les corrections ultérieures à la précision demandée. En pratique, cette procédure de calcul est très rapide : dans la plupart des cas on atteint une précision relative meilleure que 10^{-10} en cinq essais successifs et pour chaque essai la valeur de k reste largement inférieure à 1000. A ce sujet, il y a lieu de signaler que des travaux en cours indiquent que cette valeur peut rester dans l'ordre des dizaines à condition de s'y prendre adroitement.

En pratique, il n'est pas nécessaire de calculer séparément $|S(k)|$ et sa dérivée car ainsi qu'on le voit dans la relation (5) seul le quotient de ces deux grandeurs nous intéresse. D'après une règle connue de dérivation des déterminants, on peut écrire :

$$\frac{d}{dE} |S(k)| = |S(k)| \cdot \text{tr} \left[S^{-1}(k) \cdot \frac{d}{dE} S(k) \right]$$

où $\text{tr } S$ symbolise la trace de la matrice S . Dès lors (5) peut se réécrire :

$$E^{(1)} = E^{(0)} - \lim_{k \rightarrow \infty} \text{tr}^{-1} \left[S^{-1}(k) \cdot \frac{d}{dE} S(k) \right] \quad (6)$$

En résumé on calcule par voie récurrente les suites $N_k^{(j)}$ ($j = 1, \dots, s+1$) ainsi que leurs dérivées $DN_k^{(j)} = \frac{d}{dE} N_k^{(j)}$; on a pour $j = 1, \dots, s+1$:

$$\begin{cases} A_k^{(n)} N_{k+1}^{(j)} + A_k^{(n-1)} N_k^{(j)} + \dots + A_k^{(0)} N_{k-n+1}^{(j)} = 0 \\ \text{avec } N_0^{(j)} = N_1^{(j)} = \dots = N_s^{(j)} = 0 \text{ sauf } N_{j-1}^{(j)} = 1 \end{cases}$$

et de même pour les dérivées :

$$\begin{cases} A_k^{(n)} DN_{k+1}^{(j)} + \dots + A_k^{(0)} DN_{k-n+1}^{(j)} + DA_k^{(n)} N_{k+1}^{(j)} + \dots + DA_k^{(0)} N_{k-n+1}^{(j)} = 0 \\ \text{avec } DN_0^{(j)} = DN_1^{(j)} = \dots = DN_s^{(j)} = 0 \end{cases}$$

On forme les matrices :

$$S(k) = \begin{pmatrix} N_k^{(1)} & \dots & N_k^{(s+1)} \\ \vdots & & \vdots \\ N_{k+s}^{(1)} & \dots & N_{k+s}^{(s+1)} \end{pmatrix} \text{ et } DS(k) = \begin{pmatrix} DN_k^{(1)} & \dots & DN_k^{(s+1)} \\ \vdots & & \vdots \\ DN_{k+s}^{(1)} & \dots & DN_{k+s}^{(s+1)} \end{pmatrix}$$

On inverse $S(k)$ numériquement et on effectue le produit $S^{-1}(k) \cdot DS(k)$ dont on calcule la trace. La relation (6) fournit de suite la correction à apporter à la valeur d'essai pour améliorer celle-ci. Il existe une multitude de variantes qui présentent chacunes leurs avantages. La place nous manque pour les évoquer.

2-1. Présentation de la récurrence : matrice X.

Nous avons écrit au § 1-2 la récurrence fondamentale (2) sous sa forme dite canonique. Dans le but de faciliter la présentation des applications de la méthode, il est commode d'introduire la matrice X à $(r + 1)$ lignes et à $(n + 1)$ colonnes dont les éléments sont rangés comme suit :

nous avons vu que les coefficients de la récurrence $A_k^{(j)}$ sont généralement des polynômes en k de degré r . Précisément la 1ère colonne de X contient les coefficients du polynôme $A_k^{(n)}$, la 2ème colonne de X contient les coefficients du polynôme $A_k^{(n-1)}$ etc. ... ; de même la 1ère ligne contient les termes de degré r , la 2ème ligne ceux du degré $r - 1$, etc. ... Exemple : la matrice X suivante :

$$X = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ b & d & 0 & 0 \\ c & e & 0 & f \end{pmatrix} \text{ est associée à la récurrence :}$$

$$(ak^2 + bk + c) C_{k+1} + (dk + e) C_k + f C_{k-2} = 0.$$

Il reste à préciser les valeurs prises par l'indice k : $s, s + 1, s + 2, \dots$ Finalement, une récurrence telle que (2) est caractérisée par les entiers n, r et s . On a $n \geq 1, r \geq 1, s \geq 0$.

2-2. Quelques remarques à propos de l'élaboration des calculs numériques.

Nous nous proposons d'illustrer la théorie esquissée ci-dessus par un certain nombre d'applications numériques. Il s'agira dans tous les cas de déterminer les états propres solutions d'une équation différentielle du second ordre du type de Schrödinger. Cela implique le calcul des vp du paramètre quantifiable E ainsi que des fonctions propres correspondantes. Avant d'entrer dans le vif du sujet, voici quelques remarques utiles :

— Nous admettons que l'équation est sans dimension. Si ce n'est pas le cas il y a lieu de faire le changement de variable adéquat. Par exemple, l'ES de l'oscillateur harmonique s'écrit habituellement :

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\varepsilon - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi = 0$$

Pour la rendre sans dimension, il suffit de poser : $z = x\sqrt{m\omega/\hbar}$ et $E = 2\varepsilon/\hbar\omega$. Dès lors l'équation devient :

$\psi'' + (E - z^2) \psi = 0$ dont les états propres sont caractérisés par les vp :

$E_N = 2N + 1$ et par les fonctions propres :

$\psi_N = D_N(z\sqrt{2})$ où les fonctions D_N sont les fonctions de Weber-Hermite^[4].

— Il peut se faire qu'une fois rendue sans dimension, l'ES contienne encore

un paramètre λ qui caractérise l'allure du potentiel. C'est le cas par exemple de l'oscillateur anharmonique en x^4 pour lequel l'ES s'écrit :

$$\psi'' + (E - x^2 - \lambda x^4) \psi = 0 \quad (7)$$

Dans ce cas, le paramètre λ est un nombre pur et il y a lieu de déterminer le spectre des états propres de l'ES pour toutes valeurs de λ . Évidemment, une évaluation numérique n'est possible que pour une suite finie de valeurs de λ . En pratique nous couvrirons une gamme de valeurs allant de 0.01 à 100 par pas de 0.01, 0.1, 1 et 10 dans les dizaines successives. En-deçà ou au-delà de ces valeurs, il existe généralement une procédure qui permet de calculer les états propres si λ est très petit ou très grand.

— Un des problèmes posés par l'algorithme que nous utilisons et qui est décrit au § 2 réside dans un choix approprié des valeurs d'essai pour E . Ces valeurs ne doivent pas être trop éloignées de la vraie valeur sinon le schéma de Newton utilisé risque de diverger, ou de converger vers une vp plus ou moins éloignée de celle que l'on vise. Par exemple, si l'on recherche le niveau fondamental de l'oscillateur anharmonique décrit par l'équation (7) pour $\lambda = 1$, il y a lieu de partir d'une valeur d'essai n'excédant pas trop l'unité. En effet, si l'on part de la valeur d'essai $E^{(0)} = 8$ par exemple, le processus va converger vers la vp 8.65504996 qui est le premier état pair excité alors que le niveau fondamental se situe à 1.39235164.

En pratique le bon sens dicte généralement les valeurs d'essai appropriées. Toutefois il est possible de proposer une procédure particulièrement rapide : on commence par calculer les vp lorsque le paramètre λ est très petit (ou très grand si cela s'avère plus facile) et on se sert de la vp trouvée comme valeur d'essai pour la valeur suivante de λ . Par exemple dans le cas de l'équation (7), il est clair que si $\lambda = 0.01$, le spectre des vp de E ne diffère pas beaucoup du spectre de l'oscillateur harmonique 1, 3, 5, 7, ... On essaie donc ces valeurs lorsque $\lambda = 0.01$. Puis on se sert des vp trouvées comme valeurs d'essai pour le cas $\lambda = 0.02$ et ainsi de suite. D'autres méthodes ont aussi été utilisées : au lieu de prendre la valeur exacte du cas $\lambda = 0.04$ comme valeur d'essai lorsque $\lambda = 0.05$, on peut améliorer la valeur d'essai en extrapolant les valeurs exactes des cas $\lambda = 0.03$ et $\lambda = 0.04$.

— Un autre point digne d'intérêt réside dans la rapidité avec laquelle l'algorithme résout le problème posé par une récurrence donnée. Il faut se rendre compte qu'un seul problème peut parfois être résolu de plusieurs manières aboutissant chacunes à une récurrence différente. Il en résulte que plusieurs approches sont possibles et l'une d'elles est généralement nettement plus rapide que les autres. Par ailleurs pour une récurrence déterminée, il apparaît généralement que le temps de calcul augmente ou diminue selon que le paramètre λ du problème varie. Il est cependant fréquent dans ces cas qu'une transformation judicieuse de la récurrence atténue ces effets gênants rendant le calcul rapide quel que soit λ .

3. APPLICATIONS DE LA MÉTHODE DU DÉTERMINANT DE HILL AU CALCUL DES ÉTATS PROPRES DE L'ÉLECTRON DE SCHRÖDINGER POUR UNE SÉRIE DE POTENTIELS SIMPLES

Nous passons en revue quelques exemples importants où la théorie développée ci-dessus s'applique avec bonheur. Chaque problème fait l'objet d'une étude détaillée assortie des commentaires ad hoc.

Rappelons d'abord que lorsque la récurrence du problème est à deux termes, le problème est soluble exactement. L'ES mène à une telle récurrence dans trois cas particulièrement importants (le potentiel est dit exact dans ces cas) :

— oscillateur harmonique unidimensionnel :

$$\psi'' + (E - x^2)\psi = 0$$

la variable x parcourt l'intervalle infini $(-\infty, +\infty)$,

le spectre des vp de E est : $E_N = 2N + 1$ ($N = 0, 1, 2, \dots$),

le spectre des fonctions propres ψ est : $\psi_N = D_N(x\sqrt{2})$; elles forment un ensemble orthogonal complet sur l'intervalle $(-\infty, +\infty)$ (fonctions de Weber-Hermite).

— potentiel coulombien : $R'' + (2/r)R' - l(l+1)/r^2 R + (E + 1/r)R = 0$

la variable r parcourt l'intervalle semi-infini $(0, \infty)$,

le spectre des vp de E est : $E_N = -1/(4N^2)$ ($N = l+1, l+2, \dots$);

le spectre des fonctions propres est :

$$R_N = r^l \exp[-r/(2N)] {}_1F_1(-N+l+1; 2l+2; r/N)$$

elles forment un ensemble orthogonal complet sur l'intervalle $(0, \infty)$ (fonctions de Laguerre).

— rotateur spatial : $T'' + \cot\theta T' - \frac{m^2}{\sin^2\theta} T + ET = 0$

la variable angulaire θ parcourt l'intervalle fini $(0, \pi)$,

le spectre des vp de E est : $E_l = l(l+1)$ ($l = 0, 1, 2, \dots$),

le spectre des fonctions propres est :

$$T_l = P_l^m(\cos\theta)$$

elles forment un ensemble orthogonal complet sur l'intervalle $(0, \pi)$ (fonctions de Legendre).

Dans les paragraphes qui suivent, nous allons envisager des potentiels plus complexes; ils seront de deux types :

— potentiels exacts perturbés : potentiels qui dépendent d'un paramètre et qui à la limite se réduisent à un potentiel exact. Exemples: oscillateurs anharmoniques $x^2 + \lambda x^4, x^2 + \lambda x^6, \dots$, potentiel coulombien tronqué $-1/(r+A)$, etc. ...

Dans ces cas, il est indiqué de rechercher la fonction d'onde du problème sous la forme d'un développement en série des fonctions propres du potentiel exact. On retrouve une idée qui est à la base de la méthode des perturbations. Toutefois ici le traitement est beaucoup plus efficace. Rien n'empêche cependant d'utiliser un autre développement selon le cas.

— potentiels autonomes : ces potentiels ne se réduisent pas, du moins de façon évidente, à un potentiel exact lors d'un passage à la limite. C'est le cas des potentiels $x^4, x^6, \dots, A \sin^2 x$, etc. ... Dans ces cas, on choisit à nouveau de préférence un développement en série de fonctions orthogonales : Weber-Hermite, Laguerre ou Legendre selon le domaine de définition de la variable du problème.

Certains cas sont traités dans les détails. D'autres font l'objet d'une présentation écourtée lorsque les calculs sont analogues à ceux d'un exemple déjà rencontré.

Bien entendu, tous les potentiels susceptibles d'être traités par cette méthode ne seront pas traités ici car cela exigerait trop de place.

3-1. Les oscillateurs x^{2m} (m entier positif).

$$\text{L'ES s'écrira : } \psi'' + (E - x^{2m})\psi = 0$$

où E est l'énergie quantifiable.

Lorsque $m = 1$, l'oscillateur est harmonique. Ce problème est soluble exactement. Le spectre des états propres est détaillé au § précédent.

Lorsque $m > 1$, l'oscillateur n'est plus harmonique et la solution doit être cherchée sous forme approchée. On peut, par exemple, obtenir une approximation des vp en utilisant la méthode WKB. Suivant la procédure indiquée par Titchmarsh [14], les valeurs quantifiées approchées E_N ($N = 0, 1, 2, \dots$) se déduisent de l'équation :

$$\int_0^a \sqrt{E_N - x^{2m}} dx \sim (2N + 1) \pi/4 \quad \text{avec} \quad E_N = a^{2m}$$

l'approximation étant d'autant meilleure que N est grand.

Cette intégrale se ramène sans peine à une intégrale eulérienne et on trouve le résultat classique :

$$E_N \sim (2N + 1)^{2m/(m+1)} \left[\frac{m\sqrt{\pi} \Gamma(3/2 + 1/(2m))}{\Gamma(1/(2m))} \right]^{2m/(m+1)} \quad (8)$$

A partir de cette formule, on peut calculer le tableau (1) des vp approchées des premiers états des oscillateurs x^{2m} :

TABLEAU I
vp des oscillateurs x^{2m}

N	m	1	2	3	4	5
0	1	1	0.87	0.80	0.76	0.74
1	3	3	3.75	4.16	4.42	4.60
2	5	5	7.41	8.95	10.00	10.77
3	7	7	11.61	14.83	17.14	18.87
4	9	9	16.23	21.62	25.62	28.68
5	11	11	21.21	29.21	35.33	40.07
6	13	13	26.51	37.53	46.16	52.93
7	15	15	32.08	46.52	58.03	67.19

3-1-1. Oscillateur x^4 .

L'ES s'écrit :

$$\psi'' + (E - x^4) \psi = 0 \quad (9)$$

On prend pour valeurs d'essai celles qui sont consignées dans la colonne $m = 2$ du tableau I et qui répondent à la formule :

$$E_N \sim 0.867145 (2N + 1)^{4/3}$$

Sauf l'état fondamental dont la valeur exacte diffère de 18 %, les autres sont correctes dans l'ordre du pourcent et même mieux lorsque N croît. Nous allons maintenant résoudre (9) par la méthode du déterminant de Hill.

3-1-1-1. 1ère approche : on essaie le développement suivant :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k x^k$$

que l'on introduit dans (9). On en déduit la récurrence à laquelle les C_k doivent satisfaire :

$$(k+1)(k+2)C_{k+2} + E C_k - C_{k-4} = 0 \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

On constate que l'indice de C_k saute de deux en deux : cela implique que cette récurrence d'ordre 6 peut se découpler en deux récurrences d'ordre 3. On les aurait trouvées d'emblée en cherchant séparément les états pairs et les états impairs sous la forme :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k x^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k x^{2k+1} \quad (\text{états impairs})$$

Les récurrences s'écrivent :

— pour les états pairs : $(4k+2)(k+1)C_{k+1} + E C_k - C_{k-2} = 0$

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & E & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{avec } n = 3, r = 2, s = 0$$

— pour les états impairs : $(2k+2)(2k+3)C_{k+1} + E C_k - C_{k-2} = 0$

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & E & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{avec } n = 3, r = 2, s = 0$$

celle-ci se déduit d'ailleurs de la précédente en remplaçant partout dans les coefficients de la récurrence des états pairs k par $k + 1/2$.

Il est difficile de trouver les vp du problème en appliquant à ces récurrences l'algorithme du § 2 du fait que le temps de calcul s'avère extrêmement long en sorte

qu'il est préférable de recourir à une autre approche. C'est d'autant plus nécessaire que la forme $\psi = \sum_0^{\infty} C_k x^{2k}$ n'est pas très pratique dans les calculs théoriques ultérieurs (norme, élément de matrice, etc. ...).

3-1-1-2. 2ème a p p r o c h e : on améliore grandement la méthode en choisissant un développement un peu différent :

$$\psi = \exp(-x^2/2) \sum_0^{\infty} C_k x^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \exp(-x^2/2) \sum_0^{\infty} C_k x^{2k+1} \quad (\text{états impairs})$$

Les récurrences s'écrivent :

— pour les états pairs :

$$(2k+1)(2k+2)C_{k+1} + (E - 1 - 4k)C_k + C_{k-1} - C_{k-2} = 0$$

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & 0 \\ 2 & E-1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 3, r = 2, s = 0$$

— pour les états impairs :

$$(2k+2)(2k+3)C_{k+1} + (E - 3 - 4k)C_k + C_{k-1} - C_{k-2} = 0$$

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & 0 & 0 \\ 6 & E-3 & 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 3, r = 2, s = 0$$

TABLEAU II
vp de E pour l'oscillateur x^4

N	États pairs	États impairs
0	1.060362090	
1		3.799673030
2	7.455697938	
3		11.64474551
4	16.26182602	
5		21.23837292
6	26.52847118	
7		32.09859771

Il est possible d'appliquer l'algorithme du § 2 en partant des valeurs d'essai du tableau I. Le calcul des vp de E exactes à 10^{-12} près exige la détermination des racines des approximants $|D^{(k)}|$ de l'ordre de $k \sim 130$ pour le fondamental jusqu'à $k \sim 250$ pour le septième état excité. Ces vp E_N figurent au tableau II.

Les coefficients C_k peuvent être calculés pour chaque vp de E à partir des récurrences. On posera pour simplifier $C_0 = 1$. En fait la solution ainsi définie peut toujours être multipliée par un facteur constant que l'on fixe usuellement en normalisant la fonction ψ suivant la condition :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

La méthode que nous venons de décrire est en fait celle utilisée par Biswas [8] sauf l'algorithme qui diffère. On constate qu'elle se présente agréablement. Toutefois, si l'on désire utiliser l'expression analytique des fonctions d'onde, les choses deviennent moins simples ainsi qu'en témoignent les exemples suivants :

— calcul de la norme des fonctions d'onde. Par exemple pour les états pairs, on calcule :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx &= \sum_0^{\infty} \sum C_k C_j \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^{2k+2j} dx \\ &= \sum_0^{\infty} \sum C_k C_j \Gamma(k+j+1/2) \end{aligned}$$

Cette série double est à convergence relativement lente.

— de même le calcul des intégrales de recouvrement et des éléments de matrice s'expriment sous forme de séries doubles lentement convergentes.

3-1-1-3. 3ème approche : l'approche la plus satisfaisante utilise un développement en série de fonctions de Weber-Hermite :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k / k! D_{2k}(x) \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k / \Gamma(k+3/2) D_{2k+1}(x) \quad (\text{états impairs})$$

Pour les états pairs, la récurrence à laquelle les C_k obéissent s'obtient de la manière suivante : on introduit le développement ci-dessus dans l'ES; tenant compte de l'équation différentielle et des relations de récurrence auxquelles obéissent les D_{2k} [19], on trouve successivement :

$$\sum_0^{\infty} C_k / k! [D''_{2k} + (E - x^4) D_{2k}] = 0 \text{ qui devient :}$$

$$\sum_0^{\infty} C_k / k! [(E - 2k - 1/2) + x^2/4 - x^4] D_{2k} = 0 \text{ qui se modifie à nouveau :}$$

$$\begin{aligned} \sum_0^{\infty} C_k / k! [(E - 24k^2 - 13k - 13/4) D_{2k} - (8k + 23/4) D_{2k+2} \\ + 2k(2k-1)(9/4 - 8k) D_{2k-2} - D_{2k+4} - 2k(2k-1)(2k-2)(2k-3) D_{2k-4}] = 0 \end{aligned}$$

Les divers D_{2k} étant indépendants, cela implique la récurrence suivante entre les C_k des états pairs :

$$(4 - 16k^2) C_{k+1} + (-32k^2 + 25k - 4.5) C_k + (-24k^2 + 35k + E - 14.25) C_{k-1} \\ + (k-1)(10.25 - 8k) C_{k-2} - (k-1)(k-2) C_{k-3} = 0 \quad (k = 1, 2, 3, \dots)$$

La matrice X s'écrit : pour les états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -32 & -24 & -8 & -1 \\ 0 & 25 & 35 & 18.25 & 3 \\ 4 & -4.5 & E - 14.25 & -10.25 & -2 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$

pour les états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -32 & -24 & -8 & -1 \\ -16 & -7 & 11 & 10.25 & 2 \\ 0 & 0 & E - 2.75 & -3.125 & -0.75 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$.

Si on utilise l'algorithme du § 2, on trouve les vp de E en parfait accord avec celles du tableau 2. Pour les obtenir avec une précision de 10^{-12} il y a lieu de prendre en considération les approximants $|D^{(k)}|$ jusqu'à l'ordre $k \sim 50$ pour le fondamental et jusqu'à $k \sim 75$ pour le septième état excité. Puisqu'ici $s = 1$, il y a lieu de calculer également les vp de C_1 ; elles sont fournies par l'algorithme et reportées dans le tableau 3.

TABLEAU III
vp de C_1 pour l'oscillateur x^4 ($C_0 = I$)

N	États pairs	États impairs
0	-0.2488529228	
1		-0.4259140461
2	1.269318861	
3		0.1500277784
4	1.606377743	
5		0.4131944085
6	2.178091274	
7		0.6848377842

Connaissant C_0 et C_1 , on peut calculer les C_k à partir de la récurrence ($k = 1, 2, 3, \dots$).

3-1-1-4. Commentaires.

Les deux premières approches (§ 3-1-1-1 et 3-1-1-2) partent de développements fort proches pour ψ . On constate que le facteur $\exp(-x^2/2)$ a pour effet d'accélérer les calculs numériques. Il serait intéressant d'élucider le rôle joué par ce facteur qui, nous le signalons pour mémoire, représente le comportement asymptotique de ψ dans l'oscillateur harmonique x^2 .

La troisième approche est encore plus rapide : le temps de calcul est nettement moindre. De plus, la solution dans cette troisième approche revêt une forme considérablement plus maniable à l'usage. Par exemple :

- la norme de chaque fonction se calcule sous la forme d'une série simple :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \sum_0^{\infty} \frac{C_k}{k!} C_j \int_{-\infty}^{+\infty} D_{2k} D_{2j} dx = \sqrt{2\pi} \sum_0^{\infty} \frac{(2k)!}{k!^2} |C_k|^2$$

— de même les intégrales de recouvrement, les éléments de matrice s'évaluent sous la forme de séries simples d'un emploi plus commode que les séries doubles rencontrées dans la deuxième approche.

Nous avons testé l'orthogonalité des diverses fonctions d'onde. Par exemple pour les deux premiers états pairs, on a :

$$\frac{\int \psi_0 \psi_2^* dx}{\sqrt{\int |\psi_0|^2 dx \cdot \int |\psi_2|^2 dx}} = \frac{\sum_0^{\infty} \frac{(2k)!}{k!^2} C_k^{(0)} C_k^{(2)*}}{\left[\sum_0^{\infty} \frac{(2k)!}{k!^2} |C_k^{(0)}|^2 \cdot \sum_0^{\infty} \frac{(2k)!}{k!^2} |C_k^{(2)}|^2 \right]^{1/2}} \leq 10^{-10}$$

En résumé, c'est l'approche par fonctions orthogonales qui est la plus avantageuse aux points de vue temps de calcul et maniabilité de la solution. Les autres approches (par développement de Taylor) ont pour seul avantage de mener immédiatement à la forme canonique de la récurrence à étudier.

3-1-2. Oscillateur x^6 .

L'ES s'écrit $\psi'' + (E - x^6)\psi = 0$

Les vp approchées sont données par la relation (8) où on pose $m = 3$:

$$E_N \sim 0.80082 (2N + 1)^{3/2}$$

soit les valeurs de la colonne $m = 3$ du tableau 2. Il est possible de proposer plusieurs développements pour la fonction inconnue ψ :

3-1-2-1. 1ère approche : on essaie le développement :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k x^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

Il en résulte une récurrence entre les C_k que nous ne détaillons pour abréger que sous sa forme matricielle (cf. § 2-1) :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & E & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{avec } n = 4, r = 2, s = 0$$

Nous n'avons pas réussi à faire converger l'algorithme dans ce cas, soit qu'il n'y avait pas convergence, soit que la convergence était extrêmement lente. Cette approche ne s'avère pas viable.

3-1-2-2. 2ème approche : on essaie le développement :

$$\psi = \exp(-x^4/4) \sum_0^{\infty} C_k x^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

La récurrence qui s'en déduit est résumée par la matrice X suivante :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & -4 \\ 2 & E & 1 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 2, r = 2, s = 0$$

Ici le facteur $\exp(-x^4/4)$ représente le comportement asymptotique des fonctions d'onde de l'oscillateur x^6 . Lorsqu'on tente d'appliquer l'algorithme à cette récurrence, on retrouve les mêmes écueils qu'à la section précédente. Cette approche n'est donc pas viable non plus.

3-1-2-3. 3ème approche : on essaie le développement :

$$\psi = \exp(-x^2/2) \sum_0^{\infty} C_k x^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

On en déduit la matrice X suivante :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & E-1 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 4, r = 2, s = 0$$

Ici, bien que fort lente, la convergence de l'algorithme est sensible. Toutefois le temps nécessaire pour un calcul précis s'avère nettement excessif.

3-1-2-4. 4ème approche : on essaie le développement en série de fonctions orthogonales :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(x) \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k + 3/2) D_{2k+1}(x) \quad (\text{états impairs})$$

On traitera cet exemple comme celui du § 3-1-1-3. Les récurrences obtenues correspondent aux matrices X suivantes :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} -64 & -192 & -240 & -160 & -60 & -12 & -1 \\ 96 & 528 & 960 & 840 & 390 & 93 & 9 \\ 16 & -432 & -1319 & -1521 & -854.75 & -237 & -26 \\ -24 & 108 & 628.5 & E+946.75 & 629.5 & 198 & 24 \end{pmatrix}$$

avec $n = 6, r = 3, s = 2$

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} -64 & -192 & -240 & -160 & -60 & -12 & -1 \\ 0 & 240 & 600 & 600 & 300 & 75 & 7.5 \\ 64 & -48 & -539 & -801 & -509.75 & -153 & -17.75 \\ 0 & 0 & 179 & E+376.25 & 292.125 & 101.25 & 13.125 \end{pmatrix}$$

avec $n = 6$, $r = 3$, $s = 2$.

L'algorithme s'applique dans ce cas et il livre le tableau 4 des vp de E moyen-nant prise en considération d'approximants d'ordre $k \sim 110$ à 150. Enfin, il existe une autre approche que nous signalons car elle mène à une récurrence particulièrement simple.

3-1-2-5. 5ème a p p r o c h e : on essaie le développement

$$\psi = \exp(-x^4/4) \sum_0^\infty C_k/k! D_{2k}(x) \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \exp(-x^4/4) \sum_0^\infty C_k/\Gamma(k + 3/2) D_{2k+1}(x) \quad (\text{états impairs})$$

Les récurrences obtenues correspondent aux matrices X suivantes :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -16 & 0 & 4 & 1 \\ 0 & 13 & -1 & -8.75 & -3 \\ 4 & -2.5 & E+0.75 & 4.75 & 2 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 4, r = 2, s = 1$$

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -16 & 0 & 4 & 1 \\ -16 & -3 & -1 & -4.75 & -2 \\ 0 & 0 & E+0.25 & 1.375 & 0.75 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 4, r = 2, s = 1$$

Par rapport à l'approche précédente, on constate une diminution des entiers n , r et s . Toutefois, le calcul numérique est assez long car la détermination des huit premiers états quantifiés avec une précision de 10^{-12} exige la prise en considération d'approximants $|D^{(k)}|$ jusqu'à l'ordre $k \sim 500, 600$. L'algorithme fournit également les vp de C_1 qui ensemble avec $C_0 = 1$ permettent de calculer tous les C_k .

Le tableau 4 rassemble les vp de E et de C_1 pour les divers états. Les valeurs de C_1 ont été notées entre parenthèses.

3-1-2-6. C o m m e n t a i r e s .

L'exemple du potentiel x^6 est particulièrement intéressant car il offre un éventail de possibilités dans le choix du développement initial de ψ . Il serait intéressant d'être en mesure de comprendre pourquoi les deux premières approches ont un rendement nul ou quasi nul alors que la troisième approche se révèle déjà rentable. Quelle est à cet égard l'influence du facteur mis en évidence dans le développement de ψ (on a noté successivement 1, $\exp(-x^2/2)$ et $\exp(-x^4/4)$) ? L'inefficience de telle approche est-elle attribuable à l'algorithme ou à la méthode théorique du déterminant de Hill

TABLEAU IV
vp de E et de C₁ pour l'oscillateur x⁶

N	États pairs	États impairs
0	1.144802454 (0.01348186635)	
1		4.338598712 (0.02477042681)
2	9.073084561 (1.423532295)	
3		14.93516963 (0.5961792091)
4	21.71416542 (2.145800749)	
5		29.29964594 (0.9852184055)
6	37.61308656 (2.878696098)	
7		46.59521145 (1.34352945)

qui s'avérerait d'un emploi abusif? Ces questions assez complexes ne seront pas approfondies ici, mais il est clair qu'elles mériteraient une réponse. Des recherches en cours permettent d'espérer améliorer grandement le rendement de la méthode en réduisant considérablement l'ordre des approximants tout en conservant la même précision dans les résultats. Par exemple, il est possible de diminuer la valeur de k qui atteignait 500 pour l'oscillateur x^6 (§ 3-1-2-5) jusqu'à la valeur 35. Cette étude déborde largement du cadre de ce travail et sera publiée séparément.

3-2. *Les oscillateurs anharmoniques $x^2 + \lambda x^{2m}$ (m entier positif).*

Les oscillateurs anharmoniques du type $x^2 + \lambda x^{2m}$ ont fait l'objet d'une étude récente de Hioe et Montroll [11]. Ces auteurs utilisent la formulation de l'ES dans la représentation de Bargmann. Il en résulte une application très efficace qui souffre seulement d'une certaine complexité dans les calculs. Par ailleurs, Biswas [8], ... ont étudié le même problème par la méthode du déterminant de Hill en partant exclusivement d'un développement du type :

$$\psi = \exp(-x^2/2) \sum_0^{\infty} C_k x^k$$

Cette méthode est d'un emploi beaucoup plus simple mais elle est nettement plus lente sur le plan numérique. Le théorème général du § 1-4 va nous permettre de tenter d'autres développements pour ψ . Par exemple lorsqu'on utilise les fonctions orthogonales de Weber-Hermite, on constate que sans rien perdre de sa clarté, la méthode du déterminant de Hill fournit la réponse au problème posé avec la même rapidité que la méthode de Hioe et Montroll. L'ES de ce problème s'écrit :

$$\psi'' + (E - x^2 - \lambda x^{2m}) \psi = 0 \quad (10)$$

Lorsque λ est très petit, cette équation ne diffère guère de celle de l'oscillateur harmonique. On en conclut que les vp de E sont voisines des entiers impairs. Par exemple, si $\lambda = 0.01$, on choisira comme valeurs d'essai pour $E : 1, 3, 5, 7, 9, \dots$. Ensuite, lorsque $\lambda = 0.02$, on prend pour valeur d'essai la valeur exacte trouvée lorsque λ valait 0.01. Lorsque $\lambda = 0.03$, on peut prendre pour valeurs d'essai soit les valeurs exactes du cas $\lambda = 0.02$ ou ce qui est plus précis, les valeurs résultant de l'extrapolation des valeurs exactes trouvées pour $\lambda = 0.01$ et 0.02, et ainsi de suite. On constate pratiquement que le temps de calcul croît avec λ . Lorsque λ dépasse largement l'unité, ce temps devient excessif. Heureusement, il est alors possible de modifier l'ES de la manière suivante :

si $\lambda \gg 1$, on pose $x = \lambda^{-1/(2m+2)}z$ d'où il résulte :

$$\psi'' + \left[\varepsilon - \frac{z^2}{\lambda^{2/(m+1)}} - z^{2m} \right] \psi = 0 \quad \text{avec } E = \varepsilon \lambda^{1/(m+1)} \quad (11)$$

Sous cette forme, c'est le terme quadratique qui apparaît comme une petite perturbation du terme z^{2m} , en sorte que le temps de calcul sera de l'ordre de celui qui est nécessaire pour le calcul du spectre de l'oscillateur pur z^{2m} . On calcule les vp de ε puis on en déduit celles de E par simple multiplication conforme à (11).

Concrètement, si $\lambda \leq 1$, on part de l'équation (10), tandis que si $\lambda \geq 1$, on part de l'équation (11).

3-2-1. L'oscillateur anharmonique $x^2 + \lambda x^4$.

L'ES s'écrit :

$$\begin{aligned} \psi'' + (E - x^2 - \lambda x^4) \psi &= 0 && \text{si } \lambda \leq 1 \\ \psi'' + (\varepsilon - z^2/\lambda^{2/3} - z^4) \psi &= 0 && \text{si } \lambda \geq 1 \end{aligned}$$

avec $E = \varepsilon \lambda^{1/3}$.

Pour chaque équation, il faut distinguer les états pairs des états impairs, ce qui fait en tout quatre récurrences.

3-2-1-1. 1ère approche : on essaie un développement du type

$$\begin{aligned} \psi &= \exp(-u^2/2) \sum_0^\infty C_k u^{2k} && \text{états pairs} \\ \psi &= \exp(-u^2/2) \sum_0^\infty C_k u^{2k+1} && \text{états impairs} \end{aligned}$$

u représente x ou z selon le cas traité ($\lambda \leq 1, \lambda \geq 1$).

On obtient les matrices X suivantes correspondant aux quatre récurrences :

états pairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & 0 \\ 2 & E-1 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} \text{ avec } n=3, r=2, s=0$$

états pairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & 0 \\ 2 & \varepsilon-1 & 1-\lambda^{-2/3} & -1 \end{pmatrix} \text{ avec } n=3, r=2, s=0 \text{ et } E=\varepsilon\lambda^{1/3}$$

états impairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & 0 & 0 \\ 6 & E-3 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} \text{ avec } n=3, r=2, s=0$$

états impairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & 0 & 0 \\ 6 & \varepsilon-3 & 1-\lambda^{-2/3} & -1 \end{pmatrix} \text{ avec } n=3, r=2, s=0 \text{ et } E=\varepsilon\lambda^{1/3}$$

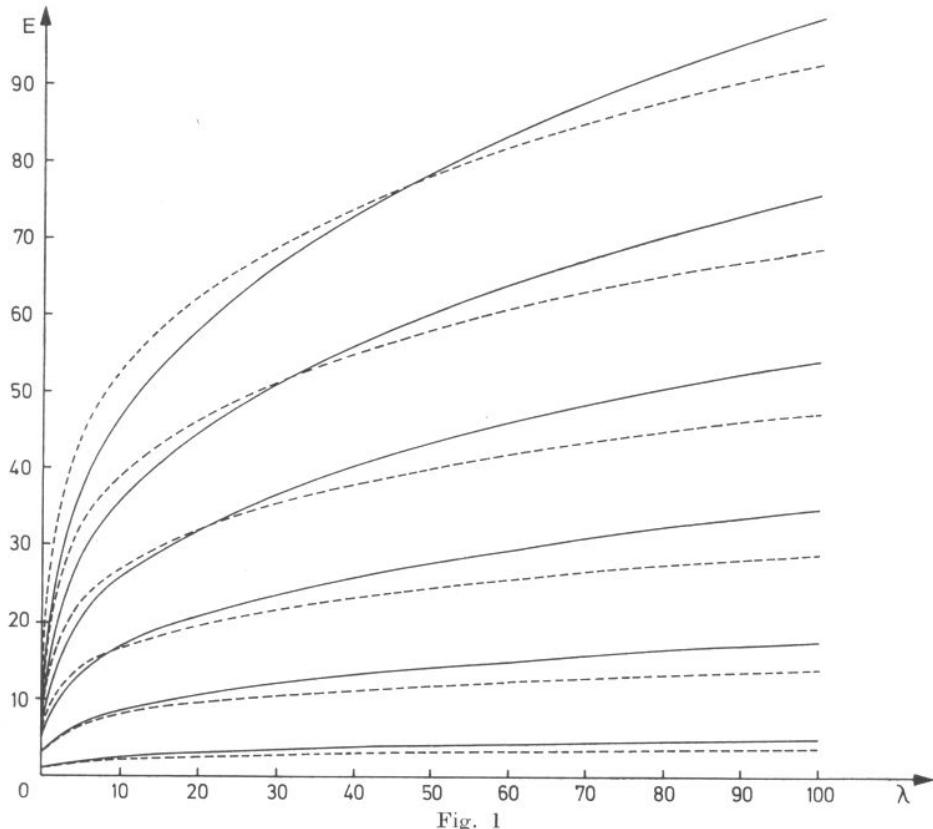


Fig. 1

Utilisant l'algorithme, on trouve le tableau 5 des vp de E en fonction de λ . Ce calcul à la précision de 10^{-12} requiert le calcul des approximants du déterminant de Hill d'ordre $k = 15$ à 180 selon la valeur de λ . La figure (1) représente en traits pleins les courbes caractéristiques des vp des six premiers états quantifiés.

TABLEAU V

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4 .	5.
0.01	1.00737367	3.03652530	5.09393913	7.17857318	9.28947982	11.42579265
0.02	1.01451241	3.07129656	5.18169159	7.34218988	9.54982624	11.80205335
0.03	1.02143912	3.10455263	5.26433701	7.49400815	9.78816075	12.14236183
0.04	1.02817285	3.13647935	5.34266146	7.63618308	10.00905563	12.45495996
0.05	1.03472970	3.16722537	5.41726142	7.77027127	10.21567015	12.74532470
0.06	1.04112344	3.19691218	5.48860379	7.89744420	10.41030231	13.01732589
0.07	1.04736603	3.22564088	5.55706308	8.01861164	10.59468876	13.27382262
0.08	1.05346793	3.25349680	5.62294562	8.13449787	10.77018150	13.51700046
0.09	1.05943836	3.28055286	5.68650612	8.24569125	10.93785838	13.74857577
0.10	1.06528551	3.30687201	5.74795927	8.35267783	11.09859562	13.96992620
0.20	1.11829265	3.53900529	6.27724862	9.25776562	12.44060180	15.79953446
0.30	1.16404716	3.73248427	6.70571938	9.97531280	13.48888135	17.21298236
0.40	1.20481033	3.90108705	7.07259873	10.58253709	14.36891259	18.39267901
0.50	1.24185406	4.05193233	7.39690064	11.11515428	15.13684575	19.41829575
0.60	1.27598357	4.18928397	7.68956529	11.59314727	15.82350546	20.33297777
0.70	1.30774865	4.31593924	7.95756842	12.02901583	16.44792935	21.16313250
0.80	1.33754521	4.43385154	8.20567739	12.43118264	17.02282708	21.92627495
0.90	1.36566983	4.54444892	8.43731843	12.80563483	17.55716909	22.63470559
1.00	1.39235164	4.64881270	8.65504996	13.15680390	18.05755744	23.29744145
2.00	1.60754130	5.47578454	10.35858338	15.88480797	21.92716619	28.40627821
3.00	1.76958884	6.08689644	11.60065818	17.85931650	24.71503546	32.07509317
4.00	1.90313695	6.58573564	12.60776113	19.45464635	26.96255167	35.02826480
5.00	2.01834065	7.01347919	13.46773041	20.81396694	28.87499635	37.53881525
6.00	2.12053293	7.39132601	14.22518144	22.00946710	30.55540673	39.74335324
7.00	2.21291421	7.73183188	14.90630497	23.08332369	32.06380667	41.72129868
8.00	2.29757783	8.04313133	15.52796037	24.06259482	33.43862332	43.52342264
9.00	2.37597855	8.33083636	16.10172151	24.96580811	34.70612730	45.18439674
10.00	2.44917407	8.59900345	16.63592149	25.80627622	35.88517122	46.72908090
20.00	3.00994482	10.64321651	20.69411119	32.18029374	44.81750258	58.42296972
30.00	3.41016853	12.09473387	23.56562313	36.68274724	51.12039867	66.66845930
40.00	3.73139160	13.25690471	25.86092197	40.27882973	56.15198169	73.24855321
50.00	4.00399277	14.24170700	27.80396286	43.32155047	60.40803205	78.81328696
60.00	4.24308145	15.10456791	29.50524037	45.98480039	64.13252977	83.68233556
70.00	4.45740819	15.87748814	31.02841426	48.36866190	67.46580824	88.03949117
80.00	4.65255185	16.58082411	32.41391925	50.53665802	70.49689804	92.00131945
90.00	4.83231441	17.22842531	33.68923376	52.53193363	73.28624819	95.64694633
100.00	4.99941755	17.83019272	34.87398426	54.38529157	75.87700403	99.03283732

3-2-1-2. 2ème approche : on essaie un développement du type :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(u) \quad \text{états pairs}$$

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k + 3/2) D_{2k+1}(u) \quad \text{états impairs}$$

u représente x ou z selon le cas traité ($\lambda \leq 1, \lambda \geq 1$).

On obtient les matrices X suivantes correspondant aux quatre récurrences :

états pairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16\lambda & -32\lambda & -24\lambda & -8\lambda & -\lambda \\ 0 & 24\lambda-3 & 36\lambda-5 & 18\lambda-0.75 & 3\lambda \\ 4\lambda & -4\lambda+1.5 & E-15\lambda+3.75 & -10\lambda+0.75 & -2\lambda \end{pmatrix}$$

avec $n = 4, r = 1, s = 1$.

états pairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -32 & -24 & -8 & -1 \\ 0 & 25-4\lambda^{-2/3} & 35-4\lambda^{-2/3} & 18.25-\lambda^{-2/3} & 3 \\ 4 & -4.5+2\lambda^{-2/3} & \varepsilon-14.25+3\lambda^{-2/3} & -10.25+\lambda^{-2/3} & -2 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4, r = 2, s = 1$

et $E = \varepsilon\lambda^{1/3}$

états impairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16\lambda & -32\lambda & -24\lambda & -8\lambda & -\lambda \\ -16\lambda & -8\lambda-3 & 12\lambda-5 & 10\lambda-0.75 & 2\lambda \\ 0 & 0 & E-3\lambda+1.25 & -3\lambda+0.375 & -3\lambda/4 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4, r = 2, s = 1$.

états impairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -32 & -24 & -8 & -1 \\ -16 & -7-4\lambda^{-2/3} & 11-4\lambda^{-2/3} & 10.25-\lambda^{-2/3} & 2 \\ 0 & 0 & \varepsilon-2.75+\lambda^{-2/3} & -3.125+\lambda^{-2/3}/2 & -0.75 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4, r = 2, s = 1$

et $E = \varepsilon\lambda^{1/3}$.

Utilisant l'algorithme, on retrouve le tableau 5 des vp de E . De plus, on trouve également le tableau 6 des vp de C_1 ; elles permettent de calculer tous les C_k à partir de $C_0 = 1$. L'ordre des approximants requis pour ce calcul à 10^{-12} varie de 15 à 70 selon les valeurs de λ .

3-2-1-3. Com mentaires.

Dans la première approche, on remarque la présence du facteur $\exp(-x^2/2)$ dont le rôle est d'accélérer la convergence de l'algorithme comme cela se passait plus haut.

Le seconde approche s'avère plus intéressante à deux égards :

- l'ordre des approximants calculés est nettement moindre, ce qui implique que le temps de calcul est grandement réduit.
- il est possible de proposer une variante à cette seconde approche qui résout élégamment le problème du potentiel $x^2 + \lambda x^4$ envisagé dans l'optique perturbative.

Il suffit pour cela de calculer ψ sous une forme légèrement différente :

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(x\sqrt{2}) && \text{états pairs} \\ \psi &= \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k + 3/2) D_{2k+1}(x\sqrt{2}) && \text{états impairs}\end{aligned}\tag{13}$$

La raison en est que les fonctions $D_k(x\sqrt{2})$ sont les fonctions propres de l'oscillateur $x^2 + \lambda x^4$ lorsque λ est nul. Lorsque λ n'est pas nul mais reste petit, la théorie classique des perturbations considère le potentiel $x^2 + \lambda x^4$ comme un potentiel x^2 perturbé par le petit terme λx^4 . La solution au problème perturbé est alors cherchée sous la forme d'un développement en série des fonctions propres du problème non perturbé soit précisément un développement du type (13).

Toutefois, en théorie des perturbations, les calculs se font via de telles approximations que le rendement de la méthode reste faible : les calculs sont laborieux à l'extrême et le résultat final est totalement imprécis sauf si λ est très petit.

D'ailleurs les développements en série que l'on obtient habituellement par cette méthode et qui devraient constituer la solution du problème perturbé sont divergents (13). De plus, on a rarement l'occasion d'aller très loin dans les divers ordres d'approximation car les intégrales qui doivent être évaluées deviennent rapidement inextricables.

La méthode du déterminant de Hill permet de calculer d'un seul coup tous les C_k avec la précision voulue ; elle résout donc de manière parfaite le problème de perturbation. On ne consent aucune approximation dans les calculs intermédiaires, on ne construit pas de séries divergentes et une fois la récurrence du problème connue, ce qui, nous l'avons vu, ne pose aucun problème, il n'y a plus à effectuer le moindre calcul fastidieux. Étudions en guise d'illustration l'état fondamental et le premier état pair excité de l'oscillateur $x^2 + \lambda x^4$ (les autres feraient l'objet d'un traitement analogue).

Les matrices X associées aux récurrences du problème s'obtiennent en introduisant les développements (13) dans l'ES. On trouve :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} -4\lambda & -8\lambda & -6\lambda & -2\lambda & -\lambda/4 \\ 0 & 6\lambda & 9\lambda-4 & 9\lambda/2 & 3\lambda/4 \\ \lambda & -\lambda & E+3-15\lambda/4 & -5\lambda/2 & -\lambda/2 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 4, r = 2, s = 1$$

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} -4\lambda & -8\lambda & -6\lambda & -2\lambda & -\lambda/4 \\ -4\lambda & -2\lambda & 3\lambda-4 & 5\lambda/2 & \lambda/2 \\ 0 & 0 & E+1-3\lambda/4 & -3\lambda/4 & -3\lambda/16 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 4, r = 2, s = 1$$

L'ensemble des vp de E qu'il est possible d'en tirer en employant l'algorithme coïncide évidemment avec celles du tableau 5. Par contre, les vp de C_1 sont différentes; elles sont consignées dans le tableau 7. Pour les besoins de notre illustration, nous en extrayons les valeurs correspondant à l'état fondamental et au premier état pair excité, soit si on choisit $\lambda = 0.01$: $C_1 = -0.00363840$ et $C_1 = 138.49124053$.

TABLEAU VI

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	-0.17040547	-0.25915470	2.41931988	1.01210047	4.76549871	2.16912747
0.02	-0.17387632	-0.26734384	2.34783950	0.95207610	4.46043020	1.98841298
0.03	-0.17711863	-0.27476052	2.28367771	0.90031640	4.21725027	1.84794221
0.04	-0.18016302	-0.28154261	2.22549957	0.85491387	4.01685139	1.73409716
0.05	-0.18303388	-0.28779265	2.17231563	0.81455485	3.84756849	1.63903577
0.06	-0.18575106	-0.29358937	2.12336840	0.77829374	3.70180422	1.55786021
0.07	-0.18833099	-0.29899467	2.07806318	0.74542633	3.57435996	1.48732233
0.08	-0.19078746	-0.30405827	2.03592349	0.71541375	3.46153672	1.42516607
0.09	-0.19313216	-0.30882075	1.99656114	0.68783439	3.36061781	1.36976564
0.10	-0.19537514	-0.31331570	1.95965527	0.66235224	3.26955487	1.31991374
0.20	-0.21368907	-0.34814090	1.68214990	0.48058927	2.67002837	0.99380263
0.30	-0.22720863	-0.37214331	1.49995993	0.36873090	2.33461574	0.81200767
0.40	-0.23791061	-0.39035001	1.36684670	0.28980361	2.10917108	0.68975371
0.50	-0.24674818	-0.40494110	1.26335116	0.22975780	1.94270089	0.59937481
0.60	-0.25425866	-0.41706426	1.17950687	0.18182543	1.81248605	0.52859304
0.70	-0.26077608	-0.42739857	1.10956058	0.14225858	1.70657403	0.47095619
0.80	-0.26652262	-0.43637897	1.04990811	0.10877911	1.61796035	0.42268338
0.90	-0.27165371	-0.44430060	0.99815223	0.07990614	1.54221536	0.38138269
1.00	-0.27628232	-0.45137274	0.95262354	0.05462682	1.47637400	0.34545214
2.00	-0.26711036	-0.44255334	1.04934898	0.08637090	1.52424213	0.36978732
3.00	-0.26311149	-0.43880628	1.09412944	0.10025124	1.54372686	0.37985297
4.00	-0.26077981	-0.43664840	1.12104965	0.10835869	1.55470008	0.38557408
5.00	-0.25922145	-0.43521717	1.13939189	0.11378357	1.56187475	0.38933788
6.00	-0.25809264	-0.43418590	1.15285950	0.11771644	1.56699219	0.39203456
7.00	-0.25723017	-0.43340103	1.16325470	0.12072334	1.57085721	0.39407832
8.00	-0.25654562	-0.43277997	1.17157144	0.12311117	1.57389716	0.39569023
9.00	-0.25598656	-0.43227398	1.17840766	0.12506214	1.57636167	0.39699999
10.00	-0.25551971	-0.43185230	1.18414694	0.12669188	1.57840715	0.39808913
20.00	-0.25310814	-0.42968633	1.21424900	0.13511933	1.58879209	0.40364923
30.00	-0.25211762	-0.42880261	1.22683987	0.13858518	1.59296967	0.40590119
40.00	-0.25155600	-0.42830306	1.23403923	0.14055150	1.59531568	0.40716990
50.00	-0.25118696	-0.42797541	1.23879392	0.14184402	1.59684828	0.40800035
60.00	-0.25092275	-0.42774111	1.24220996	0.14276965	1.59794122	0.40859338
70.00	-0.25072260	-0.42756379	1.24480432	0.14347097	1.59876674	0.40904175
80.00	-0.25056479	-0.42742408	1.24685386	0.14402401	1.59941615	0.40939474
90.00	-0.25043659	-0.42731064	1.24852146	0.14447332	1.59994275	0.40968116
100.00	-0.25033001	-0.42721638	1.24990970	0.14484692	1.60037992	0.40991905

TABLEAU VII

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	-0.00363840	-0.00894947	138.49124053	42.29102387	12.83588009	7.81010699
0.02	-0.00707340	-0.01715427	71.67354811	22.19987311	11.94833272	6.99805199
0.03	-0.01032996	-0.02474053	49.31872015	15.45485626	11.24081278	6.39912097
0.04	-0.01342823	-0.03180265	38.08945089	12.05284895	10.65867577	5.93409758
0.05	-0.01638478	-0.03841358	31.31628392	9.99176216	10.16819811	5.55958608
0.06	-0.01921347	-0.04463117	26.77495522	8.60345770	9.74722660	5.24958417
0.07	-0.02192604	-0.05050220	23.51154082	7.60114309	9.38050043	4.98745028
0.08	-0.02453255	-0.05606517	21.04865377	6.84114636	9.05710467	4.76198049
0.09	-0.02704173	-0.06135222	19.12079628	6.24347094	8.76899117	4.56532227
0.10	-0.02946116	-0.06639048	17.56847437	5.75999812	8.51007367	4.39178884
0.20	-0.04988654	-0.10695870	10.37889010	3.47754433	6.83800376	3.33387848
0.30	-0.06569270	-0.13643941	7.81902045	2.63251524	5.93445255	2.79894542
0.40	-0.07862131	-0.15959783	6.46224751	2.17079806	5.34302734	2.45941704
0.50	-0.08956679	-0.17864258	5.60457542	1.87158681	4.91530224	2.21814916
0.60	-0.09905624	-0.19479001	5.00513054	1.65804786	4.58631251	2.03464550
0.70	-0.10742863	-0.20878467	4.55805390	1.49590313	4.32243364	1.88858228
0.80	-0.11491573	-0.22111648	4.20912505	1.36735570	4.10424788	1.76847105
0.90	-0.12168341	-0.23212540	3.92751817	1.26216159	3.91963584	1.66725320
1.00	-0.12785467	-0.24205709	3.69432419	1.17396529	3.76058034	1.58031508
2.00	-0.26711036	-0.44255334	1.04934898	0.08637090	1.52424213	0.36978732
3.00	-0.26311149	-0.43880628	1.09412944	0.10025124	1.54372686	0.37985297
4.00	-0.26077981	-0.43664840	1.12104965	0.10835869	1.55470008	0.38557408
5.00	-0.25922145	-0.43521717	1.13939189	0.11378357	1.56187475	0.38933788
6.00	-0.25809264	-0.43418590	1.15285950	0.11771644	1.56699219	0.39203456
7.00	-0.25723017	-0.43340103	1.16325470	0.12072334	1.57085721	0.39407832
8.00	-0.25654562	-0.43277997	1.17157144	0.12311117	1.57389716	0.39569023
9.00	-0.25598656	-0.43227398	1.17840766	0.12506214	1.57636167	0.39699999
10.00	-0.25551971	-0.43185230	1.18414694	0.12669188	1.57840715	0.39808913
20.00	-0.25310814	-0.42968633	1.21424900	0.13511933	1.58879209	0.40364923
30.00	-0.25211762	-0.42880261	1.22683987	0.13858518	1.59296967	0.40590119
40.00	-0.25155600	-0.42830306	1.23403923	0.14055150	1.59531568	0.40716990
50.00	-0.25118696	-0.42797541	1.23879392	0.14184402	1.59684828	0.40800035
60.00	-0.25092275	-0.42774111	1.24220996	0.14276965	1.59794122	0.40859338
70.00	-0.25072260	-0.42756379	1.24480432	0.14347097	1.59876674	0.40904175
80.00	-0.25056479	-0.42742408	1.24685386	0.14402401	1.59941615	0.40939474
90.00	-0.25043659	-0.42731064	1.24852146	0.14447332	1.59994275	0.40968116
100.00	-0.25033001	-0.42721638	1.24990970	0.14484692	1.60037992	0.40991905

Il est alors possible de calculer les divers C_k puis de construire les fonctions propres correspondantes; on trouve :

état fondamental : $E = 1.00737367$

$$\psi = D_0(x\sqrt{2}) - 0.00363840 D_2(x\sqrt{2}) - 0.0005726 D_4(x\sqrt{2}) + \dots$$

premier état pair excité : $E = 5.09393913$

$$\psi = 0.00722067 D_0(x\sqrt{2}) + D_2(x\sqrt{2}) - 0.0164386 D_4(x\sqrt{2}) + \dots$$

Il y a lieu de comparer ces valeurs avec celles fournies au premier ordre par la théorie des perturbations :

$$\text{état fondamental : } E \sim 1 + \frac{0.01}{4} 3 \sim 1.0075$$

$$\psi \sim D_0(x\sqrt{2}) - 0.00375 D_2(x\sqrt{2}) - 0.0003125 D_4(x\sqrt{2})$$

$$\text{premier état pair excité : } E \sim 5 + \frac{0.39}{4} \sim 5.0975$$

$$\psi \sim 0.0075 D_0(x\sqrt{2}) + D_2(x\sqrt{2}) - 0.00875 D_4(x\sqrt{2}) - 0.0003125 D_6(x\sqrt{2})$$

On constate que l'approximation des vp de E obtenue par perturbation est bonne ($\sim 5.10^{-4}$) si λ est de l'ordre de 0.01. Elle cesserait de l'être pour λ plus proche de l'unité et à fortiori plus grand que un. Par contre, même pour les petites valeurs de λ , l'approximation des fonctions propres n'est pas aussi satisfaisante. A côté de cela, la méthode du déterminant de Hill résout le problème de manière aussi précise que souhaitée.

Signalons encore ce fait que le temps de calcul est encore considérablement réduit par rapport à ce qu'il était au § 3-2-1-2. Cela est dû à la présence du facteur $\sqrt{2}$ dans le développement de la solution (cf. remarque § 3-1-2-6).

3-2-2. L'oscillateur anharmonique $x^2 + \lambda x^6$.

L'ES s'écrit :

$$\psi'' + (E - x^2 - \lambda x^6) \psi = 0 \quad \text{si } \lambda \leq 1 \quad (14)$$

$$\psi'' + (\varepsilon - z^2/\lambda^{1/2} - z^6) \psi = 0 \quad \text{si } \lambda \geq 1 \quad (15)$$

avec $E = \varepsilon\lambda^{1/4}$.

3-2-2-1. 1ère approche : on essaie un développement du type

$$\psi = \exp(-u^2/2) \sum_0^{\infty} C_k u^{2k} \quad \text{états pairs}$$

$$\psi = \exp(-u^2/2) \sum_0^{\infty} C_k u^{2k+1} \quad \text{états impairs}$$

u représente x et z selon le cas traité ($\lambda \leq 1$ ou $\lambda \geq 1$).

On obtient les matrices X suivantes correspondant aux quatre récurrences :
états pairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & 0 \\ 2 & E-1 & 0 & 0 \\ & & & -\lambda \end{pmatrix} \text{ avec } n=4, r=2, s=0$$

états pairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & \varepsilon-1 & 1-\lambda^{-1/2} & 0 & -1 \\ & & & & \end{pmatrix} \text{ avec } n=4, r=2, s=0 \text{ et } E=\varepsilon\lambda^{1/4}$$

états impairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & E-3 & 0 & 0 & -\lambda \\ & & & & \end{pmatrix} \text{ avec } n=4, r=2, s=0$$

états impairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & \varepsilon-3 & 1-\lambda^{-1/2} & 0 & -1 \\ & & & & \end{pmatrix} \text{ avec } n=4, r=2, s=0 \text{ et } E=\varepsilon\lambda^{1/4}$$

Lorsqu'on applique l'algorithme à ces récurrences, on constate que le rendement est faible à cause de la lenteur des calculs ; il n'est pas possible de couvrir toutes les valeurs de λ dans des temps raisonnables.

3-2-2-2. 2ème approche : on pourrait essayer un développement du type :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(u) \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k+3/2) D_{2k+1}(u) \quad (\text{états impairs})$$

Un calcul détaillé mènerait à des récurrences caractérisées par $n=6, r=3, s=2$. Toutefois, cette approche n'est pas la plus simple et nous lui préférions la suivante. Néanmoins, le lecteur intéressé par l'approche perturbative du potentiel $x^2 + \lambda x^6$ devra y recourir (avec $x\sqrt{2}$ mis à la place de x ; cf. § 3-2-1-3).

3-2-2-3. 3ème approche : on essaie un développement du type :

$$\psi = \exp(-b x^4/4) \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(u) \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \exp(-b x^4/4) \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k+3/2) D_{2k+1}(u) \quad (\text{états impairs})$$

si $\lambda \leq 1$, on a $b = \lambda^{1/2}$ et $u = x$, si $\lambda \geq 1$, on a $b = 1$ et $u = z$.

On obtient les matrices X suivantes correspondant aux quatre récurrences :
états pairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16\lambda^{1/2} & -16\lambda^{1/2} & 0 & 4\lambda^{1/2} & \lambda^{1/2} \\ 0 & -3+12\lambda^{1/2} & -5 & -0.75-9\lambda^{1/2} & -3\lambda^{1/2} \\ 4\lambda^{1/2} & 1.5-2\lambda^{1/2} & E+3.75 & 0.75+5\lambda^{1/2} & 2\lambda^{1/2} \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$

états pairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -16 & 0 & 4 & 1 \\ 0 & 13-4\lambda^{-1/2} & -1-4\lambda^{-1/2} & -8.75-\lambda^{-1/2} & -3 \\ 4 & -2.5+2\lambda^{-1/2} & \varepsilon+0.75+3\lambda^{-1/2} & 4.75+\lambda^{-1/2} & 2 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$ et $E = \varepsilon\lambda^{1/4}$

états impairs, $\lambda \leq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16\lambda^{1/2} & -16\lambda^{1/2} & 0 & 4\lambda^{1/2} & \lambda^{1/2} \\ -16\lambda^{1/2} & -3-4\lambda^{1/2} & -5 & -0.75-5\lambda^{1/2} & -2\lambda^{1/2} \\ 0 & 0 & E+1.25 & 0.375+1.5\lambda^{1/2} & 0.75\lambda^{1/2} \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$

états impairs, $\lambda \geq 1$:

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -16 & 0 & 4 & 1 \\ -16 & -3-4\lambda^{-1/2} & -1-4\lambda^{-1/2} & -4.75-\lambda^{-1/2} & -2 \\ 0 & 0 & \varepsilon+0.25+\lambda^{-1/2} & 1.375+0.5\lambda^{-1/2} & 0.75 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$ et $E = \varepsilon\lambda^{1/4}$.

Appliquant l'algorithme à ces récurrences, on trouve le tableau 8 des vp de E ainsi que le tableau 9 des vp de C_1 . L'ordre des approximants requis pour un calcul à 10^{-12} peut aller jusqu'à 600 les pour valeurs de λ les plus défavorables. Les courbes caractéristiques des vp de E ont été tracées en traits interrompus sur la figure 1.

3-3. L'oscillateur anharmonique en $x^2 + \lambda x^3$.

Les potentiels étudiés dans les paragraphes précédents présentent tous l'allure de cuvettes de hauteur infinie ce qui implique un spectre énergétique complètement discret. Lorsque le potentiel x^2 est perturbé par un terme impair en x , λx^3 par exemple, la cuvette devient de hauteur finie et si $x \rightarrow -\infty$, le potentiel tend également vers $-\infty$. Cela signifie qu'il y a une probabilité d'évasion de la particule hors de la cuvette qui augmente avec λ . Traitons l'exemple du potentiel $x^2 + \lambda x^3$: l'ES s'écrit

$$\psi'' + (E - x^2 - \lambda x^3) \psi = 0$$

Le potentiel est représenté graphiquement sur la figure 2.

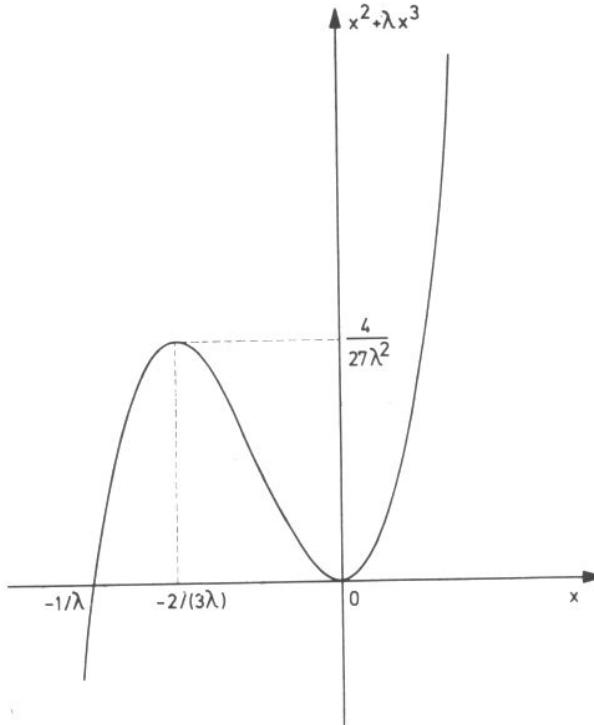


Fig. 2

On peut prévoir l'existence de niveaux quasi-quantifiés $E < 4/(27\lambda^2)$ correspondants à des états quasi-stables pour autant que λ ne soit pas trop grand. Lorsque λ est petit, la théorie des perturbations fournit les valeurs approchées suivantes :

$$E \sim 2N + 1 - \frac{15}{8} (N^2 + N + 11/30) \lambda^2 \quad (16)$$

Nous nous proposons de montrer que la méthode du déterminant de Hill calcule ces états quasi-stables très facilement.

3-3-1. 1ère approche : on choisit le développement :

$$\psi = \exp(-x^2/2) \sum_0^{\infty} C_k x^k$$

Ici, il n'y a plus lieu de distinguer états pairs et impairs. Introduisant dans l'ES on trouve la matrice X de la récurrence :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E+1 & 0 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} \text{ avec } n = 5, r = 2, s = 1$$

TABLEAU VIII

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	1.01674136	3.10797991	5.34742035	7.77769747	10.40833751	13.23527816
0.02	1.03088590	3.19088422	5.58763738	8.26338575	11.21215690	14.41745800
0.03	1.04341969	3.26067585	5.78053645	8.63884998	11.81661984	15.28916826
0.04	1.05479988	3.32189330	5.94479460	8.95153036	12.31240695	15.99675790
0.05	1.06529300	3.37691035	6.08933239	9.22253236	12.73783254	16.59986863
0.06	1.07507319	3.42716656	6.21925152	9.46341037	13.11324867	17.12954231
0.07	1.08426263	3.47361675	6.33779485	9.68128640	13.45094421	17.60426819
0.08	1.09295132	3.51693404	6.44717460	9.88090698	13.75898510	18.03606116
0.09	1.10120809	3.55761462	6.54897867	10.06561682	14.04298782	18.43322300
0.10	1.10908708	3.59603692	6.64439171	10.23787372	14.30704005	18.80175833
0.20	1.17388935	3.90083557	7.38164722	11.54746761	16.29510658	21.55919879
0.30	1.22368713	4.12547911	7.90902608	12.46775595	17.67764949	23.46397417
0.40	1.26509939	4.30798008	8.33057180	13.19664392	18.76688469	24.95960616
0.50	1.30098697	4.46368308	8.68639398	13.80829058	19.67786640	26.20782047
0.60	1.33289594	4.60054962	8.99675268	14.33956624	20.46727770	27.28783843
0.70	1.36177260	4.72331632	9.27348046	14.81177641	21.16767503	28.24498898
0.80	1.38824495	4.83506015	9.52415810	15.23846450	21.79966237	29.10787991
0.90	1.41275436	4.93790729	9.75396688	15.62883101	22.37718889	29.89583765
1.00	1.43562462	5.03339594	9.96662200	15.98944079	22.91018043	30.62259057
2.00	1.60993195	5.74934775	11.54393457	18.64969459	26.83024276	35.95748895
3.00	1.73285712	6.24519339	12.62340235	20.45965666	29.48866611	39.56791184
4.00	1.83043734	6.63511263	13.46706487	21.87007199	31.55686222	42.37382626
5.00	1.91245383	6.96085713	14.16909927	23.04152650	33.27287826	44.70041021
6.00	1.98378053	7.24291748	14.77527890	24.05169738	34.75155664	46.70428000
7.00	2.04722908	7.49303433	15.31165906	24.94465912	36.05794498	48.47404569
8.00	2.10462591	7.71862548	15.79462162	25.74805792	37.23279247	50.06517195
9.00	2.15716300	7.92470659	16.23520129	26.48048215	38.30347002	51.51489038
10.00	2.20572327	8.11484312	16.64121811	27.15508560	39.28933066	52.84951268
20.00	2.56464465	9.51208850	19.61381808	32.08573405	46.48820150	62.58927647
30.00	2.80938113	10.45882502	21.61981275	35.40696459	51.33236526	69.13898952
40.00	3.00031532	11.19506394	23.17658358	37.98205565	55.08633684	74.21302357
50.00	3.15902120	11.80578000	24.46624592	40.11406864	58.19338570	78.41178473
60.00	3.29595195	12.33193814	25.57631261	41.94842291	60.86603727	82.02299071
70.00	3.41704572	12.79673026	26.55622116	43.56718814	63.22416910	85.20887684
80.00	3.52603057	13.21468013	27.43688191	45.02164087	65.34265027	88.07074107
90.00	3.62541490	13.59554072	28.23902598	46.34615226	67.27165083	90.67645032
100.00	3.71697473	13.94620662	28.97729382	47.56498458	69.04657653	93.07389170

TABLEAU IX

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	-0.12751656	-0.15741619	2.16316738	0.90166601	3.37858673	1.56301548
0.02	-0.11573802	-0.13368673	2.04533952	0.84748691	3.14018930	1.45583780
0.03	-0.10833695	-0.11990232	1.96752650	0.81316608	3.00546550	1.39396771
0.04	-0.10303399	-0.11055533	1.90932165	0.78796401	2.91199348	1.35036328
0.05	-0.09897199	-0.10369518	1.86288889	0.76803954	2.84066992	1.31669131
0.06	-0.09572861	-0.09840634	1.82432834	0.75156401	2.78314225	1.28927372
0.07	-0.09306357	-0.09418862	1.79140559	0.73752097	2.73501945	1.26615945
0.08	-0.09082708	-0.09074072	1.76271852	0.72528634	2.69371134	1.24618820
0.09	-0.08891953	-0.08786822	1.73732880	0.71444917	2.65756361	1.22861351
0.10	-0.08727145	-0.08543903	1.71457751	0.70472441	2.62545624	1.21292667
0.20	-0.07815387	-0.07303148	1.56548970	0.64032048	2.41955513	1.11066089
0.30	-0.07451066	-0.06879432	1.48004470	0.60257063	2.30341063	1.05176159
0.40	-0.07279103	-0.06714215	1.42070494	0.57587195	2.22295898	1.01048425
0.50	-0.07197289	-0.06661100	1.37553671	0.55525114	2.16168975	0.97879939
0.60	-0.07164290	-0.06664581	1.33923333	0.53847799	2.11237359	0.95314561
0.70	-0.07160110	-0.06699198	1.30898048	0.52435897	2.07120482	0.93163079
0.80	-0.07173923	-0.06751798	1.28311016	0.51218055	2.03593659	0.91312982
0.90	-0.07199391	-0.06815022	1.26055451	0.50148219	2.00513321	0.89691966
1.00	-0.07232586	-0.06884506	1.24058973	0.49194944	1.97782254	0.88250836
2.00	-0.04980870	-0.04302953	1.29133750	0.52139049	2.02537076	0.91175706
3.00	-0.03918512	-0.03117729	1.31455077	0.53471858	2.04686693	0.92493397
4.00	-0.03265206	-0.02398820	1.32860714	0.54274771	2.05980872	0.93285345
5.00	-0.02810535	-0.01902854	1.33829447	0.54826324	2.06869564	0.93828572
6.00	-0.02470227	-0.01533942	1.34549508	0.55235351	2.07528443	0.94231012
7.00	-0.02202954	-0.01245570	1.35112070	0.55554356	2.08042215	0.94544639
8.00	-0.01985719	-0.01012064	1.35567412	0.55812206	2.08457432	0.94797988
9.00	-0.01804560	-0.00817932	1.35945850	0.56026265	2.08802093	0.95008207
10.00	-0.01650435	-0.00653195	1.36266899	0.56207691	2.09094183	0.95186307
20.00	-0.00801853	0.00246915	1.38019705	0.57195460	2.10684013	0.96154793
30.00	-0.00418211	0.00650078	1.38804066	0.57635981	2.11392805	0.96586086
40.00	-0.00187225	0.00891703	1.39273945	0.57899439	2.11816639	0.96843843
50.00	-0.00028602	0.01057151	1.39595597	0.58079599	2.12106440	0.97020026
60.00	0.00089008	0.01179570	1.39833549	0.58212778	2.12320656	0.97150225
70.00	0.00180720	0.01274884	1.40018789	0.58316398	2.12487317	0.97251502
80.00	0.00254842	0.01351822	1.40168300	0.58399995	2.12621768	0.97333193
90.00	0.00316371	0.01415625	1.40292274	0.58469287	2.12733210	0.97400896
100.00	0.00368516	0.01469652	1.40397245	0.58527941	2.12827539	0.97458197

L'algorithme s'applique et le calcul est extrêmement rapide car la considération d'approximants d'ordre 80 au maximum suffit pour obtenir des résultats corrects à 10^{-12} . Les vp de E sont présentées dans le tableau 10 et les vp de C_1 dans le tableau 11. Lorsque λ est très petit, l'accord avec (16) est bon; par exemple, si $\lambda = 0.01$, la cuvette a une hauteur de 1481; la relation (16) donne les vp approchées suivantes :

0.99993125, 2.99955625, 4.99880625, 6.99768125, 8.99618125, 10.99430625, ... valeurs à comparer avec celles de la première ligne du tableau 10.

L'accord se détériore lorsque λ croît.

TABLEAU X

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	0.99993123	2.99955603	4.99880533	6.99767881	8.99617612	10.99429694
0.02	0.99972471	2.99822147	4.99521025	6.99068566	8.98464229	10.97707467
0.03	0.99937977	2.99598830	4.98918104	6.97893018	8.96520742	10.94798387
0.04	0.99889531	2.99284291	4.98065992	6.96225585	8.93753703	10.90640645
0.05	0.99826974	2.98876566	4.96956243	6.94043024	8.90112616	10.85139294
0.06	0.99750099	2.98373037	4.95577345	6.91312935	8.85525387	10.78155328
0.07	0.99658645	2.97770338	4.93914118	6.87991308	8.79890838	10.69486591
0.08	0.99552293	2.97064244	4.91946846	6.84018686	8.73066050	10.58832751
0.09	0.99430658	2.96249512	4.89649981	6.79313944	8.64843684	10.45724710

TABLEAU XI

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	-0.00500063	99.95311169	-0.08506973	42.76769793	-0.27257287	27.10333376
0.02	-0.01000501	49.90610433	-0.17056045	21.24925916	-0.55069549	13.29588033
0.03	-0.01501694	33.19221436	-0.25690635	14.01567314	-0.84047980	8.57582711
0.04	-0.02004028	24.81132062	-0.34456907	10.35218324	-1.14930498	6.12292511
0.05	-0.02507897	19.76330061	-0.43405428	8.11540635	-1.48684260	4.57102850
0.06	-0.03013712	16.38135472	-0.52593214	6.59044898	-1.86677071	3.46235349
0.07	-0.03521900	13.95105084	-0.62086403	5.47046014	-2.30993386	2.59764526
0.08	-0.04032911	12.11508155	-0.71963909	4.60147111	-2.85078086	1.87294747
0.09	-0.04547225	10.67484527	-0.82322646	3.89726826	-3.55210888	1.22363551

3-3-2. 2ème approche : on peut envisager une autre approche à ce problème en utilisant un développement de fonctions orthogonales; on pose par exemple

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k D_k(x) \text{ (ou } \psi = \sum_0^{\infty} C_k D_k(x\sqrt{2})$$

si l'on désire envisager le problème dans l'optique perturbative).

Si on essaie la deuxième version, on trouve la récurrence suivante symbolisée par sa matrice X :

$$X = \begin{pmatrix} -\lambda/\sqrt{8} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3\lambda/\sqrt{8} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda/\sqrt{8} & 0 & 6\lambda/\sqrt{8} & -2 & -3\lambda/\sqrt{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3\lambda/\sqrt{8} & E+3 & 6\lambda/\sqrt{8} & 0 & -\lambda/\sqrt{8} \end{pmatrix}$$

avec $n = 6$, $r = 3$, $s = 2$.

Si on applique l'algorithme, on trouve les tableaux 10, 12 et 13 des vp de E , de C_1 et C_2 . La précision de 10^{-12} est atteinte avec des approximants d'ordre $k \sim 40$ au maximum.

TABLEAU XII

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	-0.00530425	188.48046020	-754.93628299	0.01870702	57.87933711	224.96106519
0.02	-0.01061417	94.11802219	-378.51012086	0.03829724	28.72960268	111.30914000
0.03	-0.01593552	62.60914524	-253.51689253	0.05970719	18.91842788	72.90773066
0.04	-0.02127412	46.81318060	-191.40437325	0.08398696	13.94043924	53.32197878
0.05	-0.02663600	37.30182967	-154.47108574	0.11237594	10.89398227	41.26492613
0.06	-0.03202739	30.93217094	-130.15907582	0.14640642	8.81123770	32.97330158
0.07	-0.03745485	26.35708730	-113.09652958	0.18805547	7.27674419	26.83209753
0.08	-0.04292531	22.90286662	-100.60947393	0.23998112	6.08192755	22.02981003
0.09	-0.04844618	20.19506129	-91.22715001	0.30591144	5.10976516	18.10835824

TABLEAU XIII

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	0.00004220	-1.99980775	-35553.57134402	13.51909010	2.85608794	4975.30546827
0.02	0.00016901	-1.99923023	-8886.95252802	13.57687518	2.88613982	1219.59742752
0.03	0.00038100	-1.99826512	-3948.76231710	13.67494089	2.93708029	524.33231016
0.04	0.00067917	-1.99690857	-2220.48479239	13.81607498	3.01027175	281.26602216
0.05	0.00106493	-1.99515512	-1420.64237386	14.00451111	3.10780149	169.06040454
0.06	0.00154014	-1.99299773	-986.27761784	14.24633164	3.23270789	108.42157967
0.07	0.00210715	-1.99042772	-724.50320167	14.55011497	3.38935892	72.17743834
0.08	0.00276887	-1.98743485	-554.75509620	14.92798687	3.58410235	48.97513448
0.09	0.00352878	-1.98400737	-438.55485791	15.39738712	3.82644772	33.38775728

3-4. La cuvette double $\lambda(x^2 - 1)^2$.

Nous traitons à présent par la même méthode le problème posé par le potentiel $\lambda(x^2 - 1)^2$. Il présente l'allure d'une cuvette double; la hauteur de la barrière entre les deux cuvettes vaut précisément λ (cf. fig. 3).

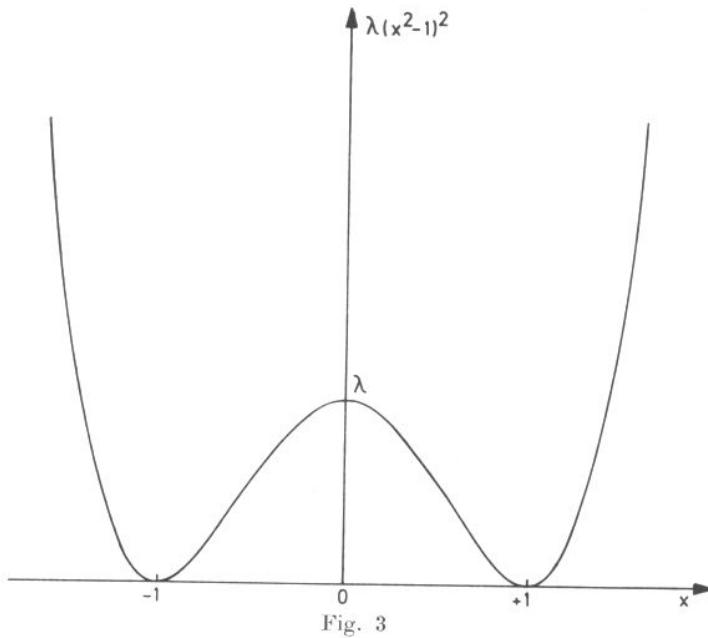


Fig. 3

L'ES s'écrit : $\psi'' + [E - \lambda(x^2 - 1)^2]\psi = 0$.

Il est indiqué de modifier cette équation par la substitution : $x = \lambda^{-1/6}z$:

$$\psi'' + [\varepsilon - z^4 + 2\lambda^{1/3}z^2]\psi = 0$$

avec $\varepsilon = (E - \lambda)/\lambda^{1/3}$ qui s'inverse en $E = \lambda + \varepsilon\lambda^{1/3}$.

Il convient d'essayer les développements suivants :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(z) \quad \text{états pairs}$$

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k + 3/2) D_{2k+1}(z) \quad \text{états impairs}$$

Les récurrences correspondantes sont décrites par les matrices X suivantes :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -32 & -24 & -8 & -1 \\ 0 & 25 + 8\lambda^{1/3} & 35 + 8\lambda^{1/3} & 18.25 + 2\lambda^{1/3} & 3 \\ 4 & -4.5 - 4\lambda^{1/3} & \varepsilon - 14.25 - 6\lambda^{1/3} & -10.25 - 2\lambda^{1/3} & -2 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$ et $E = \varepsilon\lambda^{1/3} + \lambda$.

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} -16 & -32 & -24 & -8 & -1 \\ -16 & -7 + 8\lambda^{1/3} & 11 + 8\lambda^{1/3} & 10.25 + 2\lambda^{1/3} & 2 \\ 0 & 0 & \varepsilon - 2.75 - 2\lambda^{1/3} & -3.125 - \lambda^{1/3} & -0.75 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$ et $E = \varepsilon\lambda^{1/3} + \lambda$

Appliquant l'algorithme, on trouve le tableau 14 des vp de E ainsi que le tableau 15 des vp associées de C_1 . L'ordre des approximants calculés va de 50 à 100 selon la valeur de λ et pour une précision de 10^{-12} .

TABLEAU XIV

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2	3	4.	5.
0.01	0.20336432	0.74251912	1.49885484	2.37225686	3.34065145	4.38836858
0.02	0.25147060	0.91367832	1.85660529	2.94747696	4.15896295	5.47100056
0.03	0.28500211	1.02921600	2.10066326	3.34172743	4.72161743	6.21710005
0.04	0.31179417	1.11872600	2.29111907	3.65035904	5.16306681	6.80342893
0.05	0.33460330	1.19271292	2.44942177	3.90749387	5.53149968	7.29340580
0.06	0.35475149	1.25624963	2.58597416	4.12971363	5.85036092	7.71790970
0.07	0.37298358	1.31221114	2.70669339	4.32646571	6.13302136	8.09456302
0.08	0.38976385	1.36239893	2.81529904	4.50369746	6.38790563	8.43447563
0.09	0.40540268	1.40802299	2.91429666	4.66542042	6.62070057	8.74515097
0.10	0.42011852	1.44993864	3.00546210	4.81448123	6.83544461	9.03192001
0.20	0.53890762	1.75363120	3.67111668	5.90561347	8.41197696	11.14225308
0.30	0.63336492	1.95650457	4.11914713	6.64084972	9.47792341	12.57352166
0.40	0.71702850	2.11376687	4.46701609	7.21060835	10.30520184	13.68625373
0.50	0.79447028	2.24452240	4.75595750	7.68217829	10.99026882	14.60866195
0.60	0.86781342	2.35781517	5.00571093	8.08794077	11.57968054	15.40275163
0.70	0.93822144	2.45868425	5.22737998	8.44619231	12.09981010	16.10370611
0.80	1.00640189	2.55023962	5.42787562	8.76836660	12.56717593	16.73359463
0.90	1.07281714	2.63454154	5.61181132	9.06212431	12.99286851	17.30725446
1.00	1.13778585	2.71302790	5.78242971	9.33286819	13.38472463	17.83518294
2.00	1.73916184	3.32285800	7.08758924	11.33078164	16.25246389	21.68733807
3.00	2.28838740	3.78619804	8.06486824	12.71937680	18.20728734	24.28972412
4.00	2.80191453	4.18548433	8.91189125	13.83936572	19.75304787	26.32516779
5.00	3.28516012	4.54736810	9.69412054	14.80679139	21.06365277	28.03097564
6.00	3.74105803	4.88387971	10.44098150	15.67580226	22.22126909	29.51984684
7.00	4.17179431	5.20150257	11.16773292	16.47613901	23.27161448	30.85473520
8.00	4.57929910	5.50415502	11.88287438	17.22588690	24.24288391	32.07457701
9.00	4.96539371	5.79440793	12.59127637	17.93684104	25.15375607	33.20521203
10.00	5.33182312	6.07405724	13.29571105	18.61709790	26.01727957	34.26470127
20.00	8.22720941	8.47745279	20.22205086	24.51054549	33.37392906	42.76934198
30.00	10.33824209	10.43172021	26.70420431	29.59610146	40.02568492	49.63195243
40.00	12.07277091	12.11127431	32.45991471	34.22237641	46.75803683	55.86765795
50.00	13.58422104	13.60133598	37.46917081	38.48838300	53.69059360	61.77383139
60.00	14.94388704	14.95196368	41.86877036	42.44837189	60.69317547	67.45764762
70.00	16.19116086	16.19516062	45.81387542	46.14448491	67.58150714	72.95742309
80.00	17.35056257	17.35262394	49.42190717	49.61271353	74.20199954	78.28471279
90.00	18.43865637	18.43975511	52.77214799	52.88391240	80.45717348	83.44182201
100.00	19.46729955	19.46790237	55.91769942	55.98418454	86.31024388	88.42941292

TABLEAU XV

$\lambda \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	-0.23394835	-0.41318406	1.48523740	0.20270581	1.66063302	0.44407599
0.02	-0.22968418	-0.40967524	1.55484246	0.21793128	1.67409088	0.45221809
0.03	-0.22658606	-0.40716171	1.60799441	0.22904257	1.68330433	0.45795006
0.04	-0.22405372	-0.40512922	1.65318355	0.23815720	1.69048612	0.46252307
0.05	-0.22186814	-0.40339073	1.69352807	0.24604827	1.69643430	0.46639026
0.06	-0.21992131	-0.40185424	1.73057231	0.25309714	1.70153905	0.46977387
0.07	-0.21815094	-0.40046681	1.76520974	0.25952378	1.70602385	0.47280149
0.08	-0.21651739	-0.39919480	1.79801062	0.26546818	1.71003006	0.47555397
0.09	-0.21499370	-0.39801535	1.82936414	0.27102564	1.71365342	0.47808619
0.10	-0.21356055	-0.39691212	1.85954959	0.27626439	1.71696215	0.48043731
0.20	-0.20215949	-0.38834174	2.12704366	0.31836520	1.73992403	0.49811961
0.30	-0.19346698	-0.38204337	2.37109073	0.35102100	1.75355009	0.51044463
0.40	-0.18609333	-0.37685212	2.61382830	0.37914373	1.76259432	0.52016712
0.50	-0.17952780	-0.37234155	2.86520773	0.40453906	1.76878271	0.52828930
0.60	-0.17351741	-0.36830088	3.13209272	0.42810204	1.77296562	0.53530459
0.70	-0.16791584	-0.36460834	3.42061706	0.45035119	1.77563422	0.54149728
0.80	-0.16262979	-0.36118633	3.73720386	0.47161783	1.77710211	0.54704812
0.90	-0.15759567	-0.35798196	4.08925097	0.49212869	1.77758390	0.55208019
1.00	-0.15276796	-0.35495731	4.48580132	0.51204990	1.77723416	0.55668156
2.00	-0.11101597	-0.33056259	19.19817274	0.69631862	1.74479559	0.58837208
3.00	-0.07501837	-0.31163649	12.92660449	0.87765263	1.68245275	0.60605142
4.00	-0.04164254	-0.29542616	-5.35953909	1.07192978	1.60386854	0.61618736
5.00	-0.00984790	-0.28091617	-3.53392919	1.28933506	1.51541334	0.62123288
6.00	0.02080079	-0.26760251	-2.70277054	1.54027556	1.42108946	0.62245773
7.00	0.05049993	-0.25519307	-2.22443415	1.83786863	1.32374569	0.62063960
8.00	0.07933917	-0.24350128	-1.91263413	2.20050709	1.22551926	0.61631006
9.00	0.10735924	-0.23239961	-1.69302749	2.65589809	1.12804094	0.60986194
10.00	0.13457994	-0.22179636	-1.52996669	3.24861207	1.03255124	0.60160279
20.00	0.36655415	-0.13328484	-0.91277920	-8.68968749	0.29637106	0.46114955
30.00	0.54273640	-0.06339182	-0.74205453	-3.00347384	-0.05923543	0.29118981
40.00	0.68458318	-0.00432051	-0.65474851	-2.11721571	-0.20414287	0.14342387
50.00	0.80446246	0.04734616	-0.59055241	-1.74625828	-0.25241751	0.03093386
60.00	0.90919257	0.09355225	-0.53262318	-1.53561949	-0.25634365	-0.04897816
70.00	1.00280698	0.13553846	-0.47646141	-1.39509040	-0.23788313	-0.10325441
80.00	1.08787343	0.17415206	-0.42131705	-1.29133668	-0.20649709	-0.13861141
90.00	1.16612884	0.20999966	-0.36733925	-1.20929539	-0.16703066	-0.16036305
100.00	1.23880641	0.24353154	-0.31475890	-1.14122205	-0.12270945	-0.17241630

La figure 4 présente les courbes caractéristiques des vp de E.

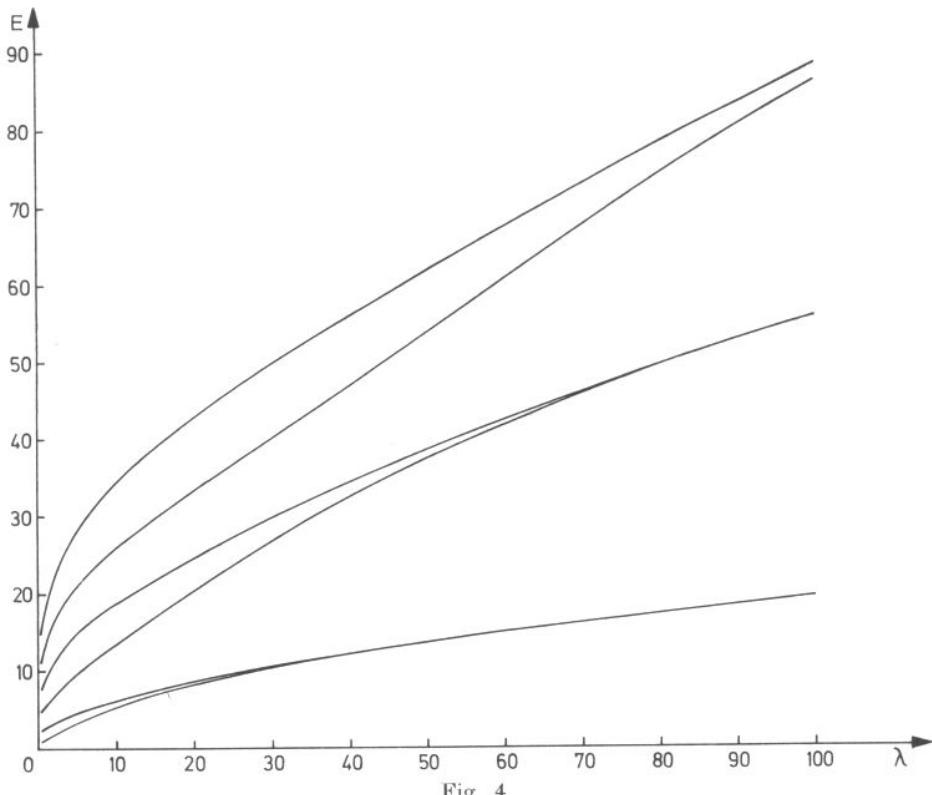


Fig. 4

3-4-1. Commentaires.

Nous avons traité en détail ce problème car il offre une particularité intéressante. Il est connu en théorie quantique qu'une cuvette double du type envisagé ici donne lieu à un spectre énergétique formé de doublets. Les doublets sont d'autant plus resserrés que la barrière qui sépare les cuvettes est haute. Ce phénomène est apparent sur la figure 4 : les courbes caractéristiques se resserrent deux à deux dès que λ augmente.

Par ailleurs il est possible de calculer approximativement l'écartement de ces doublets en utilisant les méthodes approchées de la mécanique quantique : c'est d'ailleurs un problème classique [12]. Il est dès lors intéressant de comparer la pré-diction théorique approchée avec la valeur exacte que l'on peut déduire du tableau 14.

si $\lambda = 10$, on trouve $\Delta E \sim 0.7106$ pour le doublet fondamental
(valeur exacte = 0.74223412)

si $\lambda = 100$, on trouve $\Delta E \sim 556 \cdot 10^{-6}$ pour le doublet fondamental
(valeur exacte = 0.00060282)

on trouve $\Delta E \sim 6.45 \cdot 10^{-2}$ pour le doublet suivant
(valeur exacte = $6.6485 \cdot 10^{-2}$)

on trouve $\Delta E \sim 2.169$ pour le troisième doublet
(valeur exacte = 2.119)

On constate un accord dans l'ordre des pourcents.

3-5. Le potentiel $A \operatorname{sh}^2 x$ ($A > 0$).

Le potentiel $A \operatorname{sh}^2 x$ présente certaines particularités qui le rendent intéressant. Jusqu'à présent toutes les récurrences obtenues étaient de deux types vis-à-vis de l'algorithme :

- ou bien l'algorithme diverge ou, en tous cas, ne semble pas converger en un temps raisonnable,
- ou bien l'algorithme converge et alors il converge vers les vp de l'ES.

Il n'est pas encore arrivé que l'algorithme converge vers des vp différentes de celles de Schrödinger. Cela est cependant possible lorsque le développement choisi pour ψ n'est pas un développement en série de fonctions orthogonales. Le potentiel $A \operatorname{sh}^2 x$ va nous en fournir un exemple. L'ES s'écrit :

$$\psi'' + (E - A \operatorname{sh}^2 x) \psi = 0 \quad (17)$$

A condition de poser : $E = -a + 2q$ et $A = -4q$, cette équation peut être réécrite un peu différemment :

$$\psi'' - (a - 2q \operatorname{ch} 2x) \psi = 0 \quad (18)$$

où l'on reconnaît l'équation modifiée de Mathieu. Cependant, dans la théorie classique de l'équation (18) de Mathieu, on ne s'intéresse pas aux solutions à carré intégrable mais plutôt aux solutions périodiques de période $i\pi$ ou $2i\pi$, en sorte que le spectre des vp trouvées par Mathieu diffère évidemment complètement du spectre que nous cherchons.

L'équation (17) possède donc deux spectres distincts correspondants à deux types de solutions différentes intéressant des domaines distincts de la physique. C'est un fait digne d'intérêt que la méthode du déterminant de Hill permette de construire ces deux spectres via deux approches différentes.

3-5-1. 1ère a p p r o c h e : recherche des solutions périodiques; on essaie un développement trigonométrique; par exemple

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k \operatorname{sh}(2k+2)x \quad (\text{solution impaire de période } i\pi)$$

On trouve pour la récurrence entre les C_k , la matrice X suivante :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 \\ 0 & 8 & 0 \\ -A/4 & E+4+A/2 & -A/4 \end{pmatrix} \text{ avec } n = 2, r = 2, s = 0$$

On obtient les autres solutions (paire ou impaires de période $i\pi$ ou $2i\pi$) en cherchant la solution ψ sous les formes :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k \begin{pmatrix} \operatorname{sh} \\ \operatorname{ch} \end{pmatrix} (2k+p)x \quad \text{où } p = 0,1$$

Nous n'insistons pas davantage sur ce point car le calcul des récurrences auxquelles obéissent les C_k dans chaque cas figure dans tous les ouvrages traitant de l'équation de Mathieu.

L'algorithme s'applique à ces récurrences et la convergence est extrêmement rapide : la précision de 10^{-12} est atteinte pour des approximants d'ordre moindre que 15. Les vp de E que l'on trouve sont toutes négatives ou nulles. Les premières courbes caractéristiques sont reportées en traits interrompus sur la figure 5 : elles correspondent aux vp classiques $a = a_0, a_1, b_1$ et b_2 de l'équation de Mathieu ramenées à la forme (18), dont elles se déduisent par l'opération déjà mentionnée $E = -a - A/2$.

On peut également retrouver ces spectres de vp en partant de développements besséliens du type :

$$\psi = \sum_0^{\infty} C_k K_k (\sqrt{A} \operatorname{ch} x)$$

Les récurrences entre C_k sont les mêmes que celles de l'approche trigonométrique. Nous n'insistons pas davantage sur ces questions classiques.

3-5-2. 2ème approche : recherche approchée des solutions à carré intégrable.

Ici nous envisageons l'équation (17) comme ES. Le potentiel $A \operatorname{sh}^2 x$ présente l'allure d'une cuvette infinie ; on s'attend donc à ce que le spectre des vp de E soit positif et discret. Lorsque A est suffisamment grand, on peut se faire une idée de l'allure du spectre des vp de la manière suivante : on pose $x = u/A^{1/2}$. Avec cette nouvelle variable, l'équation (17) se réécrit :

$$\psi'' + [E/A - \operatorname{sh}^2(u/A^{1/2})] \psi = 0$$

Développons le crochet en série de puissances de u ; on trouve :

$$\psi'' + [E/A - u^2/A - u^4/(3A^2) - 2u^6/(45A^3) - u^8/(315A^4) \dots] \psi = 0 \quad (19)$$

Cherchons la solution de cette équation sous la forme :

$$\psi = \exp(-u^2/\sqrt{4A}) \sum_0^{\infty} C_k u^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \exp(-u^2/\sqrt{4A}) \sum_0^{\infty} C_k u^{2k+1} \quad (\text{états impairs})$$

On trouve les récurrences suivantes de longueur infinie :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 6 & -4/\sqrt{A} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 2 & \varepsilon - 1/\sqrt{A} & 0 & -1/(3A^2) & -2/(45A^3) & -1/(315A^4) & \dots \end{pmatrix}$$

avec $n = \infty$, $r = 2$, $s = 0$ et $E = A\varepsilon + \sqrt{A}$.

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 10 & -4/\sqrt{A} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 6 & \varepsilon - 3/\sqrt{A} & 0 & -1/(3A^2) & -2/(45A^3) & -1/(315A^4) & \dots \end{pmatrix}$$

avec $n = \infty$, $r = 2$, $s = 0$ et $E = A\varepsilon + \sqrt{A}$.

Lorsque A est suffisamment grand, il est possible de tronquer la récurrence infinie sans altérer fortement l'exactitude du résultat. A la limite, l'équation (19) montre que les valeurs E/A doivent coïncider avec les vp de l'oscillateur harmonique en u^2/A . On a donc à la limite pour A très grand :

$$E \sim (2N + 1)\sqrt{A}$$

Par exemple, supposons que A = 10. On verra plus loin que l'état fondamental situe E à la valeur exacte :

$$E = 3.39604717$$

On comparera tout d'abord cette valeur à $\sqrt{10} = 3.162277660$.

Si on applique l'algorithme à la matrice X des états pairs en tronquant la récurrence à $n = 3$, on trouve une valeur déjà meilleure :

$$E = 3.378576275$$

L'approximation est encore meilleure si on tronque à $n = 4$:

$$E = 3.394994658$$

Elle est correcte à 10^{-5} si l'on tronque à $n = 5$:

$$E = 3.395996681$$

etc. ...

Autre exemple : A = 1. Opérant de même, on trouve la suite de valeurs approchées : E ~ 1, 1.178113466, 1.207009939, 1.210936549, ... qui se rapproche déjà très fort de la valeur exacte 1.21141098 sans qu'on puisse prétendre que A ait une valeur très grande. Ce point est digne d'intérêt car il trouve une application immédiate pour les classes de potentiels qui n'autorisent pas de transcription algébrique pour les coefficients de l'ES. Nous reviendrons sur ce point au § 3-8.

3-5-3. 3ème approche : recherche exacte des solutions à carré intégrable : il est possible de résoudre le problème proposé pour l'ES (17) en partant du développement suivant :

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_0^{\infty} C_k/k! D_{2k}(\sqrt{2\sqrt{A}} \operatorname{sh} x) \quad (\text{états pairs}) \\ \psi &= \sum_0^{\infty} C_k/\Gamma(k + 3/2) D_{2k+1}(\sqrt{2\sqrt{A}} \operatorname{sh} x) \quad (\text{états impairs})\end{aligned}$$

Les matrices X associées aux récurrences s'écrivent :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -2 & 0 & 0.25 \\ 0 & -2 & 3-4\sqrt{A} & 0.5 & -0.75 \\ -1 & 1 & E-1.25+3\sqrt{A} & -0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -2 & 0 & 0.25 \\ 4 & -2 & 1-4\sqrt{A} & 0.5 & -0.5 \\ 0 & 0 & E-0.25+\sqrt{A} & -0.25 & 0.1875 \end{pmatrix}$$

avec $n = 4$, $r = 2$, $s = 1$.

TABLEAU XVI

A \ N	0.	1.	2.	3.	4.	5.
100.00	10.24417323	31.19975690	53.06273407	75.78365416	99.32126540	123.64047022
90.00	9.73071275	29.65782990	50.48821916	72.17073165	94.66300291	117.92919048
80.00	9.18780739	28.02731185	47.76530820	68.34872497	89.73396492	111.88437715
70.00	8.60972374	26.29092066	44.86496574	64.27658184	84.48079316	105.44006717
60.00	7.98858451	24.42489951	41.74724631	59.89777465	78.82995020	98.50527402
50.00	7.31304368	22.39500806	38.35451938	55.13066021	72.67511057	90.94830784
40.00	6.56567658	20.14861604	34.59808644	49.84940660	65.85217769	82.56566549
30.00	5.71712445	17.59693918	30.32805014	43.84096301	58.08281382	73.01159222
20.00	4.71005907	14.56628675	25.25037628	36.68627412	48.81814961	61.60268474
10.00	3.39604717	10.60537917	18.59744678	27.28622473	36.61249237	46.53210032
9.00	3.23304408	10.11320273	17.76872053	26.11225221	35.08426651	44.64064074
8.00	3.06062902	9.59232558	16.89098742	24.86786742	33.46315305	42.63279699
7.00	2.87695773	9.03707916	15.95446932	23.53889165	31.73029887	40.48478550
6.00	2.67949204	8.43964717	14.94565219	22.10569058	29.85955454	38.16357384
5.00	2.46456843	7.78872151	13.84493049	20.53971391	27.81282440	35.62096345
4.00	2.22654517	7.06683704	12.62191997	18.79659117	25.53076952	32.78173894
3.00	1.95588075	6.24434185	11.22480703	16.80039153	22.91155793	29.51652517
2.00	1.63383824	5.26268899	9.55066259	14.39956205	19.75118251	25.56535255
1.00	1.21141098	3.96736058	7.32519190	11.18729180	15.49895292	20.22330104
0.90	1.15873518	3.80495212	7.04433488	10.77965401	14.95683615	19.53954661
0.80	1.10292637	3.63260339	6.74572049	10.34556270	14.37878970	18.80967731
0.70	1.04335710	3.44828978	6.42566969	9.87947034	13.75720986	18.02386346
0.60	0.97915950	3.24920127	6.07905925	9.37363426	13.08146634	17.16834476
0.50	0.90907331	3.03124090	5.69839090	8.81669295	12.33593045	16.22286043
0.40	0.83114309	2.78802129	5.27192100	8.19079791	11.49599499	15.15545416
0.30	0.74202926	2.50856847	4.77936015	7.46499759	10.51887171	13.91044076
0.20	0.63508378	2.17086439	4.17970245	6.57643669	9.31736324	12.37403140
0.10	0.49253072	1.71533759	3.36080484	5.35200773	7.65009579	10.22999617
0.09	0.47449741	1.65714291	3.25514824	5.19290817	7.43228597	9.94869580
0.08	0.45531062	1.59505588	3.14211830	5.02237999	7.19849263	9.64640588
0.07	0.43472988	1.52824958	3.02012207	4.83792732	6.94519811	9.31847947
0.06	0.41241990	1.45556706	2.88692414	4.63604090	6.66744947	8.95836653
0.05	0.38788918	1.37530585	2.73922386	4.41152764	6.35790560	8.55634685
0.04	0.36036653	1.28478260	2.57179822	4.15614866	6.00489816	8.09694848
0.03	0.32851640	1.17932521	2.37550980	3.85544548	5.58790443	7.55291201
0.02	0.28963077	1.04939565	2.13159180	3.47960452	5.06448555	6.86774385
0.01	0.23626551	0.86851927	1.78750209	2.94467537	4.31464673	5.88120224

L'algorithme s'applique; ici on commence le calcul par les grandes valeurs du paramètre A car, dans ce cas, la valeur d'essai de E vaut $(2N + 1)\sqrt{A}$. On a reporté les résultats sur les tableaux 16 (pour E) et 17 (pour C_1). Pour obtenir la précision de 10^{-12} il y a lieu de calculer les approximants du déterminant de Hill jusqu'à l'ordre 650 environ (lorsque $A = 0.01$). Lorsque A est grand ($A = 100$ par exemple), l'ordre 15 suffit.

TABLEAU XVII

$A \setminus N$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
100.00	0.01129049	0.01592528	45.57317630	24.65504127	-1.70443699	-0.81811281
90.00	0.01184200	0.01665754	43.50206574	23.61445920	-1.69288568	-0.81136330
80.00	0.01248720	0.01750944	41.31047392	22.51290194	-1.67962189	-0.80364041
70.00	0.01325667	0.01851834	38.97464043	21.33827579	-1.66414207	-0.79466316
60.00	0.01419727	0.01974318	36.46181213	20.07388723	-1.64569674	-0.78401521
50.00	0.01538553	0.02127526	33.72461856	18.69555339	-1.62310430	-0.77104353
40.00	0.01695752	0.02327777	30.68992325	17.16586173	-1.59435080	-0.75464160
30.00	0.01918714	0.02607241	27.23360757	15.42115195	-1.55559470	-0.73271331
20.00	0.02274666	0.03042931	23.11071443	13.33532158	-1.49806881	-0.70051528
10.00	0.03006820	0.03902321	17.67504905	10.57373308	-1.39347888	-0.64290864
9.00	0.03132635	0.04045422	16.99395455	10.22638826	-1.37706464	-0.63396342
8.00	0.03277985	0.04209176	16.27128429	9.85742859	-1.35859772	-0.62392710
7.00	0.03448831	0.04399568	15.49857060	9.46240528	-1.33753407	-0.61251339
6.00	0.03654143	0.04625479	14.66405885	9.03513009	-1.31308272	-0.59930659
5.00	0.03908245	0.04900867	13.75060643	8.56655707	-1.28402914	-0.58366920
4.00	0.04235942	0.05249445	12.73147650	8.04253857	-1.24836499	-0.56454813
3.00	0.04685518	0.05716287	11.56070566	7.43867169	-1.20239345	-0.54000622
2.00	0.05370303	0.06403915	10.14598146	6.70573524	-1.13803932	-0.50581137
1.00	0.06672924	0.07642285	8.23705927	5.70947773	-1.03074339	-0.44906283
0.90	0.06884549	0.07835652	7.99304743	5.58138192	-1.01485944	-0.44067545
0.80	0.07125091	0.08052975	7.73265419	5.44446941	-0.99726047	-0.43138320
0.70	0.07402691	0.08300608	7.45238484	5.29684235	-0.97752033	-0.42095969
0.60	0.07729361	0.08587800	7.14734487	5.13583887	-0.95502637	-0.40907871
0.50	0.08123862	0.08928771	6.81032303	4.95753084	-0.92884935	-0.39524415
0.40	0.08617855	0.09347083	6.42993552	4.75570616	-0.89747297	-0.37864363
0.30	0.09271088	0.09886213	5.98632132	4.51950459	-0.85814715	-0.35779714
0.20	0.10218385	0.10641490	5.43881953	4.22663848	-0.80496523	-0.32950578
0.10	0.11890127	0.11904600	4.67404337	3.81476736	-0.72032684	-0.28414072
0.09	0.12148119	0.12092185	4.57357008	3.76039761	-0.70815969	-0.27757573
0.08	0.12437300	0.12300239	4.46554757	3.70187262	-0.69477473	-0.27033894
0.07	0.12765917	0.12533889	4.34829356	3.63826316	-0.67987538	-0.26226431
0.06	0.13145984	0.12800517	4.21943307	3.56825687	-0.66303636	-0.25311293
0.05	0.13595997	0.13111342	4.07543505	3.48990186	-0.64361423	-0.24252198
0.04	0.14146661	0.13484702	3.91066604	3.40008300	-0.62056163	-0.22989827
0.03	0.14854840	0.13953933	3.71517119	3.29329402	-0.59198342	-0.21416262
0.02	0.15845922	0.14590798	3.46823508	3.15807511	-0.55381754	-0.19298576
0.01	0.17507899	0.15609679	3.11071173	2.96171548	-0.49397317	-0.15936420

La figure 5 présente dans la région $E > 0$ les courbes de vp de E .

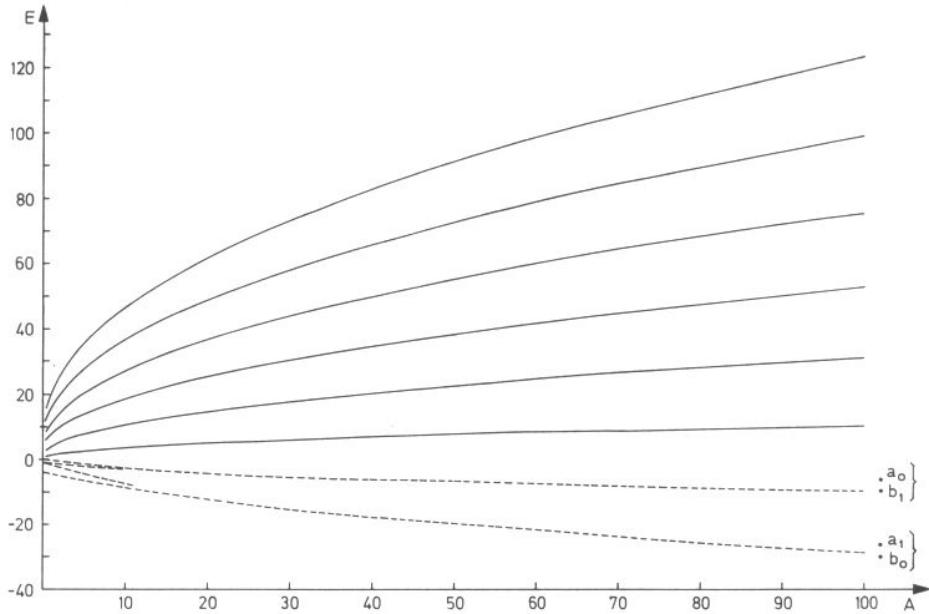


Fig. 5

3-5-4. Commentaires.

La conclusion principale imposée par l'étude des solutions de l'équation (17) est la suivante : lorsqu'on essaie pour ψ un développement en série de l'un ou l'autre type que l'on introduit dans l'ES en vue d'appliquer la méthode du déterminant de Hill, il n'est nullement certain que l'on va construire des solutions à carré intégrable. Cela n'est vrai que si le développement en question est du type de Fourier-Hilbert. L'exemple du potentiel $A \sin^2 x$ illustre ce point déjà évoqué au § 1-2 : en effet, si on utilise un développement trigonométrique ou bessélien, on construit des fonctions périodiques tandis que si on utilise un développement de Weber-Hermite, on construit des solutions à carré intégrable. Finalement, les développements en série qui ne sont pas du type de Fourier-Hilbert peuvent mener à des solutions à carré intégrable (cas des oscillateurs anharmoniques) ou au contraire mener à des solutions d'un tout autre type. Une certaine prudence s'impose dès lors en cette matière tant qu'elle n'aura pas fait l'objet d'une étude théorique rigoureuse.

3-6. Les potentiels centraux.

Lorsque le potentiel est central, l'ES écrite en coordonnées sphériques autorise la séparation des variables radiale et angulaire. L'équation radiale qui seule nous intéresse ici s'écrit :

$$R'' + (2/r)R' - l(l+1)/r^2 R + [E - V(r)] R = 0 \quad (20)$$

Cette équation peut aussi s'écrire en posant $R = S/r$:

$$S'' + [E - V - l(l+1)/r^2] S = 0$$

analogue à l'ES unidimensionnelle où le terme $l(l+1)/r^2$ représente le potentiel centrifuge. Pour rappel, $l = 0, 1, 2, \dots$ (états s, p, d, \dots).

La condition aux limites est : $r^2 |R|^2$ à carré intégrable (ou $|S|^2$).

L'équation (20) admet des solutions exactes lorsque $V = -1/r$ et lorsque $V = r^2$. Le premier cas a déjà été évoqué au § 3. Le deuxième n'est autre que l'oscillateur harmonique tridimensionnel dont les états propres sont décrits par :

$$\text{les vp : } E = 4k + 2l + 3 \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\text{les fonctions propres : } R = r^l e^{-r^2/2} F(-k; l + 3/2; r^2).$$

Sauf le cas banal où on ajoute un terme en $1/r^2$ à ces potentiels exacts (ce qui a pour seul effet de modifier le terme centrifuge), les autres potentiels ne sont généralement pas exacts. Pour ceux-ci, à cause de la différence entre les comportements asymptotiques, il y a lieu de distinguer deux cas :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = \infty \quad \text{et} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = 0$$

3-6-1. 1er cas : $\lim V = \infty$: oscillateurs tridimensionnels.

Nous choisirons l'exemple de l'oscillateur tridimensionnel r^4 . L'ES radiale s'écrit :

$$r^2 R'' + 2r R' - l(l+1)R + (E - r^4)r^2 R = 0$$

Pour les potentiels de ce type, il est indiqué de développer la solution en terme de fonctions propres de l'oscillateur r^2 :

$$R = r^l \exp(-r^2/2) \sum_0^{\infty} C_k F(-k; l + 3/2; r^2)$$

On obtient la récurrence symbolisée par la matrice X suivante :

$$X = \begin{pmatrix} -1 & 4 & -6 & 4 & -1 \\ -1 & 2l & 1-6l & 6l-6 & -2l+2 \\ 0 & 0 & E-l^2+l-1/4 & (l-2)(2l-1) & -(l-3/2)(l-1/2) \end{pmatrix}$$

avec $n = 4, r = 2, s = 1$.

Il y a lieu d'étudier séparément les cas $l = 0, 1, 2, \dots$ (états s, p, d, \dots). Appliquant l'algorithme, on trouve sans peine les vp de E . Dans le tableau 18, on a repris ces vp dans l'ordre croissant. On constate qu'elles s'ordonnent par valeurs croissantes selon le schéma :

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 3s, 1h, 2f, 3p, \dots$$

Le même tableau peut être obtenu en cherchant la solution R sous la forme :

$R = r^l \exp(-r^2/2) \sum_0^{\infty} C_k r^{2k}$. Dans ce dernier cas, la précision de 10^{-12} est atteinte avec des approximants de l'ordre de $k \sim 150-250$ selon les états. Il est intéressant de remarquer que dans le cas $l = 0$, on retrouve la liste des états impairs de l'oscillateur unidimensionnel x^4 . La disparition des états pairs peut surprendre dans la mesure où il a été vu au § 3-6 que l'équation différentielle satisfait par R/r est identique à l'ES de l'oscillateur linéaire x^4 . L'explication est que les domaines des variables x

et r sont différents. La notion de fonction radiale paire ou impaire n'a d'ailleurs pas de sens puisque l'opération $r \rightarrow -r$ en est également dépourvue.

TABLEAU XVIII
vp de E pour l'oscillateur tridimensionnel r⁴

l	E	État
0	3.7996730298	1s
0	11.644745511	2s
0	21.238372918	3s
0	32.098597711	4s
	
1	7.1084441678	1p
1	16.032662396	2p
1	26.350096912	3p
1	37.774140534	4p
	
2	10.842438000	1d
2	20.643456915	2d
2	31.614636520	3d
	
3	14.923411521	1f
3	25.471744206	2f
3	37.036405149	3f
	
4	19.301236667	1g
4	30.506007474	2g
	
5	23.940622098	1h
	

3-6-2. 2ème cas : $\lim V = 0$: potentiel coulombien modifié.

La procédure la plus logique serait celle où on chercherait la solution R sous la forme d'un développement en série des fonctions propres du potentiel coulombien, c'est-à-dire :

$$R = \sum_0^{\infty} C_k r^k \exp \left[-\frac{r}{2(k+l+1)} \right] F \left(-k; 2l+2; \frac{r}{k+l+1} \right)$$

Toutefois, les calculs menant à la récurrence sur les C_k ne seraient pas commodes à cause de la présence répétée de l'indice k dans cette expression. Il est plus simple de poser d'emblée dans (20) le comportement asymptotique exact de la solution :

$$R = r^l \exp(-\sqrt{-E} r) f$$

On trouve :

$$r f'' + (2l+2 - 2\sqrt{-E} r) f' - [(2l+2) \sqrt{-E} + rV(r)] f = 0 \quad (21)$$

3-6-2-1. Le potentiel coulombien tronqué.

Il s'agit du potentiel $V = -1/(r + A)$ (avec $A > 0$) — cf. fig. 6.

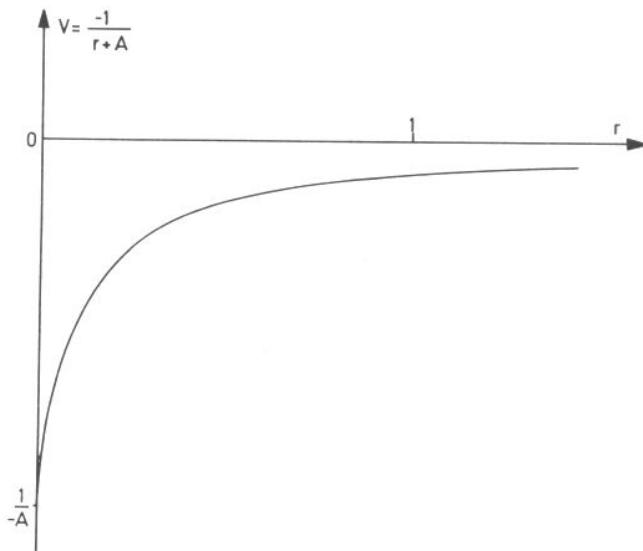


Fig. 6

Ce potentiel présente l'allure d'une cuvette de profondeur finie. Lorsque A tend vers zéro, on retombe sur le potentiel coulombien. Le nombre d'états quantifiés discrets est fini : ces états quantifiés discrets sont évidemment à énergie négative.

L'ES est identique à (21) avec $V = -1/(r + A)$. On utilise le développement :

$$f = \sum_0^{\infty} C_k F(-k; 2l + 2; 2\sqrt{-E} r)$$

On trouve pour la récurrence :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ l+3-0.5/\sqrt{-E} & -4l-4-2A\sqrt{-E}+1/\sqrt{-E} & 3l+1-0.5/\sqrt{-E} \\ l+2-0.5/\sqrt{-E} & -2(l+1)(l+1+A\sqrt{-E}-0.5/\sqrt{-E}) & (2l+1)(l-0.5/\sqrt{-E}) \end{pmatrix}$$

avec $n = 2$, $r = 2$, $s = 0$.

La structure en A et en E des coefficients de la récurrence est nettement moins simple que lors des problèmes précédents. L'algorithme s'applique néanmoins. Dans le cas particulier où $l = 0$, la matrice X se simplifie car la récurrence est divisible par $k + 1$. On trouve :

$$X(l=0) = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2-0.5/\sqrt{-E} & -2-2A\sqrt{-E}+1/\sqrt{-E} & -0.5/\sqrt{-E} \end{pmatrix}$$

avec $n = 2$, $r = 1$, $s = 0$.

Il semble toutefois que l'algorithme soulève des difficultés d'ordre numérique lorsqu'on recherche une précision élevée. Il ne nous est pas possible d'approfondir ce point car cela nous entraînerait trop loin. En outre, le choix des valeurs d'essai doit être assez précis sinon l'algorithme diverge. Cela est dû au fait que les divers niveaux énergétiques sont concentrés dans l'intervalle ($-0.25, 0$) et qu'ils se resserrent très rapidement quand N augmente.

TABLEAU XIX

Le tableau XIX présente quelques résultats numériques dans le cas $l = 0$ (vp de E).

$A \setminus N$	1	2	3	4
0.005	— 0.247587	— 0.06219	— 0.02768	— 0.01558
0.01	— 0.245307	— 0.06190	— 0.02760	— 0.01554
0.02	— 0.24105	— 0.0613	— 0.0274	— 0.0154
0.05	— 0.2300	— 0.0599	— 0.0270	— 0.0153
0.1	— 0.2153	— 0.0579	— 0.0264	

3-6-2-2. Le potentiel $-1/(r + Ar^2)$.

Ce potentiel a été étudié par Kerner [5] par la méthode du déterminant de Hill dans le but de l'appliquer au modèle atomique d'Hartree et Fermi-Thomas. Toutefois, vu l'absence de moyens de calcul, cet auteur s'est borné à une étude assez fragmentaire.

L'équation (21) s'écrit dans ce cas :

$$r(1+Ar)f'' + (1+Ar)(2l+2 - 2\sqrt{-E}r)f' + [1 - 2\sqrt{-E}(l+1)(1+Ar)]f = 0$$

On utilise à nouveau le développement :

$$f = \sum_0^{\infty} C_k F(-k; 2l+2; 2\sqrt{-E}r)$$

D'où la récurrence représentée par sa matrice X :

$$X = \begin{pmatrix} -1/2 & 1 & -1/2 \\ -(l+3)/2 & \varepsilon + 2l + 2 & -(3l+1)/2 \\ -(l+2)/2 & (l+1)^2 + \varepsilon(l+1) - \lambda/2 & -l(2l+1)/2 \end{pmatrix}$$

avec $n = 2$, $r = 2$, $s = 0$ et $\varepsilon = \sqrt{-E}/A$ et $\lambda = 1/A$.

Kerner a calculé une formule approchée pour les vp de ε lorsque A est petit :

$$\varepsilon \sim \frac{1}{2NA} - N + \frac{A}{2} \left[\frac{(N+l+1)(N-l)(N+1)}{1/N + (2N+2)A} - \frac{(N-l-1)(N+l)(N-1)}{1/N + (2N-2)A} \right]$$

dont on peut se servir pour évaluer les valeurs d'essai à introduire dans l'algorithme. Les calculs numériques sont très rapides car l'ordre des approximants requis ne dépasse pas par les dizaines pour une précision de 10^{-8} dans les résultats. La seule difficulté réside à nouveau dans le choix des valeurs d'essai qui doit être assez proche

de la valeur finale sinon l'algorithme diverge. Le tableau 20 présente quelques résultats numériques dans le cas $l = 0$ (vp de E).

TABLEAU XX

A \ N	1	2	3	4	5
0.005	-0.2450735	-0.0577808	-0.0233659	-0.0115806	-0.0063478
0.01	-0.2402887	-0.0535577	-0.0198740	-0.0088331	-0.0042661
0.02	-0.2311140	-0.0463039	-0.0147120	-0.0054144	
0.05	-0.2063268	-0.0309811			
0.1	-0.1721658				

3-7. L'équation de Legendre modifiée.

Il est connu que pour résoudre complètement le problème posé par un potentiel central, il faut résoudre préalablement à l'équation radiale une équation angulaire en θ qui est l'équation de Legendre :

$$T'' + \cotg \theta T' + (E - m^2/\sin^2 \theta) T = 0 \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$$

Les solutions à carré intégrable sont les fonctions associées de Legendre :

$$T = P_l^m(\cos \theta)$$

les vp de E sont : $l(l+1)$ ($l = |m|, |m|+1, |m|+2, \dots$)

Lorsque le potentiel n'est pas central mais contient un terme en θ sous la forme :

$$V(r, \theta) = v(r) + \frac{1}{r^2} h(\theta)$$

l'équation en θ se complète de la manière suivante :

$$T'' + \cotg \theta T' + [E - h(\theta) - m^2/\sin^2 \theta] T = 0 \quad (22)$$

Nous avons présenté ailleurs [1] les cas de solubilité exacte de (22). Ici nous étudions deux cas importants de solubilité approchée.

3-7-1. L'équation sphéroïdale.

Lorsque $h(\theta) = A \cos^2 \theta$, l'équation (22) coïncide avec l'équation sphéroïdale [4]. Cette équation dont les états propres sont connus a précisément été résolue comme l'équation de Mathieu (à laquelle elle est d'ailleurs apparentée) par la méthode des fractions continues évoquée au § I-1. Il est évident qu'on peut aussi traiter le problème par la méthode du déterminant de Hill. L'équation (22) s'écrit dans ce cas :

$$T'' + \cotg \theta T' + (E - A \cos^2 \theta - m^2/\sin^2 \theta) T = 0$$

Il est indiqué de changer de variable et de poser :

$$x = \cos \theta$$

$$T = (1 - x^2)^{|m|/2} \sum_0^{\infty} C_k x^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

$$T = (1 - x^2)^{|m|/2} \sum_0^{\infty} C_k x^{2k+1} \quad (\text{états impairs})$$

On en déduit les récurrences suivantes :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & -4 & 0 \\ 6 & -4|m| - 2 & 0 \\ 2 & E - |m|^2 - |m| & -A \end{pmatrix} \text{ avec } n = 2, r = 2, s = 0$$

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & -4 & 0 \\ 10 & -4|m| - 6 & 0 \\ 6 & E - |m|^2 - 3|m| - 2 & -A \end{pmatrix} \text{ avec } n = 2, r = 2, s = 0$$

On peut appliquer l'algorithme en partant des valeurs d'essai $(k + |m|)(k + |m| + 1)$ lorsque A est très petit ($k = 0, 1, 2, \dots$). Pratiquement, le calcul est extrêmement rapide ; nous ne reproduisons pas les résultats car ils sont connus depuis longtemps.

3-7-2. Le potentiel dipolaire.

Considérons encore le cas $h(\theta) = -A \cos \theta$. Il correspond à un potentiel $-A \cos \theta/r^2$ créé par un dipôle électrique de moment A . Lorsque A est nul, il est clair que les vp de E doivent à nouveau valoir $l(l+1)$. Lorsque A est petit, il est possible de trouver par voie perturbative une formule approchée pour E ; on trouve en première approximation :

$$E \sim l(l+1) + A^2 \frac{l(l+1) - 3m^2}{l(2l-1)(2l+2)(2l+3)}$$

Il est possible de traiter ce problème par la méthode du déterminant de Hill.

L'équation (22) s'écrit :

$$T'' + \cot \theta T' + [E + A \cos \theta - m^2/\sin^2 \theta] T = 0$$

3-7-2-1. 1ère approche : on essaie le développement :

$$T = (1 - x^2)^{|m|/2} \sum_0^{\infty} C_k \left(\frac{1-x}{2} \right)^k$$

avec $x = \cos \theta$.

La récurrence se note :

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ |m| + 2 & -2|m| - 1 & 0 \\ |m| + 1 & E + A - |m|^2 - |m| & -2A \end{pmatrix} \text{ avec } n = 2, r = 2, s = 0$$

L'algorithme s'applique. Le choix des valeurs d'essai s'effectue en tenant compte de ce que lorsque A est petit, les vp de E ne sont pas très éloignées des valeurs :

$$(k + |m|)(k + |m| + 1) \text{ avec } k = 0, 1, 2, \dots$$

Les tableaux 21, 22 et 23 présentent les vp de E pour les trois cas les plus simples $|m| = 0, 1, 2$. Les courbes caractéristiques sont reproduites sur la figure 7.

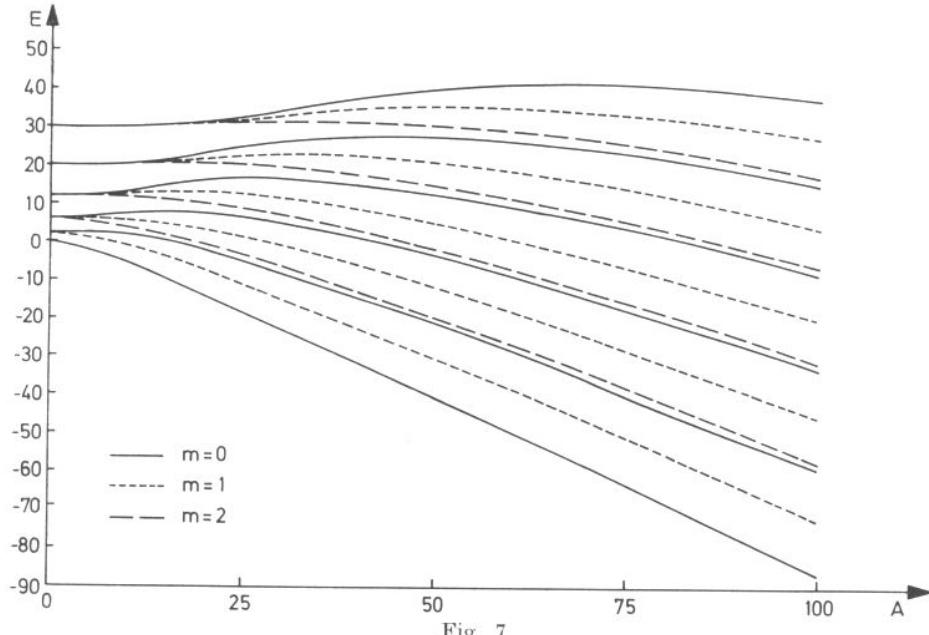


Fig. 7

3-7-2-2. 2ème approche : il existe une autre approche nettement plus avantageuse au point de vue temps de calcul. Elle consiste à partir du développement :

$$T = \sum_0^{\infty} C_k (k + |m| + 1/2) P_{k+|m|}^{[m]}(\cos \theta) \quad (23)$$

Il y correspond la récurrence suivante :

$$X = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & E - 3|m|^2 - 3|m| - 1/2 & A/2 \\ A(|m| + 1/2) & E(|m| + 1/2) - |m|(|m| + 1)(|m| + 1/2) & 0 \end{pmatrix}$$

avec $n = 2$, $r = 3$, $s = 0$.

L'algorithme s'applique à nouveau et fournit un spectre de vp identique à celui de la 1^{ère} approche. Le temps de calcul est très court car des approximants d'ordre 25 suffisent en général pour obtenir une précision de 10^{-12} .

Il convient également de noter que le développement (23) correspond à celui que l'on écrirait en étudiant le problème par voie perturbative. La solution exacte du problème de perturbation est donc immédiate par cette méthode : il suffit de calculer les C_k par la récurrence en partant de $C_0 = 1$.

3-8. Récurrence de longueur infinie.

Nous reprenons ici le cas des potentiels qui ne permettent pas d'algébriser les coefficients de l'ES. Ce problème a déjà été évoqué au § 3-5-2. Il est facile de voir

que ce problème est équivalent à celui posé par des récurrences de longueur infinie ($n = \infty$). On peut tenter de résoudre ces problèmes par la méthode présentée dans cet ouvrage à condition que les coefficients de C_{k-n} dans la récurrence (2) tendent rapidement vers zéro lorsque n croît. On approxime alors la solution en tronquant la récurrence et en estimant la convergence lorsque la troncature est effectuée un rang plus loin.

TABLEAU XXI

$A \setminus l$	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	—0.00001667	2.00001000	6.00000238	12.00000111	20.00000065	30.00000043
0.02	—0.00006667	2.00004000	6.00000952	12.00000444	20.00000260	30.00000171
0.03	—0.00014999	2.00008999	6.00002143	12.00001000	20.00000584	30.00000385
0.04	—0.00026664	2.00015997	6.00003810	12.00001778	20.00001039	30.00000684
0.05	—0.00041660	2.00024993	6.00005953	12.00002778	20.00001623	30.00001068
0.06	—0.00059987	2.00035986	6.00008572	12.00004000	20.00002338	30.00001538
0.07	—0.00081642	2.00048975	6.00011667	12.00005444	20.00003182	30.00002094
0.08	—0.00106625	2.00063957	6.00015239	12.00007111	20.00004156	30.00002735
0.09	—0.00134933	2.00080932	6.00019287	12.00009000	20.00005260	30.00003462
0.10	—0.00166565	2.00099896	6.00023812	12.00011111	20.00006494	30.00004274
0.20	—0.00665046	2.00398340	6.00095275	12.00044446	20.00025974	30.00017094
0.30	—0.01491849	2.00891653	6.00214471	12.00100009	20.00058443	30.00038462
0.40	—0.02641143	2.01573857	6.00381537	12.00177807	20.00103901	30.00068377
0.50	—0.04105079	2.02436903	6.00596661	12.00277849	20.00162349	30.00106841
0.60	—0.05874072	2.03470952	6.00860082	12.00400148	20.00233790	30.00153852
0.70	—0.07937122	2.04664697	6.01172090	12.00544718	20.00318226	30.00209413
0.80	—0.10282146	2.06005700	6.01533016	12.00711579	20.00415659	30.00273524
0.90	—0.12896314	2.07480729	6.01943237	12.00900750	20.00526094	30.00346185
1.00	—0.15766348	2.09076065	6.02403166	12.01112256	20.00649533	30.00427397
2.00	—0.55728535	2.28718009	6.09844718	12.04463248	20.02600337	30.01710156
3.00	—1.09266958	2.47797380	6.22778153	12.10098881	20.05859118	30.03849980
4.00	—1.70485708	2.60237710	6.41282806	12.18104267	20.10437394	30.06849737
5.00	—2.36561388	2.63874703	6.64546248	12.28609326	20.16352072	30.10713496
6.00	—3.06023237	2.58729278	6.90875783	12.41783401	20.23626354	30.15446585
7.00	—3.78015096	2.45818312	7.18174031	12.57809535	20.32291003	30.21055676
8.00	—4.51990978	2.26395530	7.44442891	12.76833522	20.42385877	30.27548895
9.00	—5.27577892	2.01594959	7.68071383	12.98893696	20.53961507	30.34935970
10.00	—6.04507511	1.72333341	7.87932729	13.23851702	20.67080282	30.43228420
20.00	—14.18676623	—2.64067155	7.59702750	16.01072933	22.97522235	31.80411300
30.00	—22.76302063	—8.35022616	4.84721503	16.55196651	26.15388117	34.40670439
40.00	—31.56338812	—14.74118234	0.90749219	15.19444348	27.74880750	37.90122026
50.00	—40.50677927	—21.56488016	—3.77155320	12.72526305	27.68132358	40.56614376
60.00	—49.55169026	—28.69503972	—8.96999309	9.49912967	26.52570130	41.76898440
70.00	—58.67349304	—36.05700540	—14.55966907	5.71002337	24.59821006	41.85732300
80.00	—67.85615223	—43.60227507	—20.45793311	1.47984735	22.07871080	41.14115459
90.00	—77.08853502	—51.29722377	—26.60774612	—3.10837747	19.08388119	39.80283278
100.00	—86.36253853	—59.11740300	—32.96776111	—7.99495420	15.69559837	37.95935907

TABLEAU XXII

A \ l	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	5.99999762	12.00000000	20.00000026	30.00000026	42.00000022	56.00000018
0.02	5.99999048	12.00000000	20.00000104	30.00000103	42.00000087	56.00000071
0.03	5.99997857	12.00000000	20.00000234	30.00000231	42.00000195	56.00000160
0.04	5.99996190	12.00000000	20.00000416	30.00000410	42.00000346	56.00000284
0.05	5.99994048	12.00000000	20.00000649	30.00000641	42.00000541	56.00000444
0.06	5.99991429	12.00000000	20.00000935	30.00000923	42.00000779	56.00000640
0.07	5.99988333	12.00000000	20.00001273	30.00001256	42.00001061	56.00000871
0.08	5.99984762	12.00000000	20.00001662	30.00001641	42.00001385	56.00001138
0.09	5.99980715	12.00000000	20.00002104	30.00002077	42.00001753	56.00001440
0.10	5.99976191	12.00000000	20.00002597	30.00002564	42.00002165	56.00001778
0.20	5.99904768	11.99999994	20.00010389	30.00010256	42.00008658	56.00007111
0.30	5.99785747	11.99999972	20.00023373	30.00023076	42.00019480	56.00015999
0.40	5.99619151	11.99999910	20.00041547	30.00041024	42.00034632	56.00028442
0.50	5.99405015	11.99999781	20.00064907	30.00064098	42.00054112	56.00044441
0.60	5.99143381	11.99999546	20.00093449	30.00092298	42.00077920	56.00063994
0.70	5.98834304	11.99999160	20.00127166	30.00125623	42.00106057	56.00087103
0.80	5.98477845	11.99998568	20.00166051	30.00164071	42.00138521	56.00113767
0.90	5.98074076	11.99997708	20.00210098	30.00207642	42.00175314	56.00143986
1.00	5.97623080	11.99996510	20.00259295	30.00256333	42.00216434	56.00177760
2.00	5.90539903	11.99944994	20.01031816	30.01024405	42.00865539	56.00710993
3.00	5.78887485	11.99728228	20.02301305	30.02301414	42.01946725	56.01599565
4.00	5.62876686	11.99168915	20.04040184	30.04082614	42.03458995	56.02843245
5.00	5.42770799	11.98051777	20.06208982	30.06361219	42.05400934	56.04441711
6.00	5.18863061	11.96146707	20.08755858	30.09128241	42.07770686	56.06394539
7.00	4.91456791	11.93229046	20.11616405	30.12372314	42.10565928	56.08701203
8.00	4.60850172	11.89094768	20.14713954	30.16079455	42.13783832	56.11361068
9.00	4.27326028	11.83570079	20.17960499	30.20232821	42.17421026	56.14373379
10.00	3.91145991	11.76516026	20.21258261	30.24812429	42.21473540	56.17737261
20.00	-0.75028417	10.12548434	20.33500740	30.86994209	42.83402045	56.70405174
30.00	-6.55728823	7.02081732	19.55649121	31.44214765	43.75008928	57.55723005
40.00	-12.99903595	2.92878611	17.72281941	31.45789885	44.71112705	58.67360322
50.00	-19.85476755	-1.83661300	15.02701174	30.69847598	45.38138065	59.91479626
60.00	-27.00734744	-7.09157358	11.66794581	29.19796473	45.52157149	61.06837931
70.00	-34.38607205	-12.72157438	7.79060651	27.06733788	45.05808098	61.92055597
80.00	-41.94445027	-18.65030680	3.49708869	24.41356843	44.02090338	62.33486539
90.00	-49.64999827	-24.82410167	-1.13911875	21.32288592	42.47457896	62.26577739
100.00	-57.47896778	-31.20357942	-6.06348903	17.86239724	40.48521751	61.72622839

TABLEAU XXIII

A \ l	0.	1.	2.	3.	4.	5.
0.01	1.99999500	6.00000119	12.00000083	20.00000055	30.00000038	42.00000028
0.02	1.99998000	6.00000476	12.00000333	20.00000221	30.00000154	42.00000113
0.03	1.99995500	6.00001071	12.00000750	20.00000497	30.00000346	42.00000253
0.04	1.99992000	6.00001905	12.00001333	20.00000883	30.00000615	42.00000450
0.05	1.99987500	6.00002976	12.00002083	20.00001380	30.00000962	42.00000703
0.06	1.99982000	6.00004285	12.00003000	20.00001987	30.00001385	42.00001013
0.07	1.99975501	6.00005833	12.00004083	20.00002705	30.00001885	42.00001379
0.08	1.99968001	6.00007618	12.00005333	20.00003532	30.00002462	42.00001801
0.09	1.99959502	6.00009641	12.00006750	20.00004471	30.00003115	42.00002279
0.10	1.99950003	6.00011901	12.00008333	20.00005519	30.00003846	42.00002814
0.20	1.99800054	6.00047566	12.00033332	20.00022078	30.00015385	42.00011255
0.30	1.99550274	6.00106874	12.00074994	20.00049675	30.00034615	42.00025325
0.40	1.99200866	6.00189628	12.0013315	20.00088311	30.00061539	42.00045022
0.50	1.98752112	6.00295550	12.00208289	20.00137986	30.00096155	42.00070347
0.60	1.98204372	6.00424290	12.00299908	20.00198699	30.00138463	42.00101300
0.70	1.97558082	6.00575419	12.00408163	20.00270451	30.00188464	42.00137880
0.80	1.96813755	6.00748437	12.00533041	20.00353241	30.00246158	42.00180089
0.90	1.95971973	6.00942774	12.00674530	20.00447068	30.00311546	42.00227927
1.00	1.95033391	6.01157793	12.00832614	20.00551933	30.00384627	42.00281392
2.00	1.80510392	6.04263573	12.03321098	20.02207540	30.01538643	42.01125653
3.00	1.57410090	6.08371234	12.07432209	20.04966131	30.03462449	42.02533035
4.00	1.26985371	6.12298532	12.13095286	20.08826151	30.06156695	42.04503957
5.00	0.90475071	6.14932334	12.20185604	20.13784470	30.09622252	42.07039003
6.00	0.48953932	6.15392846	12.28511413	20.19835198	30.13860160	42.10138917
7.00	0.03294762	6.13076782	12.37810434	20.26967942	30.18871566	42.13804604
8.00	-0.45813752	6.07633607	12.47758254	20.35165454	30.24657620	42.18037118
9.00	-0.97832311	5.98915162	12.57987000	20.44400749	30.31219337	42.22837658
10.00	-1.52336944	5.86920589	12.68109763	20.54633903	30.38557401	42.28207558
20.00	-7.83391897	3.21233397	13.00122422	21.90112755	31.53723521	43.13568860
30.00	-14.99568579	-1.09305598	11.55871154	22.82900962	33.24302150	44.56702354
40.00	-22.60139273	-6.29132621	8.80327059	22.51271083	34.77088454	46.47241295
50.00	-30.49136857	-12.06191082	5.17859733	21.08009456	35.46149443	48.45425878
60.00	-38.58345364	-18.23906436	0.93587891	18.81089932	35.20931659	49.98545899
70.00	-46.82876628	-24.72420666	-3.77420588	15.90592322	34.15957153	50.79038178
80.00	-55.19542932	-31.45310555	-8.85357149	12.49952501	32.46771582	50.86410599
90.00	-63.66128827	-38.38115636	-14.23424077	8.68498872	30.25263723	50.30089467
100.00	-72.21020624	-45.47589261	-19.86682750	4.52991815	27.60207880	49.19954472

3-8-1. Le potentiel A [$\exp x^2 - 1$].

A titre d'exemple, nous traitons le cas du potentiel A [$\exp x^2 - 1$]. L'ES s'écrit :

$$\psi'' + [E - A(\exp x^2 - 1)]\psi = 0$$

Il semble impossible de proposer pour ψ un développement qui mène à une récurrence de longueur finie. Orientons-nous vers les récurrences infinies. Pour cela, on développe le potentiel en série de puissances; on trouve en posant : $z = x\sqrt{A}$ et $E = \varepsilon A$:

$$\psi'' + [\varepsilon - z^2/A - z^4/(2! A^2) - z^6/(3! A^3) - z^8/(4! A^4) \dots] \psi = 0$$

Lorsque A est suffisamment grand, (l'ordre de grandeur sera précisé plus loin), il est possible de tronquer ce développement en série et par conséquent de faire de même avec la récurrence infinie qui lui correspond, On cherche alors la solution sous la forme :

$$\psi = \exp(-z^2/\sqrt{4A}) \sum_0^{\infty} C_k z^{2k} \quad (\text{états pairs})$$

$$\psi = \exp(-z^2/\sqrt{4A}) \sum_0^{\infty} C_k z^{2k+1} \quad (\text{états impairs})$$

On trouve les récurrences :

états pairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 6 & -4/\sqrt{A} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 2 & \varepsilon - 1/\sqrt{A} & 0 & -1/(2! A^2) & -1/(3! A^3) & -1/(4! A^4) & \dots \end{pmatrix}$$

avec $n = \infty$, $r = 2$, $s = 0$ et $E = \varepsilon A$, $A \gg 1$.

états impairs :

$$X = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 10 & -4/\sqrt{A} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 6 & \varepsilon - 3/\sqrt{A} & 0 & -1/(2! A^2) & -1/(3! A^3) & -1/(4! A^4) & \dots \end{pmatrix}$$

avec $n = \infty$, $r = 2$, $s = 0$ et $E = \varepsilon A$, $A \gg 1$.

Lorsqu'on applique l'algorithme à ces récurrences préalablement tronquées, on obtient pour $A > 1$ et pas forcément très grand, une bonne vp approchée. On peut se faire une idée de l'ordre de grandeur de l'erreur commise en opérant la troncation un rang plus loin et en comparant les résultats obtenus. Les tableaux 24a, b, c présentent quelques résultats de ce type.

On constate sur ces exemples que plus A est grand, meilleure est l'approximation. Cependant, même lorsque A ne vaut que 1, la méthode fournit encore des résultats utilisables.

TABLEAU XXIVa
vp des six premiers états lorsque A = 1

$n=3$	1.242 (45)	4.052 (53)	non calculés	11.12 (71)	non calculés	19.42 (90)
4	1.318 (121)	4.424 (137)	8.360 (160)	12.96 (188)	18.11 (218)	23.76 (248)
5	1.343 (183)	4.558 (207)	8.739 (240)	13.74 (273)	19.46 (309)	25.83 (348)
6	1.352 (193)	4.607 (217)	8.885 (248)	14.06 (276)	20.04 (312)	26.77 (342)
7	1.355 (176)	4.624 (195)	8.940 (221)	14.19 (245)	20.29 (272)	27.18 (298)
8	1.356 (150)	4.630 (165)	8.960 (188)	14.24 (208)	20.38 (229)	27.35 (250)
9	1.356 (124)	4.632 (139)	8.967 (156)	14.25 (171)	20.42 (189)	27.42 (205)
10	1.356 (105)	4.633 (115)	8.970 (128)	14.26 (141)	20.43 (155)	27.44 (167)
11	1.356 (89)	4.633 (97)	8.970 (108)	14.26 (119)	20.44 (130)	27.45 (139)
12	1.356 (78)	4.633 (86)	8.971 (95)	14.26 (102)	20.44 (111)	27.46 (120)
∞	1.35637	4.6331	8.971	14.26	20.44	27.46

TABLEAU XXIVb
Idem lorsque A = 5

$n=3$	2.526 (31)	8.022 (35)	14.28 (40)	21.11 (47)	28.42 (54)	non calculés
4	2.585 (55)	8.340 (65)	15.16 (77)	22.89 (90)	31.40 (104)	40.62 (118)
5	2.599 (70)	8.421 (83)	15.42 (98)	23.45 (114)	32.43 (131)	42.28 (150)
6	2.602 (71)	8.441 (84)	15.49 (98)	23.63 (113)	32.77 (130)	42.87 (146)
7	2.603 (64)	8.446 (74)	15.51 (88)	23.68 (100)	32.88 (114)	43.07 (129)
8	2.603 (56)	8.447 (64)	15.51 (75)	23.69 (85)	32.91 (98)	43.13 (109)
9	2.603 (49)	8.448 (56)	15.51 (64)	23.69 (74)	32.92 (82)	43.14 (90)
10	2.603 (45)	8.448 (50)	15.51 (58)	23.69 (65)	32.92 (73)	43.15 (78)
11	2.603 (43)	8.448 (47)	15.51 (54)	23.69 (59)	32.92 (66)	43.15 (71)
12	2.603 (43)	8.448 (47)	15.51 (52)	23.69 (56)	32.92 (62)	43.15 (67)
∞	2.602770	8.44773	15.5114	23.6935	32.924	43.151

TABLEAU XXIVc
Idem lorsque A = 20

$n=3$	4.794 (22)	14.92 (25)	26.02 (31)	37.90 (34)	50.45 (38)	non calculés
4	4.836 (31)	15.17 (37)	26.74 (44)	39.42 (51)	53.12 (58)	67.73 (66)
5	4.842 (34)	15.21 (40)	26.88 (48)	39.77 (56)	53.79 (65)	68.88 (74)
6	4.843 (33)	15.21 (38)	26.91 (46)	39.84 (53)	53.95 (61)	69.18 (69)
7	4.843 (30)	15.22 (35)	26.91 (42)	39.86 (48)	53.99 (55)	69.25 (62)
8	4.843 (29)	15.22 (33)	26.91 (39)	39.86 (43)	53.99 (50)	69.26 (55)
9	4.843 (28)	15.22 (31)	26.91 (37)	39.86 (41)	53.99 (45)	69.27 (51)
10	4.843 (30)	15.22 (33)	26.91 (37)	39.86 (40)	54.00 (45)	69.27 (48)
11	4.843 (31)	15.22 (35)	26.91 (39)	39.86 (41)	54.00 (45)	69.27 (48)
12	4.843 (32)	15.22 (35)	26.91 (40)	39.86 (43)	54.00 (47)	69.27 (50)
∞	4.8431766	15.215333	26.91430	39.86127	53.99520	69.2670

Les nombres entre parenthèses sont les valeurs de k , soit l'ordre de l'approximant à prendre en considération pour atteindre la précision de 10^{-8} . On remarque ce fait absolument étonnant que k ne croît pas monotonément avec n . On constate que k passe à peu près systématiquement par un maximum pour diminuer ensuite. Cela a pour conséquence qu'il est plus rapide et naturellement plus précis de traiter la récurrence infinie tronquée aux grandes valeurs de n plutôt qu'aux petites valeurs de n . Il ne nous est pas possible d'entrer ici dans les détails.

4. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Nous avons préconisé le recours à la méthode du déterminant de Hill pour la recherche des états propres de l'ES. Le principe de la méthode repose essentiellement sur le contenu du théorème général du § 1-4. Cette méthode permet de résoudre un grand nombre de problèmes parmi lesquels ceux que nous avons évoqués ne sont que des exemples jugés significatifs. Considérée uniquement à la lumière des résultats concrets qu'elle permet d'obtenir, simplicité, rapidité et précision des calculs, cette méthode apparaît comme la plus efficace existante actuellement pour la résolution approchée de l'ES. Elle nous a permis en chemin de tester sur quelques exemples choisis la validité des approximations effectuées lors de l'emploi des méthodes approchées classiques (perturbations, WKB). Il est tout-à-fait remarquable que dans leur domaine commun d'application, la nouvelle méthode surclasse totalement les anciennes. Cela ne signifie nullement que celles-ci soient devenues inutiles mais cela signifie en tout cas qu'il est peu indiqué d'y recourir lorsque ce n'est pas indispensable, en particulier quand la nouvelle méthode s'applique.

Un autre intérêt de ce travail réside dans les larges perspectives qu'il ouvre. Si l'on juge la nouvelle méthode au plan de la rigueur théorique, il apparaît que ses succès n'ont pas toujours trouvé d'explication rigoureuse. Tout d'abord, il conviendrait de s'assurer de la légitimité des opérations sur déterminants infinis que la méthode entraîne à effectuer. Ensuite, il y aurait lieu d'étudier quelles conditions un développement du type :

$$\psi = f(x) \sum C_k \binom{x^k}{\varphi_k}$$

doit satisfaire pour permettre la construction des états propres de l'ES par la méthode du déterminant de Hill.

D'autres questions non résolues concernent la convergence de l'algorithme : pourquoi cette convergence est-elle plus ou moins rapide selon que l'on choisit un développement du type :

$$\begin{aligned} \psi &= \exp(-x^2/2) \sum C_k x^k \quad \text{ou plus simplement} \quad \sum C_k x^k \\ \psi &= \sum C_k/k! D_k(x\sqrt{2}) \quad \text{ou plus simplement} \quad \sum C_k/k! D_k(x) ? \end{aligned}$$

Ainsi qu'il a déjà été dit au § 3-1-2-6, des recherches en cours indiquent que certains facteurs jouent un rôle essentiel dans la cinétique de l'algorithme. Selon que l'on s'y prend bien ou mal, l'information que représente un jeu de vp données avec une certaine précision peut être contenu dans des approximants de petites ou au contraire de grandes dimensions. L'étude de ces questions essentielles pour un

usage correct de la méthode du déterminant de Hill fera l'objet d'un travail séparé. Les résultats acquis des recherches en cours permettent de décupler le rendement de la méthode par rapport à ce qu'il est dans ce travail.

L'algorithme pose également des problèmes spécifiquement numériques. Parmi toutes ses variantes imaginables, il est préférable de ne retenir que celles qui tiennent compte des divers comportements asymptotiques des solutions de la récurrence, car si l'on néglige cette précaution, le calcul du déterminant contenu dans la relation (4) se fera avec perte de chiffres significatifs dans tous les cas où $s > 0$; cela est dû aux différences entre quantités voisines que la relation (4) entraînera à effectuer. Il ne nous est pas possible, faute de place, de détailler ici des exemples de solutions acceptables pour ce problème.

Un autre domaine qui mériterait une exploration approfondie réside dans la résolution des récurrences rencontrées. Le principe de la méthode du déterminant de Hill substitue une récurrence à l'ES et elle calcule les vp de cette récurrence en assumant qu'elles coïncident avec celles de l'ES. Mais la méthode n'a pas besoin pour y parvenir de résoudre la récurrence du moins analytiquement. Si une telle solution était possible, cela faciliterait peut-être les calculs numériques. Il vaudrait la peine de tenter une telle résolution, par exemple en cherchant la solution C_k sous forme hypergéométrique généralisée. Ce problème est difficile et semble n'avoir jamais été abordé qu'en sens inverse, à savoir : étant donnée une forme hypergéométrique, rechercher à quelle récurrence elle obéit [18].

Dans un avenir plus immédiat, il est clair que l'on peut poursuivre la prospection que nous avons entamée en envisageant toutes sortes de potentiels que l'un ou l'autre domaine de la physique incite à trouver digne d'intérêt. Signalons enfin qu'il doit être possible de généraliser la méthode au calcul des vp des systèmes d'équations différentielles; cela concerne des problèmes aussi divers que l'ion H_2^+ , l'effet Stark sur l'atome H, etc. ...

REMERCIEMENTS

Les esquisses de ce travail ont été entièrement réalisées lors du séjour des auteurs à la Faculté Polytechnique de l'Université Nationale du Zaïre à Kinshasa dans le cadre de la coopération technique universitaire belge. Elles ont été remaniées et achevées aux Universités de Liège et de Louvain la Neuve.

Les auteurs remercient les diverses institutions qui ont à des titres divers favorisé la rédaction du présent travail :

- la Coopération Technique Universitaire belge.
- l'Université Nationale du Zaïre et sa Faculté Polytechnique.
- le Département des Finances à Kinshasa, section informatique.
- le service du Professeur Antoine HAUTOT (Université de Liège).
- l'Unité de Thermodynamique et de Turbomachines de l'UCL qui a aimablement autorisé l'usage de son ordinateur (Université de Louvain la Neuve).

RÉFÉRENCES

- [¹] André HAUTOT, *Bull. Soc. Roy. Sci. Liège*, **43**, 348 (1974). Voir aussi : G. NATANSON, *Bull. Univ. Leningrad*, **10**, 22 (1971).
- [²] R. CAMPBELL, Théorie générale de l'équation de Mathieu (Paris, Masson) (1955).
- [³] N. W. Mac LACHLAN, Theory and application of Mathieu functions (Oxford, Clarendon Press) (1947).

- [⁴] M. ABRAMOVITZ and I. A. STEGUN, Handbook of mathematical functions (N-Y, Dover) (1965).
- [⁵] E. H. KERNER, *Phys. Rev.*, **83**, 71 (1951).
- [⁶] C. J. BOUWKAMP, *J. Math. Phys.*, **26**, 79 (1947).
- [⁷] E. L. INCE, *Phil. Mag.*, **6**, 547 (1928).
- [⁸] S. N. BISWAS, K. DATTA, R. P. SAXENA, P. K. SRIVASTAVA and V. S. VARMA, *J. Math. Phys.*, **14**, 1190 (1973).
- [⁹] André HAUTOT (à paraître dans *J. Phys. A*).
- [¹⁰] F. RIESZ, Les systèmes d'équations linéaires à une infinité d'inconnues (Paris, Gauthier Villars) (1952).
- [¹¹] F. T. HIOE and E. W. MONTROLL, *J. Math. Phys.*, **16**, 1945 (1975); **17**, 1320 (1976).
- [¹²] I. I. GOLDMAN and V. D. KRIVCHENKOV, Problems in quantum mechanics (Oxford, Pergamon Press) (1961).
- [¹³] G. M. BENDER and T. T. WU, *Phys. Rev.*, **184**, 1231 (1969).
- [¹⁴] E. C. TITCHMARSH, Eigenfunctions expansions (Oxford at the Clarendon Press) (1946).
- [¹⁵] D. J. EVANS, *Comp. J.*, **18**, 70 (1975).
- [¹⁶] R. A. SWEET, *Comm. ACM*, **12**, 330 (1969).
- [¹⁷] J. MIKLOSKO, *J. Comp. Appl. Math.*, **1**, 73 (1975).
- [¹⁸] E. D. RAINVILLE, Special functions (Macmillan — N-Y) (1963).
- [¹⁹] I. S. GRADSHTEYN and I. M. RYZHIK, Tables of integrals, series and products (Academic Press N-Y) (1965).