

ANNALES DE L'I. H. P., SECTION A

M.-C. DUMONT-LEPAGE

A. RONVEAUX

États liés de potentiels bisphériques et toroïdaux

Annales de l'I. H. P., section A, tome 30, n° 3 (1979), p. 207-221

http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1979__30_3_207_0

© Gauthier-Villars, 1979, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annales de l'I. H. P., section A » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

États liés de potentiels bispériques et toroïdaux

par

M.-C. DUMONT-LEPAGE et A. RONVEAUX

Laboratoire de Physique Mathématique et de Physique du Solide.
Département de Physique, Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix,
B-5000 Namur, Belgique

ABSTRACT. — Necessary and sufficient conditions insuring one bound state of given (l, m) and bounds on the number of (l, m) states are obtained for bispherical and toroidal potentials. The results are valid for separable potentials $V(\mu, \eta)$ i. e. $V(\mu, \eta) (\text{Ch } \mu - \cos \eta)^{-2}$ is a function only of μ . In particular, these results are applied to the study of a double three dimensional square well.

RÉSUMÉ. — Des conditions nécessaires et suffisantes pour l'obtention d'un ou plusieurs états liés et des bornes sur le nombre d'états liés pour l'équation de Schrödinger sont obtenues en coordonnées bispériques et toroïdales. La séparation des variables impose que la classe de potentiels envisagés soit restreinte aux potentiels à une seule variable

$$g(\mu) = V(\mu, \eta)(\text{Ch } \mu - \cos \eta)^{-2}.$$

Ces conditions sont appliquées au cas du double puits de potentiel carré en coordonnées bispériques.

1. INTRODUCTION

Il existe une littérature abondante sur les spectres d'énergie et sur les conditions d'existence d'états liés pour des potentiels centraux, mais il n'en est pas de même pour des problèmes quantiques à deux centres. Nous avons déjà approché des problèmes de ce type pour des coordonnées

sphéroïdales [1] [2] où les potentiels sont localisés dans un ellipsoïde (prolate ou oblate).

Pour des potentiels de portée finie attachés à chaque centre, la méthode L. C. A. O. [3] peut être utilisée pour le calcul des valeurs propres du système, uniquement si la distance entre les centres attractifs est grande par rapport à la portée des potentiels; mais aucun résultat ne semble connu dans le cas de faible séparation. Dans cet article, nous donnons quelques résultats simples caractérisant les états liés de systèmes à deux centres et à infinité de centres (tore).

Le système de coordonnées le plus approprié pour l'étude des systèmes à deux centres est celui des coordonnées bisphériques (surface du 4^e ordre). Nous traitons de façon similaire le cas d'un potentiel attractif agissant à l'intérieur d'un tore à l'aide des coordonnées toroïdales. Ces deux systèmes sont en effet très voisins et de plus, ils permettent la séparation de l'équation de Schrödinger moyennant le même facteur de modulation.

Nous comparons les conditions obtenues pour un double puits carré à trois dimensions à celles bien connues du simple puits carré.

Les techniques utilisées sont les mêmes que dans le cas sphéroïdal [1] [2] et les conditions nécessaires et suffisantes obtenues pour un ou n états liés sont du même type que celle de Jost-Pais [5] et Calogero [6] [7], connues pour un potentiel central.

2. SÉPARATION DE VARIABLES POUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER EN COORDONNÉES BISPHÉRIQUES ET TOROÏDALES

Les coordonnées bipolaires planes (μ, η) sont liées aux coordonnées polaires (r_{\pm}, θ_{\pm}) relatives à deux points fixes (pôles) 0_- et 0_+ distants de $2a$, par les relations :

$$\mu = \ln \frac{r_-}{r_+}; \quad \eta = \theta_+ - \theta_- \quad (1)$$

Par une rotation d'angle ϕ autour de la droite des pôles, les coordonnées bipolaires planes donnent naissance au système de coordonnées bisphériques (μ, η, ϕ) et pour tout point de l'espace, on a [8] :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\infty \leq \mu \leq \infty \\ 0 \leq \eta \leq \pi \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi. \end{array} \right. \quad (2)$$

Les surfaces de coordonnée $\mu = \text{constante}$ sont des sphères de rayon $R = \frac{d}{\text{Ch } \mu}$ où d représente la distance du centre de la sphère au milieu de $[0_-, 0_+]$.

Une rotation d'angle ϕ autour de la médiatrice de $[0_-, 0_+]$ engendre le système de coordonnées toroïdales (μ, η, ϕ) pour lequel en tout point de l'espace on a cette fois [8] :

$$\left. \begin{array}{l} 0 \leq \mu \leq \infty \\ -\pi \leq \eta \leq \pi \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi. \end{array} \right\} \quad (3)$$

L'équation de Schrödinger à énergie nulle ($\hbar = 2m = 1$) :

$$\nabla^2 \psi(\mu, \eta, \phi) = V(\mu, \eta) \psi(\mu, \eta, \phi) \quad (4)$$

avec le potentiel $V(\mu, \eta)$ supposé partout attractif ($V(\mu, \eta) \leq 0$), n'est séparable dans les deux systèmes de coordonnées qu'après avoir posé :

$$\psi(\mu, \eta, \phi) = \sqrt{\text{Ch } \mu - \cos \eta} F(\mu, \eta, \phi). \quad (5)$$

L'équation (4) se présente alors sous la forme :

$$\nabla^2 F(\mu, \eta, \phi) = \frac{a^2 V(\mu, \eta)}{(\text{Ch } \mu - \cos \eta)^2} F(\mu, \eta, \phi) \quad (6)$$

L'opérateur Laplacien prend les 2 formes suivantes en coordonnées bisphériques et toroïdales :

$$\begin{aligned} \nabla^2 \text{ bisphérique} &\equiv \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} + \frac{1}{\sin \eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\sin \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{1}{4} \\ \nabla^2 \text{ toroïdal} &\equiv \frac{1}{\text{Sh } \mu} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\text{Sh } \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\text{Sh}^2 \eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (7)$$

Enfin, pour assurer la séparation complète de l'équation (6) en 3 équations différentielles d'une seule variable chacune :

$$F(\mu, \eta, \phi) = M(\mu)H(\eta)\Phi(\phi), \quad (8)$$

le découplage des équations radiales (μ) et angulaires (η) impose que le « potentiel réduit » :

$$\frac{V(\mu, \eta)}{(\text{Ch } \mu - \cos \eta)^2} \quad (9)$$

soit fonction de la seule variable μ .

Ce potentiel réduit est décrit par la fonction $g(\mu)$.

3. ÉTATS LIÉS A ÉNERGIE NULLE EN COORDONNÉES BISPHÉRIQUES

Il est aisé de voir que la dépendance (η, ϕ) de la fonction $F(\mu, \eta, \phi)$ est du type $Y_{l,m}(\eta, \phi) = P_l^m(\cos \eta) e^{im\phi}$ ($|m| \leq l$, m et l entiers) [8]. Il reste donc à étudier l'équation radiale

$$\frac{d^2 M(\mu)}{d\mu^2} - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 M(\mu) = a^2 g(\mu) M(\mu), \quad (10)$$

pour un potentiel attractif placé à l'intérieur des deux sphères $\mu = \mu_- < 0$ et $\mu = \mu_+ > 0$ entourant respectivement les pôles 0_- et 0_+ , c'est-à-dire :

$$g(\mu) \begin{cases} \leq 0 & \mu \leq \mu_- < 0 & \text{et} & \mu \geq \mu_+ > 0 \\ \equiv 0 & \mu_- < \mu < \mu_+ \end{cases} \quad (11)$$

Cette équation radiale est remplacée par l'équation de phase [9]

$$\frac{dS}{d\mu} = S'(\mu) = \frac{a^2 g(\mu)}{2l+1} [e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} + S(\mu)e^{(l+\frac{1}{2})\mu}]^2, \quad (12)$$

déduite de la méthode de variation des constantes de Lagrange.

La phase $S(\mu)$ est définie par :

$$S(\mu) = \frac{C_2(\mu)}{C_1(\mu)}, \quad (13)$$

la solution générale de (10) s'écrivant :

$$M(\mu) = C_1(\mu)e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} + C_2(\mu)e^{(l+\frac{1}{2})\mu}. \quad (14)$$

Les conditions limites et les conditions d'intégrabilité de la fonction d'onde $\left(\int \psi \bar{\psi} < \infty \right)$ se transforment en conditions limites pour la phase :

$$S(\mu \rightarrow -\infty) = \infty \quad ; \quad S(\mu \rightarrow +\infty) = 0 \quad (15)$$

lorsque le potentiel $g(\mu)$ est asymétrique.

Un potentiel $g(\mu)$ symétrique (pair), engendre des solutions $M(\mu)$ paires et impaires auxquels cas les conditions limites pour $S(\mu)$ sont :

$$\begin{aligned} S(\mu_+) &= -1 \quad ; \quad S(\infty) = 0 && \text{(impair)} \\ S(\mu_+) &= 1 \quad ; \quad S(\infty) = 0 && \text{(pair)} \end{aligned} \quad (16)$$

Une transformation homographique appropriée au cas impair et au cas pair change la phase $S(\mu)$ en une fonction $A(\mu)$ solution de l'équation de Riccati :

$$A'(\mu) = \frac{a^2 g(\mu)}{2l+1} [e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} + A(\mu)[e^{(l+\frac{1}{2})\mu} - e^{-(l+\frac{1}{2})\mu}]]^2 \quad (17)$$

(impair)

$$A'(\mu) = \frac{a^2 g(\mu)}{2l+1} [e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} + A(\mu)[e^{(l+\frac{1}{2})\mu} + e^{-(l+\frac{1}{2})\mu}]]^2 \quad (18)$$

(pair)

avec les conditions initiales

$$A(\mu_+) = \infty \quad ; \quad A(\mu \rightarrow +\infty) = 0 \quad \text{(impair et pair)}. \quad (19)$$

A) Existence d'un état lié

Les critères d'existence d'un état lié (BS(l, m)) sont alors déduits par une technique décrite antérieurement et utilisée dans des situations très diverses [10].

CONDITIONS NÉCESSAIRES

$$\text{BS}(l, m) \Rightarrow \frac{a^2}{l + \frac{1}{2}} \int_{\mu_+}^{\infty} |g(\mu)| e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} \text{Sh} \left(l + \frac{1}{2} \right) \mu d\mu > 1 \quad (20)$$

(impair)

$$\text{BS}(l, m) \Rightarrow \frac{a^2}{l + \frac{1}{2}} \int_{\mu_+}^{\infty} |g(\mu)| e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} \text{Ch} \left(l + \frac{1}{2} \right) \mu d\mu > 1 \quad (21)$$

(pair)

$$\text{BS}(l, m) \Rightarrow \frac{a^2}{2l+1} \int_{-\infty}^{\infty} |g(\mu)| d\mu > 1 \quad (\text{asymétrique}) \quad (22)$$

CONDITIONS SUFFISANTES

$$\frac{\text{Sh} \left(l + \frac{1}{2} \right) \mu_+}{e^{-(l+\frac{1}{2})\mu_+}} \frac{a^2}{\left(l + \frac{1}{2} \right)} \int_{\mu_+}^{\infty} |g(\mu)| e^{-(2l+1)\mu} d\mu > 1 \Rightarrow \text{BS}(l, m) \quad (23)$$

(impair)

$$\frac{\text{Ch} \left(l + \frac{1}{2} \right) \mu_+}{e^{-(l+\frac{1}{2})\mu_+}} \frac{a^2}{\left(l + \frac{1}{2} \right)} \int_{\mu_+}^{\infty} |g(\mu)| e^{-(2l+1)\mu} d\mu > 1 \Rightarrow \text{BS}(l, m) \quad (24)$$

(pair)

Une condition suffisante de ce type ne peut être obtenue dans le cas asymétrique.

L'existence des intégrales dépend de la forme asymptotique de $g(\mu)$ donc du potentiel.

B) Nombre d'états liés

Des bornes supérieures et inférieures sur le nombre d'états liés $n_{l,m}$ sont déduites par une technique semblable à celle décrite par Calogero [7] pour un potentiel central et que nous avons généralisée [11].

PREMIER TYPE DE BORNE SUPÉRIEURE

$$U_1 : n_{l,m} \leq \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2} \quad (25)$$

$$U_2 : n_{l,m} \leq 1 + \frac{2}{\pi} \sqrt{I_0 I_2 - I_1^2} \quad (26)$$

avec

$$I_i = \frac{a^2}{2l+1} \int_{\mu_1}^{\mu_2} |g(\mu)| u_1^i(\mu) \mu^{2-i}(\mu) d\mu \quad (27)$$

où

$$\begin{cases} u_1(\mu) = e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} & [\mu_1, \mu_2] = [\mu_+, \infty[\\ u_2(\mu) = 2 \text{Sh} \left(l + \frac{1}{2} \right) \mu & (\text{impair}) \end{cases}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1(\mu) = e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} \\ u_2(\mu) = 2 \operatorname{Ch} \left(l + \frac{1}{2} \right) \mu \end{array} \right. \quad [\mu_1, \mu_2] = [\mu_+, \infty[\quad (\text{pair}) \quad (28)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1(\mu) = e^{-(l+\frac{1}{2})\mu} \\ u_2(\mu) = e^{(l+\frac{1}{2})\mu} \end{array} \right. \quad [\mu_1, \mu_2] =]-\infty, \mu_-] \cup [\mu_+, \infty[\quad (\text{asymétrique})$$

DEUXIÈME TYPE DE BORNE SUPÉRIEURE

Pour déduire des bornes supérieures du deuxième type, le raisonnement décrit dans [II] doit être adapté au cas particulier présent du potentiel symétrique. La discussion doit porter sur le comportement de la fonction $(-A(\mu))$ et non sur celui de la phase $S(\mu)$, les rôles des extrémités de l'intervalle $[a, b]$ (ici $[\mu_+, \infty[$) doivent permuter et la fonction $f(x)$ doit devenir

$$f(\mu) = -\frac{u_1(\mu)}{u_2(\mu)}, \quad (29)$$

$u_1(\mu)$ et $u_2(\mu)$ étant définis par les relations (28).

Par conséquent, la fonction $f'(\mu)$ est positive et bornée par

$$\frac{2l+1}{u_2^2(\mu_+)}. \quad (30)$$

Pour autant que $h(\mu) = \frac{a^2 |g(\mu)|}{(2l+1)} u_2^2(\mu)$ soit différentiable par morceaux, décroissante et $\sqrt{h(\mu)}$ intégrable sur $[\mu_+, \infty[$, une nouvelle borne supérieure sur le nombre d'états liés s'écrit :

$$n_{l,m} \leq \frac{2}{\pi} \frac{a\sqrt{v}}{u_2(\mu_+)} \int_{\mu_+}^{\infty} \sqrt{|v(\mu)|} u_2(\mu) d\mu + 1 \quad (31)$$

v est la constante de couplage positive du potentiel réduit $g(\mu) = v v(\mu)$. Remarquons que ceci n'est valable que pour un potentiel $g(\mu)$ symétrique.

BORNE INFÉRIEURE

La technique décrite dans [II] revient à compter le nombre de pôles de la fonction $\frac{1}{A(\mu)}$ (cas symétrique) ou $\frac{1}{S(\mu)}$ (cas asymétrique) et à définir $f(\mu) = \frac{u_2(\mu)}{u_1(\mu)}$.

Une première expression d'une borne inférieure au nombre d'états liés s'écrit alors dans les trois cas :

$$n_{l,m} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left(\frac{a\sqrt{v}}{2l+1} f(\mu_1) \right) + \frac{a\sqrt{v}}{\pi} \int_{\mu_1}^{\mu_2} \min \left(\frac{1}{u_1^2(\mu)}, |v(\mu)| u_1^2(\mu) \right) d\mu \right\} \right\} \quad (32)$$

où $\{ \{ x \} \}$ représente la partie entière positive de x .

Cependant, le raisonnement utilisé pour $\frac{1}{A(\mu)}$ et $\frac{1}{S(\mu)}$ peut être adapté à $A(\mu)$ et $S(\mu)$ en définissant $f(\mu) = \frac{u_1(\mu)}{u_2(\mu)}$ et en changeant les rôles de μ_1 et μ_2 , ce qui donne dans les trois cas :

$$n_{l,m} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{a\sqrt{v}}{\pi} \int_{\mu_1}^{\mu_2} \min \left(\frac{1}{u_2^2(\mu)}, |v(\mu)| u_2^2(\mu) \right) d\mu \right\} \right\}. \quad (33)$$

Notons que les pôles éventuels de $f(\mu)$ n'altèrent pas la valeur de $n_{l,m}$.

4. ÉTATS LIÉS A ÉNERGIE NULLE EN COORDONNÉES TOROIDALES

La séparation de l'équation (6) en coordonnées toroïdales donne lieu cette fois à une dépendance (η, ϕ) de la fonction $F(\mu, \eta, \phi)$ du type $(e^{i\eta} e^{im\phi})$ [12] et l'équation radiale s'écrit :

$$\frac{1}{\text{Sh } \mu} \frac{d}{d\mu} \left(\text{Sh } \mu \frac{dM(\mu)}{d\mu} \right) - \left(l^2 - \frac{1}{4} + \frac{m^2}{\text{Sh}^2 \mu} \right) M(\mu) = a^2 g(\mu) M(\mu). \quad (34)$$

Remarquons que les nombres quantiques l et m , entiers, varient ici indépendamment l'un de l'autre.

Caractérisons à présent le nombre d'états liés d'un potentiel attractif agissant à l'intérieur d'un tore défini par $\mu = \mu_0$, c'est-à-dire :

$$g(\mu) \begin{cases} < 0 & \mu_0 \leq \mu \\ \equiv 0 & 0 \leq \mu \leq \mu_0. \end{cases} \quad (35)$$

Dans ces variables, le potentiel ne peut plus être symétrique et les conditions d'existence d'états liés sont déduites comme précédemment [1] [11].

En effet, la solution générale :

$$M(\mu) = C_1(\mu)u_1(\mu) + C_2(\mu)u_2(\mu) \quad (36)$$

est définie à partir des fonctions toroïdales positives suivantes [12] :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_1(\mu) = (-1)^m Q_{l-1/2}^m (\text{Ch } \mu) \\ u_2(\mu) = P_{l-1/2}^m (\text{Ch } \mu) \end{array} \right. \quad W(u_1, u_2) = \frac{\Gamma(l+m+1/2)}{\Gamma(l-m+1/2)} \frac{1}{\text{Sh } \mu} > 0, \quad (37)$$

de sorte que l'équation de phase s'écrit :

$$S'(\mu) = \frac{a^2 g(\mu) \text{Sh } \mu \Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} [(-1)^m Q_{l-1/2}^m (\text{Ch } \mu) + S(\mu) P_{l-1/2}^m (\text{Ch } \mu)]^2. \quad (38)$$

Les fonctions toroïdales à l'extérieur et à l'intérieur du tore ont le comportement suivant au voisinage de $\mu = 0$ et $\mu \rightarrow \infty$ (12), (13), (14) :

$\mu \rightarrow 0$

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) \text{ fini } \forall l, m \text{ entier,} \\ Q_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) \sim \frac{(-1)^m}{2} (m-1)! \text{Cth}^m \frac{\mu}{2}, \quad (m \neq 0) \\ Q_{l-\frac{1}{2}}(\text{Ch } \mu) \sim \log \left(\text{Cth} \frac{\mu}{2} \right) \end{array} \right. \quad (39)$$

$\mu \rightarrow \infty$

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) \text{ fini } \forall l, m \text{ entier,} \\ P_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) \rightarrow 0, \quad \text{mais } \sqrt{\text{Ch } \mu} P_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) \rightarrow \infty \\ P_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) \sim \frac{2^{l-1/2}}{\sqrt{\pi}} \frac{(l-1)!}{\Gamma(l-m+1/2)} \text{Ch}^{l-\frac{1}{2}} \mu. \quad (l \neq 0) \end{array} \right. \quad (40)$$

Les conditions d'intégrabilité et de continuité de la solution $M(\mu)$ engendrent ensuite les conditions limites suivantes sur la phase :

$$S(\mu = \mu_0) \rightarrow \infty \quad ; \quad S(\mu \rightarrow \infty) = 0. \quad (41)$$

Le choix des solutions u_1 et u_2 est donc tel que un pôle de la phase à la surface du tore ($\mu = \mu_0$) caractérise l'existence d'un état lié, et les conditions recherchées sont immédiates.

A) Existence d'un état lié

CONDITION NÉCESSAIRE

$$BS(l, m) \Rightarrow \frac{a^2 \Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} \int_{\mu_0}^{\infty} |g(\mu)| \text{Sh } \mu | P_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) Q_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu) | d\mu \geq 1 \quad (42)$$

CONDITION SUFFISANTE

$$\frac{P_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu_0)}{(-1)^m Q_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu_0)} \frac{a^2 \Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} \int_{\mu_0}^{\infty} |g(\mu)| \text{Sh } \mu (Q_{l-\frac{1}{2}}^m(\text{Ch } \mu))^2 d\mu \geq 1 \Rightarrow BS(l, m). \quad (43)$$

Les intégrales convergent pour des potentiels suffisamment petits asymptotiquement.

B) Nombre d'états liés

Les techniques de recherche des bornes sur le nombre d'états liés $n_{l,m}$ [II] s'appliquent ici avec les mêmes modifications que celles signalées dans le cas bispérique.

Les bornes supérieures U_1, U_2 sur le nombre d'états liés $n_{l,m}$ sont de la forme (25), (26) avec :

$$\begin{aligned} I_0 &= \frac{a^2 \Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} \int_{\mu_0}^{\infty} |g(\mu)| \operatorname{Sh} \mu (\mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2 d\mu \\ I_1 &= \frac{a^2 \Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} \int_{\mu_0}^{\infty} |g(\mu)| \operatorname{Sh} \mu (-1)^m \mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu) \mathbf{Q}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu) d\mu \quad (44) \\ I_2 &= \frac{a^2 \Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} \int_{\mu_0}^{\infty} |g(\mu)| \operatorname{Sh} \mu ((-1)^m \mathbf{Q}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2 d\mu. \end{aligned}$$

Si la fonction $a^2 g(\mu) (\mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2$ décroît, et puisque :

$$\left| \frac{d u_1(\mu)}{d \mu u_2(\mu)} \right| \leq \frac{\Gamma(l+m+1/2)}{\Gamma(l-m+1/2)} \frac{1}{\operatorname{Sh} \mu_0 [\mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu_0)]^2} < \infty, \quad (45)$$

la borne supérieure du deuxième type s'écrit :

$$n_{l,m} \leq \frac{2}{\pi} \frac{a\sqrt{v}}{\sqrt{\operatorname{Sh} \mu_0 \mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu_0)}} \int_{\mu_0}^{\infty} \sqrt{|v(\mu)| \operatorname{Sh} \mu \mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu)} d\mu + 1 \quad (46)$$

avec

$$g(\mu) = v(\mu) \quad (v > 0).$$

Enfin, la borne inférieure sur le nombre d'états liés s'écrit :

$$\begin{aligned} n_{l,m} \geq & \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left(\alpha \sqrt{v} \frac{\Gamma(l-m+1/2)}{\Gamma(l+m+1/2)} \frac{\mathbf{P}_{l-1/2}^m (\operatorname{Ch} \mu_0)}{(-1)^m \mathbf{Q}_{l-1/2}^m (\operatorname{Ch} \mu_0)} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{a\sqrt{v}}{\pi} \int_{\mu_0}^{\infty} \min \left(\frac{1}{\operatorname{Sh} \mu (\mathbf{Q}_{l-1/2}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2}, |v(\mu)| \operatorname{Sh} \mu (\mathbf{Q}_{l-1/2}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2 \right) d\mu \right\} \right\} \quad (47) \end{aligned}$$

ou bien :

$$n_{l,m} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{a\sqrt{v}}{\pi} \int_{\mu_0}^{\infty} \min \left(\frac{1}{\operatorname{Sh} \mu (\mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2}, |v(\mu)| \operatorname{Sh} \mu (\mathbf{P}_{l-\frac{1}{2}}^m (\operatorname{Ch} \mu))^2 \right) d\mu \right\} \right\} \quad (48)$$

4. APPLICATION : POTENTIEL CONSTANT

A) Coordonnées bisphériques

Il est intéressant de particulariser les conditions d'existence d'états liés pour un double puits de potentiel carré défini de la façon suivante :

$$V(\mu, \eta) \left\{ \begin{array}{lll} = -V_0 & \mu \geq \mu_+ > 0 & \mu \leq \mu_- < 0 \\ & V_0 > 0 & \\ = 0 & \mu_- < \mu < \mu_+. & \end{array} \right. \quad (49)$$

Ce potentiel n'engendre pas de « potentiel réduit » $g(\mu)$, aussi, doit-il être approché par les deux fonctions $V_1(\mu, \eta)$, $V_2(\mu, \eta)$ suivantes :

$$\begin{aligned} V_1(\mu, \eta) &= \frac{V(\mu, \eta)(\text{Ch } \mu - \cos \eta)^2}{(\text{Ch } \mu + 1)^2} \\ V_2(\mu, \eta) &= \frac{V(\mu, \eta)(\text{Ch } \mu - \cos \eta)^2}{(\text{Ch } \mu - 1)^2} \end{aligned} \quad (50)$$

et

$$V_2(\mu, \eta) \leq V(\mu, \eta) \leq V_1(\mu, \eta) < 0. \quad (51)$$

Les conditions d'existence et les bornes sur le nombre d'états liés sont alors calculées en sachant que si $V_1(\mu, \eta)$ (respect. $V(\mu, \eta)$) supporte n états liés, $V(\mu, \eta)$ (respect. $V_2(\mu, \eta)$) étant plus profond en supporte également n .

Les conditions nécessaires ou suffisantes (20), (21), (22), (23) et (24) s'écrivent donc pour l'état fondamental ($l = m = 0$) :

$$\text{BS}(0, 0) \Rightarrow \frac{2V_0 a^2}{(e^{\mu_+} - 1)^2} \geq 1 \quad (\text{impair, } \mu_- = -\mu_+) \quad (52)$$

$$\text{BS}(0, 0) \Rightarrow 2V_0 a^2 \left(\frac{1}{(e^{\mu_+} - 1)^2} + \frac{4}{3(e^{\mu_+} - 1)^3} \right) \geq 1 \quad (\text{pair, } \mu_- = -\mu_+) \quad (53)$$

$$\begin{aligned} \text{BS}(0, 0) \Rightarrow 4a^2 V_0 \left(\frac{1}{2(e^{\mu_+} - 1)^2} + \frac{1}{3(e^{\mu_+} - 1)^3} \right. \\ \left. + \frac{1}{2(e^{-\mu_-} - 1)^2} + \frac{1}{3(e^{-\mu_-} - 1)^3} \right) \geq 1 \quad (\text{asymétrique}) \end{aligned} \quad (54)$$

$$\text{Th} \left(\frac{\mu_+}{2} \right) \frac{4a^2 V_0}{3(1 + e^{\mu_+})^2} \geq 1 \Rightarrow \text{BS}(0, 0) \quad (\text{impair}) \quad (55)$$

$$\frac{4a^2 V_0}{3(1 + e^{\mu_+})^2} \geq 1 \Rightarrow \text{BS}(0, 0) \quad (\text{pair}) \quad (56)$$

Des trois bornes supérieures sur le nombre d'états liés (25), (26) et (31), la troisième est la meilleure pour des puits symétriques profonds (V_0 grand) car elle dépend de $\sqrt{V_0}$ au lieu de V_0 ; elle s'écrit pour l'état $l = m = 0$:

$$n_{0,0} \leq \frac{4a\sqrt{V_0}}{\pi(e^{\frac{1}{2}\mu_+} - e^{-\frac{1}{2}\mu_+})} \ln \left(\frac{e^{\frac{1}{2}\mu_+} + 1}{e^{\frac{1}{2}\mu_+} - 1} \right) + 1 \quad (\text{impair}) \quad (57)$$

$$n_{0,0} \leq \frac{8a\sqrt{V_0}}{\pi(e^{\mu_+} - 1)(e^{-\mu_+} + 1)} + 1. \quad (\text{pair}) \quad (58)$$

Il est malaisé de choisir l'un ou l'autre type de borne inférieure tant leurs expressions diffèrent; il faudra dans chaque cas particulier choisir la relation

donnant la meilleure borne, c'est-à-dire la plus grande. Les inégalités du premier type (32) s'écrivent pour l'état $l = m = 0$.

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{tg} (a\sqrt{V_0}(e^{\mu^+} - 1)) + \frac{4a\sqrt{V_0}}{3\pi} \frac{1}{(e^{\mu^+} + 1)^3} \right\} \right\} \quad (\text{impair}) \quad (59)$$

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arc} \operatorname{tg} (a\sqrt{V_0}(e^{\mu^+} + 1)) + \frac{4a\sqrt{V_0}}{3\pi} \frac{2}{(e^{\mu^+} + 1)^3} \right\} \right\} \quad (\text{pair}) \quad (60)$$

Pour un potentiel de portée asymétrique, suivant la valeur du μ_- deux expressions différentes existent pour la borne inférieure du premier type :

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{4a\sqrt{V_0}}{3\pi} \frac{1}{(e^{\mu^+} + 1)^3} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi} e^{\mu^-} \right\} \right\} \quad (\text{asymétrique, } \mu_- < \mu^* = \ln(\sqrt{2} - 1)) \quad (61)$$

ou bien

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{4a\sqrt{V_0}}{3\pi} \frac{1}{(e^{\mu^+} + 1)^3} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi} \left(\sqrt{2} - 1 + \frac{4}{3(e^{\mu^+} + 1)^3} - \frac{4}{3(e^{\mu^-} + 1)^3} \right) \right\} \right\} \quad (\text{asymétrique } \mu^* < \mu_-) \quad (62)$$

Signalons que μ^* est la seule solution négative de

$$e^{2\mu}(\operatorname{Ch} \mu + 1)^2 = 1.$$

Les bornes inférieures du deuxième type (33) prennent les formes suivantes pour l'état fondamental $l = m = 0$:

POTENTIEL DE PORTÉE SYMÉTRIQUE, CAS IMPAIR

$$n_{00} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi(e^{\mu^+} - 1)} \right\} \right\} \quad (63)$$

si

$$\mu_+ \geq \mu_* = \ln \left(\frac{\sqrt{2} + 1}{\sqrt{2} - 1} \right)$$

ou bien

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi} \left(\frac{1}{e^{\mu^*} - 1} - \frac{4(3e^{2\mu^*} + 1)}{3(e^{\mu^*} + 1)^3} + \frac{4(e^{2\mu^+} + 1)}{3(e^{\mu^+} + 1)^3} \right) \right\} \right\} \quad \text{si } \mu_+ < \mu_* \quad (64)$$

où μ_* est la solution positive unique de l'équation

$$\left(e^{\frac{\mu}{2}} - e^{-\frac{\mu}{2}} \right)^4 = (\operatorname{Ch} \mu + 1)^2;$$

POTENTIEL DE PORTÉE SYMÉTRIQUE, CAS PAIR

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi} \frac{1}{1 + e^{\mu_+}} \right\} \right\} \quad (65)$$

POTENTIEL DE PORTÉE ASYMÉTRIQUE

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{4a\sqrt{V_0}}{3\pi} \frac{1}{(1 + e^{-\mu_-})^3} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi} e^{-\mu_+} \right\} \right\}$$

si $\mu_+ \geq \mu_* = -\ln(\sqrt{2} - 1) > 0$ (66)

ou bien

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{4a\sqrt{V_0}}{3\pi} \frac{1}{(1 + e^{-\mu_-})^3} + \frac{a\sqrt{V_0}}{\pi} \left(\frac{4}{3(1 + e^{-\mu_*})^3} - \frac{4}{3(1 + e^{-\mu_+})^3} + \sqrt{2} - 1 \right) \right\} \right\} \quad \text{si } \mu_+ \leq \mu_* \quad (67)$$

où μ_* est la solution positive unique de l'équation

$$(\text{Ch } \mu + 1)^2 = e^{2\mu}$$

Il est déjà clair à ce stade-ci que les conditions pour un potentiel à portée asymétrique sont généralement moins bonnes que pour un potentiel à portée symétrique. En effet, si les deux sphères deviennent identiques,

$$\mu_- = -\mu_+, \quad (68)$$

et l'implication (54) devient :

$$\text{BS}(0, 0) \Rightarrow 2a^2 V_0 \left(\frac{2}{(e^{\mu_+} - 1)^2} + \frac{4}{3(e^{\mu_+} - 1)^3} \right) \geq 1. \quad (69)$$

Cette inégalité est, de façon évidente, moins contraignante que (52) et (53). Une remarque semblable pourra être faite au moment du passage asymptotique de la condition nécessaire.

Il est en effet intéressant de voir ce que deviennent toutes ces relations lorsque les deux sphères sont très éloignées l'une de l'autre (c'est-à-dire $\mu_- \rightarrow -\infty$ et $\mu_+ \rightarrow +\infty$). Dans cette hypothèse, la relation

$$\text{Ch } \mu = \frac{d}{R} \quad (70)$$

se réduit simplement à

$$e^{\mu_+} \simeq \frac{2d}{R} \simeq \frac{2a}{R} \quad (71)$$

Il n'y a plus aucune distinction entre les solutions paires et impaires, ni même entre le potentiel à portée symétrique et asymétrique; on pourrait s'attendre aussi à retrouver les conditions connues d'un potentiel constant dans une seule sphère de rayon R puisque, les sphères étant infiniment

distantes, elles n'influent plus l'une sur l'autre. Cependant, ces constatations ne se retrouvent pas toujours dans les expressions asymptotiques des résultats (52) à (67).

Les conditions nécessaires ou suffisantes (52), (53), (55), (56) dans le cas symétrique se réduisent asymptotiquement aux conditions nécessaires ou suffisantes obtenues pour un potentiel constant agissant dans une sphère de rayon R [5] [6] :

$$BS(0, 0) \Rightarrow V_0 R^2 > 2 \quad (72)$$

$$V_0 R^2 > 3 \Rightarrow BS(0, 0), \quad (73)$$

tandis que la condition nécessaire dans le cas asymétrique (54) devient

$$BS(0, 0) \Rightarrow V_0 R^2 > 1. \quad (74)$$

Des bornes supérieures et inférieures sur le nombre d'états liés, aucune ne se ramène aux bornes pour une seule sphère de rayon R [7] :

$$n_{0,0} \leq \frac{2\sqrt{V_0 R}}{\pi} \quad (75)$$

$$n_{0,0} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{V_0 R}}{\pi} \right\} \right\} \quad (76)$$

mais elles ne les contredisent pas. En effet, les bornes supérieures (57) et (58) donnent la borne asymptotique

$$n_{0,0} \leq \frac{4\sqrt{V_0 R}}{\pi} + 1 \quad (77)$$

Dans le cas symétrique, les bornes inférieures du premier type (59 et (60) se réduisent trivialement à :

$$n_{00} \geq 0, \quad (78)$$

et celle du deuxième type

$$n_{00} \geq \left\{ \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{V_0 R}}{2\pi} \right\} \right\} \quad (79)$$

Les bornes (61) et (66) d'un potentiel asymétrique sont conceptuellement les mêmes, elles changent uniquement les rôles de μ_- et μ_+ ; elles se réduisent donc asymptotiquement à la même expression, qui dans ce cas est la même que pour un potentiel symétrique, c'est-à-dire (79).

B) Coordonnées toroidales

Un potentiel constant agissant dans le tore de surface $\mu = \mu_0 > 0$, c'est-à-dire

$$V(\mu, \eta) \begin{cases} = -V_0 & \mu \geq \mu_0, & V_0 > 0 \\ = 0 & 0 \leq \mu < \mu_0, \end{cases} \quad (80)$$

n'engendre pas non plus de « potentiel réduit » $g(\mu)$; il devra donc être approché par les mêmes fonctions $V_1(\mu, \eta)$ et $V_2(\mu, \eta)$ que dans le cas des coordonnées bisphériques. Cependant, les conditions d'existence d'états liés sont inextricables. Pour l'état $l = m = 0$ par exemple, elles se ramènent à des intégrales dans lesquelles interviennent des produits d'intégrales elliptiques complètes de première espèce étant donné les relations [15] :

$$\begin{aligned} P_{-1/2}(\text{Ch } \mu) &= \left[\frac{\pi}{2} \text{Ch } \frac{\mu}{2} \right]^{-1} K \left(\text{Th } \frac{\mu}{2} \right) \\ Q_{-1/2}(\text{Ch } \mu) &= 2e^{-\mu/2} K(e^{-\mu}). \end{aligned} \quad (81)$$

Ce cas ne sera pas étudié ici.

6. CONCLUSIONS

Étant donné les difficultés de calculer analytiquement les états liés d'un potentiel bisphérique ou toroidal, il est utile de savoir *a priori* si le potentiel supporte ou pas des états liés de nombres quantiques (l, m) donnés, et, dans l'affirmative, de connaître des limites sur ce nombre d'états liés. Notons par exemple, que l'équation de Schrödinger radiale en coordonnées bisphériques a comme solutions des fonctions de Heun confluentes (non encore tabulées) pour des potentiels réduits $g(\mu)$ constants.

En coordonnées bisphériques, les solutions de l'équation radiale sont indépendantes du nombre quantique m ; m et l étant liés par la relation $|m| \leq l$, chaque état l d'énergie nulle est dégénéré $(2l + 1)$ fois. En coordonnées toroidales par contre, l'équation radiale dépend des nombres quantiques l et m qui sont indépendants l'un de l'autre.

Les fonctions $P_{|l|-\frac{1}{2}}^{|m|}(z)$ et $Q_{|l|-\frac{1}{2}}^{|m|}(z)$ sont liées aux fonctions $P_{-|l|-1/2}^{|m|}(z)$, $P_{|l|-\frac{1}{2}}^{-|m|}(z)$, $Q_{-|l|-1/2}^{|m|}(z)$ et $Q_{|l|-\frac{1}{2}}^{-|m|}(z)$ par les relations [15]

$$\begin{aligned} P_{-|l|-1/2}^{|m|}(z) &= P_{|l|-\frac{1}{2}}^{|m|}(z) \\ Q_{-|l|-1/2}^{|m|}(z) &= Q_{|l|-\frac{1}{2}}^{|m|}(z) \\ P_{|l|-\frac{1}{2}}^{-|m|}(z) &= \frac{\Gamma(|l| - |m| + 1/2)}{\Gamma(|l| + |m| + 1/2)} P_{|l|-\frac{1}{2}}^{|m|}(z) \\ Q_{|l|-\frac{1}{2}}^{-|m|}(z) &= \frac{\Gamma(|l| - |m| + 1/2)}{\Gamma(|l| + |m| + 1/2)} Q_{|l|-\frac{1}{2}}^{|m|}(z) \end{aligned} \quad (82)$$

Les conditions (42), (43) et les bornes (46) à (48) sont donc valables quel que soit le signe du nombre quantique m si m représente sa valeur absolue. L'état (l, m) d'énergie nulle est dégénéré 2 fois.

Un potentiel bisphérique ou toroidal quelconque $V(\mu)$ doit en fait être approché par les potentiels

$$V(\mu) \frac{(\text{Ch } \mu - \cos \eta)^2}{(\text{Ch } \mu \pm 1)^2} \quad (83)$$

et cette approximation est inévitable si l'on veut séparer les variables et donc ramener le problème à un problème unidimensionnel. L'étape suivante la plus naturelle consiste à calculer le spectre approché à partir de l'Hamiltonien construit avec les potentiels différences et avec les fonctions propres utilisées dans cet article.

Remarquons enfin que si les résultats obtenus en coordonnées bisphériques sont valables non seulement pour des distances entre les centres des sphères grandes par rapport à la portée des potentiels, mais aussi pour des centres proches, ils ne s'appliquent pas au cas de deux sphères tangentes. Le système de coordonnées doit alors être adapté à cette géométrie particulière [16]. Ceci fait l'objet d'une autre étude.

7. RÉFÉRENCES

- [1] A. RONVEAUX, M.-C. DUMONT-LEPAGE et R. GÉRARD, Potentiels sphéroïdaux pour l'équation de Schrödinger. I. Caractérisation d'un état lié. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, Section A, vol. **22**, n° 4, 1976, p. 291-304.
- [2] A. RONVEAUX et M.-C. DUMONT-LEPAGE, Potentiels sphéroïdaux pour l'équation de Schrödinger. II. Bornes sur le nombre d'états liés. *Ann. Inst. Henri Poincaré*, Section A, vol. **26**, n° 4, 1977, p. 333-342.
- [3] F. HUND, *Theorie des Aufbaues der Materie*, Verlagsgesellschaft, 1961.
- [4] A. RONVEAUX, *Nuovo Cimento*, t. **4**, 1972, p. 839.
- [5] R. JOST and A. PAIS, *Phys. Rev.*, t. **82**, 1951, p. 840.
- [6] F. CALOGERO, *Journ. Math. Phys.*, t. **6**, 1965, p. 161.
- [7] F. CALOGERO, *Comm. in Math. Phys.*, t. **1**, 1965, p. 80.
- [8] P. M. MORSE and H. FESHBACH, *Methods in Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953.
- [9] A. RONVEAUX, *C. R.*, t. **266**, série A, 1968, p. 306.
- [10] A. RONVEAUX, *Amer. Journ. Phys.*, vol. **40**, 1972, p. 882-892.
- [11] A. RONVEAUX, M.-C. DUMONT-LEPAGE, J. HABAY, Bounds on the Number of Poles of the Solution of a General Riccati Equation. *SIAM J. Math. Anal.*, vol. **8**, n° 6, 1977, p. 1038-1056.
- [12] L. ROBIN, *Fonctions sphériques de Legendre et fonctions sphéroïdales*, t. **3**, Gauthier-Villars, Paris, 1958.
- [13] W. MAGNUS, F. OBERHETTINGER and R. P. SONI, *Formula and theorems for the special functions of Mathematical Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1966.
- [14] E. W. HOBSON, *The theory of spherical and ellipsoidal harmonics*. Chelsea-Publishing Co., New York, 1965.
- [15] M. ABRAMOWITZ, I. A. STEGUN, *Handbook of Mathematical functions with formulas graphs and Mathematical tables*. US. Government Printing Office, Washington, 9^e ed., 1970.
- [16] N. N. LEBEDEV, *Special Functions and Applications*. Prentice-Hall, 1965.

(Manuscrit reçu le 8 février 1979)