ANNALES SCIENTIFIQUES DE L'É.N.S.

JEAN COLMEZ

Définition de l'opérateur *H* de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène

Annales scientifiques de l'É.N.S. 3e série, tome 72, nº 2 (1955), p. 111-149

<http://www.numdam.org/item?id=ASENS_1955_3_72_2_111_0>

DÉFINITION

DE

L'OPÉRATEUR H DE SCHRÖDINGER
POUR L'ATOME D'HYDROGÈNE

PAR M. JEAN COLMEZ.

INTRODUCTION [1].

D'après V. Neumann [II], les opérateurs de la mécanique quantique qui sont en général des opérateurs différentiels à coefficients variables, doivent être autoadjoints (hypermaximaux) dans l'espace $\mathcal{H}_{R^n}$ des fonctions de carré sommable de R^n.

Un opérateur A est autoadjoint dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ si :

1° L'ensemble D des éléments de $\mathcal{H}$ sur lesquels il est défini est dense dans $\mathcal{H}$;

2° Si, lorsqu'étant donné ψ il existe ψ_1 tel que

$$\langle A(\varphi), \psi \rangle = \langle \varphi, \psi_1 \rangle$$

quel que soit $\varphi \in D$, alors $\psi \in D$, et $A(\psi) = \psi_1$. L'opérateur est alors hermitique, c'est-à-dire si φ et $\psi \in D$,

$$\langle A(\varphi), \psi \rangle = \langle \varphi, A(\psi) \rangle.$$

Dans $\mathcal{H}_{R^n}$,

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int_{R^n} \varphi \overline{\psi}\, dx_1, dx_2, \ldots, dx_n.$$

En Mécanique quantique, on considère que l'opérateur A est défini sur un ensemble D_0 de fonctions suffisamment régulières (par exemple qui ont des dérivées continues au moins jusqu'à un ordre de dérivation égal à celui des dérivées qui figurent dans l'opérateur) tel que $A(\varphi)$ soit de carré sommable.

---

(1) Ce Mémoire constitue le développement d'une Note aux Comptes rendus de l'Académie des Sciences [Colmez, VI] (les chiffres romains renvoient à la liste bibliographique qui se trouve à la fin de ce Mémoire).

Le domaine D_0 n'étant pas en général assez étendu pour que A soit autoadjoint, on étend sa définition en le « fermant » [II]. L'opérateur ainsi étendu, fermeture de A, soit $\bar{A}$, est alors défini sur le domaine D des fonctions ψ qui sont limites de suites $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_p, \ldots$ (dans $\mathcal{H}_{R^n}$) telle que $A(\psi_p) \to \varphi$. Alors $\bar{A}(\psi) = \varphi$. Mais rien ne prouve en général que l'opérateur $\bar{A}$ est autoadjoint et l'on a des exemples d'opérateurs pour lesquels A n'est pas autoadjoint et même que l'on ne peut *étendre* de façon à les rendre autoadjoints quel que soit le procédé employé [II]. A vrai dire, on sait que si A est à coefficient constant ou même variable, mais suffisamment régulier en prenant comme domaine D_0, l'ensemble des fonctions suffisamment dérivables en tout point, la fermeture $\bar{A}$ de A est autoadjointe : la fonction $A(\varphi)$ est alors définie partout dans R^n et l'hermiticité indispensable de l'opérateur sur le domaine D_0 est assurée en particulier par la continuité de certaines dérivées.

Cependant si A $\left(\text{comme l'opérateur } H = \Delta + \frac{1}{r} \text{ de Schrödinger}\right)$ à des coefficients avec des singularités (singularité à l'origine) en certains points, la condition d'existence de φ ou des dérivées qui figurent dans A en ces points n'apparaît plus naturelle, d'autant que, pour l'opérateur H, certaines de ses fonctions propres (*voir* plus loin) n'ont pas de dérivées premières à l'origine et d'autres pas de dérivées secondes [VI] et que, de toute façon, la fonction $A(\varphi)$ ne serait pas définie partout. Il paraît plus indiqué de prendre comme domaine D_0, l'ensemble des fonctions φ pour lesquelles les dérivées qui figurent dans A sont continues sauf peut-être aux singularités de l'équation et telle que $A(\varphi)$ soit de carré sommable. C'est ce que l'on dit en général dans les traités de Physique théorique (souvent la définition donnée est encore plus vague [I]). *Mais on n'est plus assuré de l'hermiticité de* A : nous allons constater ce fait pour l'opérateur $H = \Delta + \frac{1}{r}$ ($r = OM$, distance de M à l'origine) dans l'espace R^3. Nous allons résoudre l'équation $H(\varphi) = \lambda\varphi$ dans le domaine D_0 des fonctions au moins deux fois continuement dérivables, sauf peut-être à l'origine. *Dans ce domaine* ([2]), outre les fonctions d'ondes classiques (qui ont fait le succès de la Mécanique ondulatoire), nous allons trouver une famille non dénombrable de solutions [VI], ce qui est impossible avec un opérateur hermitique (famille abhérrente).

J'ai conduit cette résolution d'*une façon aussi élémentaire que possible*, compte tenu de la rigueur mathématique, car, dans les Traités de physique [I], on se contente de trouver les fonctions d'onde sans s'assurer s'il y en a d'autres (on impose d'ailleurs aux fonctions cherchées d'être *bornées*, condition *a priori* totalement étrangère au problème).

([2]) *A priori*, il pourrait se faire qu'il y ait d'autres solutions $\notin D_0$ mais au domaine D de définition de la fermeture.

PREMIÈRE PARTIE.

Résolution de l'équation I : $H(\varphi) = \lambda\varphi$.

D'après ce qui précède, nous cherchons $\varphi(x, y, z) \in \mathcal{H}_{R^3}$ possédant des dérivées premières et secondes continues, sauf peut-être à l'origine.

Posons

$$\varphi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \omega), \qquad \text{où} \qquad \begin{cases} x = r\sin\theta\cos\omega \\ y = r\sin\theta\sin\omega \\ z = r\cos\theta \end{cases} \qquad (r \geqq 0).$$

$\psi(r, \theta, \omega)$ est deux fois continuement dérivable en r, θ, ω, sauf peut-être pour $r = 0$. Nous la considérerons comme fonction définie sur la sphère S_2 de rayon 1 centrée à l'origine (coordonnées θ et ω) dépendant du paramètre r

$$H(\varphi) = \Delta\varphi + \frac{\varphi}{r} = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\psi}{r} + \frac{1}{r^2}\Delta_{S_2}(\psi),$$

où $\Delta_{S_2}(\psi)$ est le laplacien de ψ sur S_2, c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\omega^2}.$$

Δ_{S_2} opérateur agissant dans $\mathcal{H}_{S_2}$ espace des fonctions de carré sommable sur la sphère S_2 avec la mesure ordinaire $d\sigma = \sin\theta\, d\theta\, d\omega$ possède un système orthonormal complet de fonctions propres qui sont des fonctions sphériques : soit $S_{l,m}(\theta, \omega)$ la fonction égale à

$$S_{l,m}(\theta, \omega) = k_{l,m}\, e^{im\omega} \sin\theta^{|m|} \frac{d^{l+|m|}}{d\cos\theta^{l+|m|}}[(1 - \cos^2\theta)^l],$$

où m est un entier $\gtreqless 0$, avec $|m| \leqq l$ entier $\geqq 0$, $k_{l,m}$ une constante telle que

$$\int_{S_2} |S_{l,m}|^2\, d\sigma = 1;$$

$S_{l,m}(\theta, \omega)$ est une des fonctions propres relatives à la valeur propre $-l(l+1)$ de Δ_{S_2}, c'est-à-dire vérifie l'équation

$$\Delta_{S_2}(S_{l,m}) + l(l+1)S_{l,m} = 0$$

et l'ensemble des $S_{l,m}$ forme un système orthonormal complet dans $\mathcal{H}_{S_2}$.

Posons

$$R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi(r, \theta, \omega)\overline{S}_{l,m}(\theta, \omega)\, d\sigma,$$

fonction de r au moins deux fois continuement dérivable. Nous avons

$$\int_{S_2} \Delta\psi\, \overline{S}_{l,m}\, d\sigma = \int_{S_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \psi \right) \overline{S}_{l,m}\, d\sigma,$$

mais comme

$$\int_{S_2} \Delta_{S_2}(\psi) \overline{S}_{l,m}\, d\sigma = \int_{S_2} \psi\, \Delta_{S_2}(\overline{S}_{l,m})\, d\sigma,$$

$$\int_{S_2} \Delta\psi\, \overline{S}_{l,m}\, d\sigma = \int_{S_2} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \psi \right] S_{l,m}\, d\sigma$$

$$= \frac{d^2}{dr^2} R_{l,m} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R_{l,m} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{l,m}.$$

Si φ vérifie l'équation (I), alors $R_{l,m}(r)$ vérifie l'équation (II)

$$\frac{d^2}{dr^2} R_{l,m} + \frac{2}{r} \frac{dR_{l,m}}{dr} + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \lambda \right) R_{l,m} = 0;$$

d'autre part, $\varphi \in \mathcal{H}_{R^3}$, donc

$$\int_{R^3} |\varphi|^2\, dx\, dy\, dz = \int_0^{+\infty} r^2 \left(\int_{S_2} |\psi|^2\, d\sigma \right) dr,$$

or

$$|R_{l,m}(r)|^2 = \left| \int_{S_2} \psi \overline{S}_{l,m}\, d\sigma \right|^2 \leq \int_{S_2} |\psi|^2\, d\sigma \int_{S_2} |S_{l,m}|^2\, d\sigma = \int_{S_2} |\psi|^2\, d\sigma,$$

donc

$$\int_0^{+\infty} r^2 |R_{l,m}(r)|^2\, dr \leq \int_0^{+\infty} r^2 \left(\int_{S_2} |\psi|^2\, d\sigma \right) dr = \int_{R^3} |\varphi|^2\, dx\, dy\, dz.$$

Donc $rR_{l,m}(r)$ *doit être de carré sommable de* 0 à $+\infty$. Cherchons les solutions de (II) qui vérifie cette condition : (II) est du type de Fuchs et son équation caractéristique est

$$\alpha(\alpha - 1) + 2\alpha - l(l+1) = 0$$

qui a pour solution

$$\alpha = l \qquad \text{et} \qquad \alpha = -(l+1),$$

Il y a donc une solution qui s'écrit $r^l E(r)$ [avec $E(0) \neq 0$], où $E(r)$ est une fonction entière et la solution générale est

$$k_1 \left[\frac{F(r)}{r^{l+1}} + G(r) \operatorname{Log}(r) \right] + k_2 r^l E(r),$$

avec $F(0) \neq 0$, $F(r)$ et $G(r)$ [3] étant développable en série entière à l'origine. Donc, si $l \neq 0$, $R_{l,m}(r)$ ne peut être (à une constante multiplicative près) ou qu'égale à la solution régulière $r^l E(r)$ que nous désignerons dans la suite

(3) $G(r)$ étant, éventuellement, identiquement nulle.

par $R_l(r)$ ou bien identiquement nulle. Si $l=0$, $R_{0,0}(r)$ peut être *a priori* n'importe laquelle des solutions de (II). Nous désignerons par $R_0(r)$ la solution régulière à l'origine et $R_0^1(r)$ une *autre* solution (non $\equiv 0$).

Posons

$$Z_l(r)=r^{l+1}R_l(r), \qquad Z_0^1(r)=rR_0^1(r)$$

qui est bornée à l'origine; $Z_l(r)$ et $Z_0^1(r)$ vérifient alors l'équation (III)

$$r\frac{d^2}{dr^2}Z_l-2l\frac{dZ_l}{dr}+(1-\lambda r)Z_l=0.$$

Utilisation de la transformation de Laplace. — L'intégrale de Laplace

$$s_l(t)=\int_0^{+\infty}e^{-rt}Z_l(r)\,dr \qquad \text{ou} \qquad s_0^1(t)=\int_0^{+\infty}e^{-rt}Z_0^1(r)\,dr$$

existe, si t est complexe de partie réelle $\mathcal{R}(t)>0$, à condition que $rR_l(r)$, où $rR_0^1(r)$ soit de carré sommable. De même $\int_0^{+\infty}e^{-rt}r^pZ_l(r)\,dr$, où $\int_0^{+\infty}e^{-rt}r^pZ_0^1(r)\,dr$ existe quel que soit p; $s_l(t)$ et $s_0^1(t)$ sont alors holomorphes pour $\mathcal{R}(t)>0$.

Comme

$$Z_l(r)=r^{l+1}R_l(r), \qquad T_l(t)=\int_0^{+\infty}r\,R_l(r)\,e^{-rt}\,dr$$

est une primitive $l^{\text{ième}}$ de $s_l(t)$. Si $rR_l(r)$, où $R_0^1(r)$ est de carré sommable, le prolongement sur l'axe imaginaire de $T_l(t)$ ou de $s_0^1(t)$, fonction holomorphe pour $\mathcal{R}(t)>0$, *doit être de carré sommable sur l'axe imaginaire* [V].

Dans les mêmes hypothèses, puisque $R_l(r)$ ou $R_0^1(r)$ vérifie l'équation (II),

$$\int_0^{+\infty}\left(r\frac{d^2Z_l}{dr^2}-2l\frac{dZ_l}{dr}\right)e^{-rt}\,dr,$$

ainsi que

$$\int_0^{+\infty}r\frac{d^2Z_0^1}{dr^2}e^{-rt}\,dr$$

existent et sont égales respectivement à

$$\int_0^{+\infty}(\lambda r-1)\,e^{-rt}Z_l\,dr \qquad \text{et} \qquad \int_0^{+\infty}(\lambda r-1)\,e^{-rt}Z_0^1\,dr.$$

Nous avons, en intégrant par partie, A étant un nombre positif

$$\int_0^{A}\left(r\frac{d^2Z_l}{dr^2}-2lr\frac{dZ_l}{dr}\right)e^{-rt}\,dr$$
$$=\left[\left\{r\frac{dZ_l}{dr}+[rt-(2l+1)]Z_l\right\}e^{-rt}\right]_0^A+t^2\int_0^A rZ_l\,e^{-rt}\,dr-2(l+1)t\int_0^A Z_l\,e^{-rt}\,dr$$

donc si $A \to +\infty$, puisque les intégrales existent,

$$\left\{ r\frac{dZ_l}{dr} + [rt - (2l+1)]Z_l \right\} e^{-rt}$$

a une limite finie $L(t)$ à l'infini.

Posons $t = t_0 + h$, $\mathcal{R}(t) > 0$, $h > 0$: comme

$$\left[r\frac{dZ_l}{dr} + [rt_0 - (2l+1)]Z_l \right] e^{-rt_0} \to L(t_0),$$

nous voyons que

$$\left[r\frac{dZ_l}{dr} + rt_0 - (2l+1)Z_l \right] e^{-rt_0} e^{-rh} \to 0,$$

donc que $r^h Z_l e^{-rt}$ tend vers une limite finie et comme cette expression peut s'écrire $Zr^h e^{-rt_0} e^{-rh}$ cette limite est nulle. Donc

$$\left\{ r\frac{dZ_l}{dr} + [rt - (2l+1)]Z_l \right\} e^{-rt} \to 0 \qquad \text{si} \quad r \to +\infty.$$

Nous avons donc

$$\int_0^{+\infty} \left(r\frac{d^2 Z_l}{dr^2} - 2lr\frac{dZ_l}{dr} \right) e^{-rt}\, dr$$
$$= -\left\{ r\frac{dZ_l}{dr} + [rt - (2l+1)]Z_l \right\}_0 + t^2 \int_0^{+\infty} rZ_l e^{-rt}\, dt - 2(l+1)t \int_0^{+\infty} e^{-rt} Z_l\, dr.$$

Le calcul que nous venons de faire est valable pour Z_0^1. Pour la valeur $r = 0$, l'expression intégrée est nulle pour Z_l [qui est égal à $r^{l+1}E(r)$], n'est pas nulle pour Z_0^1 [qui est égale à $F(r) + rG(r)\operatorname{Log}(r)$] mais est égale à $-2F(0)$, avec $F(0) \neq 0$ ([4]).

Donc finalement

$$\int_0^{+\infty} \left[r\frac{d^2}{dr^2}(Z_l) - 2lr\frac{d}{dr}Z_l + (1 - \lambda r)Z_l \right] e^{-rt}\, dr$$
$$= (t^2 - \lambda)\int_0^{+\infty} rZ_l e^{-rt}\, dr + [1 - 2(l+1)t]\int_0^{+\infty} Z_l e^{-rt}\, dr$$

et

$$\int_0^{+\infty} \left[r\frac{d^2 Z_0^1}{dr^2} + (1 - \lambda r)Z_0^1 \right] e^{-rt}\, dr$$
$$= -2F(0) + (t^2 - \lambda)\int_0^{+\infty} rZ_0^1 e^{-rt}\, dr + (1 - 2t)\int_0^{+\infty} Z_0^1 e^{-rt}\, dr;$$

les intégrales s'expriment à l'aide de $s_l(t)$, $s_l'(t)$, $[s_0^1(t), s_0^{1\prime}(t)]$; donc $s_l(t)$

([4]) Si l'on impose aux fonctions cherchées d'*être bornées*, cette solution disparaît étant donné sa singularité à l'origine.

et $s_0^1(t)$ vérifient les équations (IV) et (IV$_0$) respectivement

$$(t^2-\lambda)\frac{ds_l}{dt}+[2(l+1)t-1]s_l=0,$$

$$(t^2-\lambda)\frac{ds_0^1}{dt}+(2t-1)s_0^1=1$$

(en choisissant convenablement la constante multiplicative) et si $R_l(r)$ et $R_0^1(r)$ conviennent, $s_l(t)$ et $s_0^1(t)$ doit être holomorphe pour $\mathcal{R}(t)>0$ et une de leur primitive $l^{\text{ième}}$ a un prolongement à l'axe imaginaire de carré sommable sur cet axe. Étudions les singularités des solutions (IV) et (IV$_0$). Il faut discuter suivant le signe de λ.

1° $\lambda<0$, $\lambda=-k^2$, $k>0$:

$$(t^2+k^2)\frac{ds_l}{dt}+[2(l+1)t-1]s_l=0,$$

$$(t^2+k^2)\frac{ds_0^1}{dt}+(2t-1)s_0^1=1,$$

singularité possible en $t=ik$ et $t=-ik$. On pose $t=ik+h$, les équations deviennent

$$(h+2ik)h\frac{ds_l}{dh}+[2(l+1)h+2(l+1)ik-1]s_l=0,$$

$$(h+2ik)h\frac{ds_0^1}{dt}+(2h+2ik-1)s_0^1=1.$$

Pour l'équation homogène, on cherche un développement du type

$$h^\alpha[a_0+a_1h+\ldots+a_nh^n+\ldots]=s_l(t).$$

On trouve

$$a_0[2(l+1)ik-1]+2ik\alpha a_0=0, \qquad \text{donc} \quad \alpha=\frac{1}{2ik}-(l+1)$$

et la relation de récurrence

$$(2ikn+1)a_n+\left(l+n+\frac{1}{2ik}\right)a_{n-1}=0$$

qui définit un développement convergent au voisinage de $h=0$, les $l^{\text{ièmes}}$ primitives s'écrivent donc

$$h^{\frac{1}{2ik}}\left[\frac{b_0}{h}+b_1+\ldots+b_nh^{n-1}+\ldots\right]+Q_{l-1}(h),$$

où $Q_{l-1}(h)$ est un polynome de degré $l-1$, $b_0\neq 0$ quelle que soit la détermination choisie pour $h^{\frac{1}{2ik}}$; pour $\mathcal{R}(t)>0$ le module de cette fonction n'est pas de *carré sommable sur l'axe imaginaire* au voisinage de $t=ik$. Donc $R_l(r)$ ne vérifiant pas toutes les conditions imposées à $R_{l,m}(r)$,

$$R_{l,m}(r)\equiv 0 \qquad \text{si} \quad l\neq 0.$$

Cherchons à l'équation (IV_0) un développement régulier en $h = 0$

$$s_0^1(t) = a_0 + a_1 h + \ldots + a_n h^n + \ldots.$$

Nous avons

$$a_0[2ik - 1] = 1, \qquad a_0 = \frac{1}{2ik - 1}$$

et la relation de récurrence

$$[2ik(n+1) - 1]a_n + (n+1)a_{n-1} = 0$$

qui définit un développement convergent pour $|h| < 2k$. Il y a donc une solution régulière pour (IV_0), les autres étant singulières avec la même singularité que les solutions de l'équation homogène. Mais cette solution régulière en $t = ik$ n'ayant pas un rayon de convergence infini est singulière en $t = -ik$ et comme les deux pôles jouent des rôles symétriques, a la même singularité en $t = -ik$ que les solutions de l'équation homogène. Donc $s_0^1(t)$ ne peut vérifier les conditions imposées. Donc $R_{0,0}(r) = 0$ également.

2° $\lambda = 0$; les équations s'écrivent :

$$t^2 \frac{ds_l}{dt} + [2(l+1)t - 1]s_l = 0,$$

$$t^2 \frac{ds_0^1}{dt} + (2t - 1)s_0^1 = 1.$$

L'équation homogène a pour solution

$$\frac{e^{-\frac{1}{t}}}{t^{2(l+1)}} = s_l(t).$$

On peut montrer par récurrence que $s_l(t)$ est la $(2l+1)^{\text{ième}}$ dérivée de $e^{-\frac{1}{t}}t^{2l}$, d'où il résulte que les $l^{\text{ièmes}}$ primitives de $s_l(t)$ s'écrivent :

$$\frac{d^{l+1}}{dt^{l+1}}\left(e^{-\frac{1}{t}}t^{2l}\right) + Q_{l-1}(t) \quad \text{(polynome de degré } l-1\text{)}.$$

Or, par récurrence également, on montre que $\frac{d^p}{dt^p}\left(e^{-\frac{1}{t}}t^{2l}\right) = t^{2(l-p)}P_p(t)$, où $P_p(t)$ est un polynome qui ne s'annule pas pour $t = 0$, d'où

$$T_l(t) = \frac{e^{-\frac{1}{t}}P_{l+1}(t)}{t^2} + Q_{l-1}(t), \qquad \text{où} \quad P_{l+1}(0) \neq 0.$$

Cette fonction n'est pas de carré sommable au voisinage de l'origine sur l'axe imaginaire. Donc $R_{l,m}(r) = 0$ si $l \neq 0$. L'équation non homogène a pour solution :

$$\left(\int e^{\frac{1}{t}}\,dt\right)\frac{e^{-\frac{1}{t}}}{t^2}, \qquad [\mathcal{R}(t) > 0].$$

Si C est un cercle de rayon $\rho > 0$, entourant l'origine

$$\int_{C} e^{\frac{1}{t}}\,dt = 2i\pi.$$

D'autre part dans la région $\mathcal{R}(t) \leqq 0$, $e^{\frac{1}{t}}$ reste bornée et si C_2 est le demi-cercle de C dans la région $\mathcal{R}(t) \leqq 0$, $\int_{C_2} e^{\frac{1}{t}}\,dt \to 0$, avec ρ; donc

$$\int_{C_1} e^{\frac{1}{t}}\,dt \to 2i\pi,$$

si C_1 est le demi-cercle dans la région $\mathcal{R}(t) > 0$. D'autre part sur l'axe imaginaire $e^{\frac{1}{t}}$ est sommable au voisinage de l'origine. Donc si $y = -\rho \to 0$, une primitive quelconque de $e^{\frac{1}{t}}$ tend vers une limite finie A [limite de $A(y) = A(-\rho)$, valeur de cette primitive pour $y = -\rho$]. Nous devons prendre la primitive holomorphe pour $\mathcal{R}(t) \geqq 0$, donc

$$A(\rho) = A(-\rho) + \int_{C_1} e^{\frac{1}{t}}\,dt$$

[$A(\rho)$, valeur de la primitive pour $y = \rho$], donc

$$A(\rho) \to A + 2i\pi.$$

Donc aucune solution de (IV_0) n'est de carré sommable au voisinage de l'origine sur l'axe imaginaire, puisque pour $y = \rho$ elle a la valeur

$$[A(\rho) + 2i\pi]\frac{e^{\frac{i}{\rho}}}{\rho_2}$$

et pour $y = -\rho$ la valeur

$$[A(-\rho)] + \frac{e^{-\frac{i}{\rho}}}{\rho^2},$$

A et $A + 2i\pi$ ne pouvant être nuls à la fois. Donc si $\lambda = 0$, $R_{0,0}(r) = 0$.

3° $\lambda > 0$; les équations sont, si l'on pose $\sqrt{\lambda} = k$,

$$(t^2 - k^2)\frac{ds_l}{dt} + [2(l+1)t - 1]s_l = 0,$$

$$(t^2 - k^2)\frac{ds_0^1}{dt} + (2t - 1)s_0^1 = 1.$$

Comme $s_l(t)$ ou $s_0^1(t)$ doivent être holomorphes, pour $t = k$ le point $t = k$ doit être régulier et une solution doit avoir un développement convergent du type $h^p[a_0 + \ldots + a_n h^n + \ldots]$ au voisinage de $h = 0$ si $t = k + h$, p entier $\geqq 0$.

Les équations s'écrivent :

$$(2k+h)h\frac{ds_l}{dt}+[2(l+1)h+2(l+1)k-1]s_l=0,$$

$$(2k+h)h\frac{ds_0^1}{dt}+(2h+2k-1)s_0^1=1.$$

Pour l'équation homogène, nous avons

$$a_0[2(l+1)k-1)+2pka_0=0, \qquad \text{donc} \quad 2(l+1+p)k-1=0,$$

c'est-à-dire

$$k=\frac{1}{2n}, \qquad \text{où} \quad n=l+p+1 \qquad (n\geqq l+1).$$

Donc il *faut* que

$$\lambda=\frac{1}{4n^2}, \qquad n\geqq 1 \qquad \text{et} \qquad l\leqq n-1$$

pour que $R_l(r)$ satisfasse aux conditions imposées. Donc si $\lambda\neq\frac{1}{4n^2}$,

$$R_{l,m}(r)\equiv 0 \qquad \text{pour} \quad l\neq 0;$$

si $\lambda=\frac{1}{4n^2}$ et $l\geqq n-1$,

$$R_{l,m}(r)=0,$$

mais si $l\leqq n-1$, *il est possible* a priori *que*

$$R_{l,m}(r)=R_l(r),$$

solution *régulière* de (II) à l'origine.

Pour l'équation non homogène, la solution régulière si elle existe, doit s'écrire

$$a_0+a_1h+\ldots+a_nh^n+\ldots,$$

ce qui donne

$$a_0=\frac{1}{2k-1}$$

et la relation de récurrence

$$[2(n+1)k-1]a_n+(n+1)a_{n-1}=0$$

qui donne en général un développement convergent, non identiquement nul, à moins que le coefficient d'un a_n soit nul, c'est-à-dire $k=\frac{1}{2n}$ pour un $n\geqq 1$, car alors a_0 dévrait être nul, ce qui est impossible d'après (IV_0). Donc si $k=\frac{1}{2n}$, c'est-à-dire $\lambda=\frac{1}{4n^2}$, $R_{0,0}(r)$ ne peut être égale à $R_0^1(r)$. *Au contraire, si* $\lambda\neq\frac{1}{4n^2}$,

$$R_{l,m}(r)=0, \qquad \text{si} \quad l\neq 0,$$

mais $R_{0,0}(r)$ peut être égale à une solution $R_0^1(r)$ *a priori* (qui, d'après ce que nous voyons, est *unique* à une constante multiplicative près en remplaçant le nombre 1 au deuxième membre de (IV_0) par une constante quelconque).

Réciproque. — Les propriétés de la transformation de Laplace nous permettent d'affirmer que si $\lambda = \frac{1}{4n^2}$, l'équation (II) a alors pour $l \geqq 0$ sa solution régulière à l'origine qui est à décroissance rapide à l'infini, donc convient effectivement pour $R_{l,m}(r)$ et pour $l=0$, $\lambda \neq \frac{1}{4n^2}$ une solution non régulière à l'origine qui est à décroissance rapide et qui convient pour $R_{0,0}(r)$. Mais nous allons le voir en explicitant effectivement ces solutions.

Calcul des solutions. — Si $\lambda = \frac{1}{4n^2}$, $s_l(t)$ est solution de

$$\left(t^2 - \frac{1}{4n^2}\right)\frac{ds_l}{dt} + [2(l+1)t - 1]s_l = 0,$$

ce qui donne

$$s_l(t) = \frac{\left(t - \frac{1}{2n}\right)^{n-(l+1)}}{\left(t + \frac{1}{2n}\right)^{n+l+1}}$$

si $\lambda \neq \frac{1}{4n^2}$, $s_0^1(t)$ est solution de

$$(t^2 - k^2)\frac{ds_0^1}{dt} + (2t-1)s_0^1 = 1,$$

ce qui donne $s_0^1(t)$ de la forme

$$\left[\int \left(\frac{t-k}{t+k}\right)^{-\frac{1}{2k}} dt\right]\left(\frac{t-k}{t+k}\right)^{\frac{1}{2k}} \frac{1}{t^2-k^2},$$

une de ces primitives étant régulière en $t=k$. Désignons dans ce qui suit $s_l(t)$ ou $s_0^1(t)$ par $s(t)$. On voit que $s(t)$ possède une primitive $l^{\text{ième}}$ $T(t)$ de carré sommable sur l'axe imaginaire, que $s'(t)$, $ts''(t)$, $t^2 s'''(t)$ sont sommables sur cet axe. Dans ces conditions, si l'on pose

$$Z(r) = \int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{rt} s(t)\, dt,$$

on a

$$\frac{Z(r)}{r^l} = (-1)^l \int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{rt}\, T(t)\, dt$$

et

$$Z(r) = -\frac{1}{r}\int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{rt} s'\, dt = \frac{1}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{rt} s''\, dt = -\frac{1}{r^3}\int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{rt} s'''\, dt$$

et

$$Z'(r) = \frac{2}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} s' e^{rt}\, dt + \frac{1}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} ts'' e^{rt}\, dt,$$

$$rZ''(r) = -\frac{6}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} s' e^{rt}\, dt - \frac{6}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} s'' t\, e^{rt}\, dt - \frac{1}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} t^2 s''' e^{rt}\, dt$$

(obtenus par dérivation sous le signe somme et intégration par partie). Donc

$$\begin{aligned} & rZ'' - 2lZ' + (1-\lambda r)Z \\ & \quad = -\frac{1}{r^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{rt}\{(t^2-\lambda)s''' + [2(l+3)t-1]s'' + 2(2l+3)s\}\,dt. \end{aligned}$$

Or le crochet peut s'obtenir en dérivant deux fois le premier membre de l'équation (IV) ou (IV_0), il est donc identiquement nul. Donc Z vérifie l'équation (III). $\frac{Z}{r_l}$ est de carré sommable comme *transformée de Fourier* de $T(iy)$ qui est de carré sommable comme fonction de y. Donc

$$Z = Z_{l,m}\left(R_{l,m} = \frac{Z}{r^{l+1}}\right) \qquad \text{si} \quad \left\{\begin{array}{l} l \leqq n-1, \\ \lambda = \dfrac{1}{4n^2}; \end{array}\right.$$

$$Z = Z_{0,0}(r) = rR_{0,0}(r) \qquad \text{si} \quad \lambda \neq \frac{1}{4n^2}$$

(tout ceci a une constante multiplicative près).

Utilisons les fonctions de Laguerre

$$\mathcal{L}_{p,q}(kr) = k^{q-1}\int_{-i\infty}^{+i\infty}\left(\frac{t-k}{t+k}\right)^p \frac{e^{rt}\,dt}{(t+k)^q};$$

$\mathcal{L}_{p,q}(kr)$ s'obtient par un calcul de résidu immédiat et l'on a

$$\mathcal{L}_{p,q}(kr) = 2i\pi\, e^{-kr}(kr)^{q-1}\left[\frac{1}{(q-1)!} + \ldots + \frac{C_p^\mu(-2kr)^\mu}{(q+\mu-1)!} + \ldots + \frac{(-2kr)^p}{(p+q-1)!}\right].$$

On peut remarquer qu'à une constante près

$$\mathcal{L}_{p,q}(r) = e^r \frac{d^p}{dr^p}(e^{-2r} r^{p+q-1}).$$

Posons

$$\mathcal{L}_{p,q}(r) = 2i\pi\, e^{-kr}(kr)^{q-1} L_{p,q}(kr),$$

où

$$L_{p,q}(r) = \left[\frac{1}{(q-1)!} + \ldots + \frac{(-2r)^p}{(p+q-1)!}\right]$$

est un polynome de Laguerre (de degré p).

Alors

$$Z_{l,m} = \mathcal{L}_{n-(l+1),\,2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right) = 2i\pi\, e^{-\frac{r}{2n}}\left(\frac{r}{2n}\right)^{2l+1} L_{n-(l+1),\,2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right)$$

et

$$R_{l,m}(r) = e^{-\frac{r}{2n}} r^l L_{n-(l+1),\,2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right) \quad (5) \qquad \text{si} \quad l \leqq n-1$$

(5) A une constante près.

et l'on constate que $rR_{l,m}(r)$ est bien de carré sommable de o à l'infini; $s_0^1(t)$ est la solution de

$$(t^2-k^2)\frac{ds}{dt}+(2t-1)s=1$$

qui est holomorphe pour $t=k$. Posons $\frac{t-k}{t+k}=u$; l'équation devient

$$2ku(1-u)\frac{ds}{du}+[(2k+1)u+2k-1]s=1-u$$

et cherchons une solution du type

$$a_0+a_1u+\ldots+a_nu^n+\ldots,$$

ce qui donne

$$a_0=\frac{1}{2k-1},\qquad a_1=\frac{-1}{(2k-1)(4k-1)},\qquad a_2=\frac{4k}{(2k-1)(4k-1)(6k-1)}$$

et la formule de récurrence

$$a_n[2(n+1)k-1]=a_{n-1}[2(n-2)k-1],$$

donc

$$a_n=\frac{4k}{[2(n-1)k-1](2nk-1)[2(n+1)k-1]}.$$

Le développement est donc uniformément convergent pour $|u|\leqq 1$, c'est-à-dire pour $\mathcal{R}(t)\geqq 0$, puisque la série de terme $|a_n|$ converge, donc la fonction ainsi représentée est holomorphe en $t=k$. On a

$$s_0^1(t)=a_0+\ldots+a_n\left(\frac{t-k}{t+k}\right)^n+\ldots.$$

Étant donné la convergence uniforme de la série des dérivées ($n|a_n|$ converge), on a

$$s_0^{1\prime}(t)=2k\left[\frac{a_1}{(t+k)^2}+\ldots+na_n\left(\frac{t-k}{t+k}\right)^{n-1}\frac{1}{(t+k)^2}+\ldots\right]$$

et (A étant une constante >0).

$$\begin{aligned}-r\int_{-iA}^{+iA}s_0^1(t)\,e^{rt}\,dt&=\int_{-iA}^{+iA}s_0^{1\prime}(t)\,e^{rt}\,dt\\&=2k\left[a_1\int_{-iA}^{iA}\frac{e^{rt}\,dt}{(t+k)^2}+\ldots+na_n\int_{-iA}^{+iA}\left(\frac{t-k}{t+k}\right)^n\frac{e^{rt}\,dt}{(t+k)^2}+\ldots\right].\end{aligned}$$

Mais

$$\left|\int_{-iA}^{+iA}\left(\frac{t-k}{t+k}\right)^n\frac{e^{rt}\,dt}{(t+k)^2}\right|\leqq\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dy}{y^2+k^2},$$

donc la série précédente converge uniformément par rapport à A et r. Donc

$$rZ_0^1(r)=-2[a_0\mathcal{L}_{0,2}(kr)+\ldots+na_n\mathcal{L}_{n-1,2}(kr)+\ldots],$$

la convergence étant uniforme. Ce qui donne

$$Z_0^1(r) = -2e^{-kr}[a_0 L_{0,2}(kr) + \ldots + na_n L_{n-1,2}(kr) + \ldots],$$

expression de $Z_0^1(r)$ en fonction des polynomes de Laguerre. Or il est facile de voir que les fonctions $\mathcal{L}_{n,2}(kr)$ pour $n \geq 0$ forment un système orthogonal dans l'espace des fonctions de carré sommable de 0 à $+\infty$ avec la mesure $\frac{dr}{r}$ (⁶). Le carré de leur module tend vers zéro si $n \to +\infty$, et comme

$$\sum_1^n n^2 |a_n|^2 < +\infty,$$

cela prouve que $r|Z_0^1(r)|^2$ est sommable avec la mesure de Lebesgue; donc $Z_0^1(r)$ est de carré sommable puisqu'elle est bornée à l'origine.

Retour à l'équation $\Delta\varphi + \frac{\varphi}{r} = \lambda\varphi$. — Si φ est une solution de carré sommable, on a vu que

$$R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi \bar{S}_{l,m}\, d\sigma \equiv 0 \qquad \text{si} \quad \lambda \leq 0$$

quel que soit l et m; comme les $S_{l,m}$ forment un système orthonormal complet dans $\mathcal{H}_{S_2}$, cela entraine que $\psi(r, \theta, \omega) = 0$ en θ et ω quel que soit r. Donc que $\psi = \varphi = 0$. Il n'y a pas de solutions non identiquement nulles. Si $\lambda = \frac{1}{4n^2}$,

$$R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi \bar{S}_{l,m}\, d\sigma = 0 \qquad \text{si} \quad l > n-1.$$

Il en résulte donc que

$$\psi = \sum_{\substack{l \leq n-1 \\ |m| \leq l}} R_{l,m}(r) S_{l,m}(\theta, \omega) \quad \text{(somme finie)}$$

et

$$R_{l,m}(r) = k_{l,m}\, e^{-\frac{r}{2n}} r^l L_{n-(l+1),\, 2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right),$$

donc

$$\psi = e^{-\frac{r}{2n}} \sum_{l \leq n-1} r_l L_{n-(l+1),\, 2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right)\left(\sum_{|m| \leq l} k_{l,m} S_{l,m}\right),$$

$k_{l,m} =$ const. dépendant de l et m.

(⁶) On a en effet

$$\mathcal{L}_{n,2}(kr) = \frac{2i\pi k}{(n+1)!} e^{+kr} \frac{d^n}{dr^n}(e^{-2kr} r^{n+1}).$$

Par intégration par partie, on voit que

$$\int_0^{+\infty} \mathcal{L}_{n,2}(kr) \mathcal{L}_{n',2}(kr) \frac{dr}{r} = 0 \qquad \text{si} \quad n \neq n',$$
$$= \frac{\pi^2}{n+1} \qquad \text{si} \quad n = n'.$$

Si $\lambda \neq \frac{1}{4n^2}$, $R_{l,m}(r) = 0$, si $l > 0$ et $R_{0,0}(r) = R_0^1(r)$ trouvée plus haut. *Donc la fonction ψ se réduit à cette fonction.*

Ce sont bien des solutions de (I). Il suffit de montrer que les fonctions

$$\psi_{l,m}(r, \theta, \omega) = R_{l,m}(r) S_{l,m}(\theta, \omega) \quad \text{et} \quad R_0^1(r)$$

sont solutions [ou plus exactement que $\varphi_{l,m}(x, y, z) = \psi_{l,m}(r, \theta, \omega)$ sont solutions]

$$\Delta[R_{l,m}(r) S_{l,m}(\theta, \omega)] = \Delta[R_{l,m}(r)] S_{l,m} + \frac{R_{l,m}}{r^2} \Delta_{S_2}(S_{l,m})$$
$$= \left[\frac{d^2}{dr^2}(R_{l,m}) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} R_{l,m} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] S_{l,m},$$

donc

$$H(\varphi_{l,m}) = \lambda \varphi_{l,m}$$

car

$$H(\varphi_{l,m}) - \lambda \varphi_{l,m} = \left[\frac{d^2}{dr^2} R_{l,m} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} R_{l,m} + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \lambda\right) R_{l,m}\right] S_{l,m} = 0.$$

Les fonctions

$$\psi_{l,m} = e^{-\frac{r}{2n}} r^l L_{n-(l+1), 2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right) S_{l,m}$$

sont les fonctions d'ondes classiques. Or $r^l S_{l,m}$ est un polynome homogène harmonique de degré l, soit $P_{l,m}(x, y, z)$. Les autres polynomes harmoniques sont des combinaisons de ceux-ci. Donc la solution générale de

$$\Delta\varphi + \frac{\varphi}{r} = \frac{1}{4n^2}\varphi$$

s'écrit

$$\varphi_n(x, y, z) = e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2n}} \sum_{l \leq n-1} L_{n-(l+1), 2(l+1)}\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2n}\right) P_l(x, y, z);$$

$P_l(x, y, z)$ polynome harmonique homogène de degré l.

Nous remarquerons que $\frac{\partial \varphi_n}{\partial x}$ n'existe à l'origine que si $l > 0$, que $\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x^2}$ n'existe que si $l > 1$ et que si $l > 0$, cette quantité *devient infinie*.

Conclusion. — H possède alors une infinité continue de valeurs propres, ce qui est incompatible avec le fait qu'il est *hermitique*. Donc sur le domaine D_0 des fonctions φ deux fois continuement dérivables, sauf peut-être à l'origine et celles que $H(\varphi)$ sont de carré sommable l'opérateur n'est pas hermitique. On peut voir immédiatement que si l'on restreint D_0 au domaine $D_1 \subset D_0$ tel que l'on ait

$$\int_{R^3} e^{-rt}\, \overline{H(\varphi)}\, dx\, dy\, dz = \int_{R^3} H(e^{-rt})\, \overline{\varphi}\, dx\, dy\, dz,$$

les fonctions propres pour λ *quelconque* > 0, disparaissent (hermiticité avec e^{-rt}, $\mathcal{R}(t) > 0$ et $\varphi \in D_1$). Étant donné que H est à coefficient réel, la condition peut aussi bien s'écrire

$$\int_{R^3} e^{-rt} H(\varphi)\, dx\, dy\, dz = \int_{R^3} H(e^{-rt})\, \varphi\, dx\, dy\, dz.$$

Reprenons le calcul qui nous a permis d'écrire les équations (IV) et (IV_0) dans le cas $l = 0$

$$\int_0^{+\infty} \left(r \frac{d^2 Z_0}{dr^2} + Z_0 \right) e^{-rt}\, dr = \int_0^{+\infty} \left(r^2 \frac{d^2 R_0}{dr^2} + 2r \frac{dR_0}{dr} + r R_0 \right) e^{-rt}\, dr$$

$$= \int_0^{+\infty} H(R_0)\, e^{-rt} r^2\, dr = \frac{1}{4\pi} \int_{R^3} H(R_0)\, e^{-rt}\, dx\, dy\, dz,$$

donc s'il y a hermiticité

$$= \frac{1}{4\pi} \int_{R^3} R_0\, H(e^{-rt})\, dx\, dy\, dz$$

$$= \int_0^{+\infty} r^2 R_0 \left[t^2 e^{-rt} - \frac{2t}{r} e^{-rt} + \frac{e^{-rt}}{r} \right] dr = \int_0^{+\infty} r Z_0 \left[t^2 e^{-rt} - \frac{2t}{r} e^{-rt} + \frac{e^{-rt}}{r} \right] dr,$$

c'est-à-dire

$$= -t^2 s'_0 - (2t - 1) s_0$$

qui doit être égal à

$$\lambda \int_0^{+\infty} r Z_0\, e^{-rt}\, dr = -\lambda s'_0.$$

On a donc l'équation (IV) et jamais de terme au deuxième membre [jamais (IV_0)], ce qui fait disparaître les solutions $\varphi_\lambda = R_0^1(r)$ (7).

Mais comme nous le verrons, même si l'opérateur H est rendu hermitique par cette condition, l'ensemble des fonctions propres classiques ne constitue pas un système orthonormal complet dans $\mathcal{H}_{R^3}$ et nous ne savons pas *a priori* si H prolongé par sa fermeture est autoadjoint.

Nous nous proposons dans la suite de donner à l'opérateur H une définition précise telle qu'il soit autoadjoint. Nous verrons qu'il n'a pas alors comme fonctions propres les fonctions déjà connues et que ce système n'est pas complet. H a alors un *spectre continu, spectre dont l'existence n'était pas assurée* si H n'était pas autoadjoint.

DEUXIÈME PARTIE.

Opérateurs différentiels a coefficients constants dans $\mathcal{H}_{R^n}$.

Pour préparer la suite, qui est l'étude de l'opérateur H, indiquons une façon

(7) Que nous désignerons par « famille abhérente ».

de définir les opérateurs différentiels hermitiques à coefficients constants dans $\mathcal{H}_{R^n}$.

Un opérateur différentiel à coefficients constants est dit hermitique s'il s'écrit

$$\sum_{|p|\leq|p_0|} A_p i^{|p|} \frac{D^p}{DX^p},$$

avec les notations de L. Schwartz [IV] : p, indice de dérivation $(p_1, \ldots, p_n)$,

$$|p| = p_1 + p_2 + \ldots + p_n,$$

les p_i étant des entiers ≥ 0,

$$\frac{D^p}{DX^p} = \frac{\partial^{p_1+p_2+\ldots+p_n}}{\partial x_1^{p_1} \partial x_2^{p_2} \ldots \partial x_n^{p_n}},$$

les A_p étant des constantes réelles.

Le domaine D_0 sera l'espace $\mathcal{S}_{R^n}$ de Scharwtz [IV] des fonctions indéfiniment dérivables à décroissance rapide à l'infini. Nous avons par intégration par partie si φ et $\psi \in \mathcal{S}_{R^n}$

$$\int_{R^n} \frac{D^p \varphi}{DX^p} \psi \, dX = (-1)^{|p|} \int_{R^n} \varphi \frac{D^p \psi}{DX^p} dX, \qquad (dX = dx_1 \ldots dx_n),$$

donc

$$\int_{R^n} i^{|p|} \frac{D^p \varphi}{DX^p} \bar{\psi} \, dX = \int_{R^n} \varphi \overline{i^{|p|} \frac{D^p \psi}{DX^p}} dX,$$

donc

$$\langle i^{|p|} \frac{D^p \varphi}{DX^p}, \psi \rangle = \langle \varphi, i^{|p|} \frac{D^p \psi}{DX^p} \rangle$$

et, par conséquent, puisque les A_p sont réels

$$\langle \varphi, A(\psi) \rangle = \langle A(\varphi), \psi \rangle.$$

Donc A est hermitique sur le domaine D_0.

Nous allons chercher son adjoint A^*.

Si $\psi \in \mathcal{H}_{R^n}$, ψ est une distribution de $\mathcal{S}'_{R^n}$ et $A(\psi) \in \mathcal{S}'_{R^n}$ est défini par

$$A(\psi) = \sum_{|p|\leq|p_0|} A_p i^{|p|} \frac{D^p \psi}{DX^p},$$

c'est-à-dire que si $\varphi \in \mathcal{S}_{R^n}$

$$A(\psi)[\bar{\varphi}] = \sum_{|p|\leq|p_0|} i^{|p|} \int_{R^n} (-1)^{|p|} \psi \frac{D^p \varphi}{DX^p} dX;$$

par conséquent,

$$A(\psi)[\bar{\varphi}] = \sum_{|p|\leq|p_0|} \int_{R^n} \psi \overline{i^{|p|} \frac{D^p \varphi}{DX^p}} dX = \langle \psi, A(\varphi) \rangle.$$

Passons à l'adjoint A^*.

D'une façon générale, A étant un opérateur linéaire défini dans une partie D_0 dense d'un espace $\mathcal{H}$ de Hilbert, l'adjoint A^* de A est défini sur un élément $\psi \in \mathcal{H}$ si et seulement si à ψ correspond ψ_1 tel que quel que soit $\varphi \in D_0$,

$$\langle \psi, A(\varphi) \rangle = \langle \psi, \psi_1 \rangle;$$

on pose alors

$$A^*(\psi) = \psi_1.$$

Si donc ici $A^*(\psi) = \psi_1$ existe pour la fonction ψ, on a

$$\langle \psi, A(\varphi) \rangle = A(\psi)[\overline{\varphi}] = \langle \psi_1, \varphi \rangle = \int_{R^n} \psi_1 \overline{\varphi}\, dX$$

quel que soit $\varphi \in \mathcal{S}_{R^n}$. Donc la distribution $A(\psi) = \psi_1 \in \mathcal{H}_{R^n}$.

Réciproquement, supposons que ψ est tel que $A(\psi) \in \mathcal{H}_{R^n}$, $A(\psi) = \psi_1$:

$$\langle \psi, A(\varphi) \rangle = A(\psi)[\overline{\varphi}] = \langle \psi_1, \varphi \rangle$$

donc A^* est défini sur ψ et $A^*(\psi) = A(\psi)$ (au sens des distributions).

Conclusion. — A^* est défini sur ψ si $A(\psi)$ pris au sens des distributions est une fonction de carré sommable et

$$A^*(\psi) = A(\psi).$$

Montrons que $A^*(\psi)$ est autoadjoint ou, ce qui revient au même, que la fermeture de A est autoadjointe. On sait [III] qu'il faut et qu'il suffit que les équations

$$A^*(\psi) + i\varepsilon\psi = 0 \qquad (\varepsilon = \mp 1)$$

n'aient comme solution dans $\mathcal{H}_{R^n}$ que $\psi = 0$.

Si l'on a

$$A^*(\psi) \mp i\psi = 0,$$

cela veut dire que

$$A(\psi) \mp i\psi = 0,$$

où ψ est considérée comme une distribution. Nous avons donc à résoudre cette équation dans l'espace $\mathcal{S}'_{R^n}$ et à chercher les solutions qui $\in \mathcal{H}_{R^n}$. Comme $\psi \in \mathcal{S}'_{R^n}$, nous pouvons faire une transformation de Fourier et poser $\mathcal{F}(\psi) = T$, T distribution de $\mathcal{S}'_{R^n}$, où Y est la variable $Y = (y_1, \ldots, y_n)$. L'équation

$$\sum_{|p| \leq |p_0|} A_p i^{|p|} \frac{D^p \psi}{DX^p} \mp i\psi = 0$$

devient

$$\Bigl(\sum_{|p| \leq |p_0|} A_p (2\pi)^{|p|} Y^p \mp i\Bigr) T = 0,$$

où $Y^p = y_1^{p_1}.y_2^{p_2}\ldots y_n^{p_n}$. Ou encore $[P(Y) \pm i]T = 0$, $P(Y)$ un polynome en $y_1, y_2, \ldots, y_n$ à *coefficients réels*. Donc le coefficient de T ne s'annule jamais.

Donc si $\varphi \in \mathcal{S}_{R^n}$, alors

$$\frac{\varphi}{P(Y) \mp i} \in \mathcal{S}_{R^n}$$

et alors

$$[P(Y) \mp i] T \left[\frac{\varphi}{P(Y) \mp i}\right] = T(\varphi) = 0, \qquad \text{donc} \quad T = 0.$$

Il n'y a aucune distribution, sauf la distribution identiquement nulle qui vérifie l'équation. Donc $A^\star(\psi) \mp i\psi = 0$ entraîne $\psi = 0$, donc $A^\star$ est autoadjoint.

L'opérateur différentiel A autoadjoint est donc défini comme suit : $A^\star(\psi)$ au sens autoadjoint existe si et seulement si $A(\psi)$ au sens des distributions est une fonction de carré sommable et les deux expressions de $A(\psi)$ sont égales.

Nous remarquerons que, si ψ possède des dérivées continues jusqu'à l'ordre maximum des dérivées intervenant dans A, $A(\psi)$ existe et est égal à l'expression classique de l'opérateur. Si celle-ci est de carré sommable, ce résultat reste vrai même si certaines dérivées (au sens classique) ont des points singuliers à la seule condition que les formules d'intégration par partie qui assurent l'hermiticité de A soient valables (et à condition naturellement que l'expression finale soit de carré sommable).

Nous savons, en outre, que si nous voulons résoudre une équation où intervient A [par exemple l'équation aux fonctions propres $A(\psi) = \lambda\psi$], on pourra résoudre cette équation en la considérant comme une équation dans l'espace $\mathcal{D}'_{R^n}$ des distributions (et même dans $\mathcal{S}'_{R^n}$).

Nous allons définir l'opération $H = \Delta + \frac{1}{r}$ dans $\mathcal{H}_{R^3}$ d'une façon analogue.

Domaine initial. — Nous posons que H est défini et égal à son expression classique sur l'espace $\mathcal{S}_{R^3}$ qui sera le domaine D_0 : si $\varphi \in \mathcal{S}_{R^3}$, $\Delta\varphi + \frac{\varphi}{r}$ est de carré sommable et H est hermitique sur D_0. En outre, $D_0 = \mathcal{S}_{R^3}$ est dense dans $\mathcal{H}_{R^3}$.

Décomposition de l'opérateur H. — La résolution classique de l'équation $H(\varphi) = \lambda\varphi$ est basée sur la séparation des variables après un passage en coordonnées polaires, séparation qui est due au fait que $\Delta\varphi + \frac{\varphi}{r}$ est un invariant pour le groupe des rotations dont les axes passent par l'origine de R^3. Ce fait se traduit par l'existence d'un système orthogonal de variétés stables pour H [8] supposé défini sur $\mathcal{S}_{R^3}$.

---

[8] Qui sont les variétés propres communes de deux opérateurs permutables avec H, correspondant respectivement aux deux grandeurs physiques : M (moment cinétique de l'élection dans son mouvement autour du noyau) et M_z (projection de ce moment sur un axe fixe).

Les relations

$$x = r \sin\theta \cos\omega,$$
$$y = r \sin\theta \sin\omega,$$
$$z = r \cos\theta$$

(r, θ, ω coordonnées polaires des physiciens), définissent une application $\mathfrak{T}(\mu) = \mathbf{M}$ de l'espace $R^+ \times S_2$ sur R^3 (R^+, demi-droite numérique $r \geqq 0$; S_2, sphère de rayon 1 centrée à l'origine, θ et ω étant les coordonnées du point courant de S_2) qui est indéfiniment différentiable et biunivoque de $(R^+ - \{0\} \times S_2$ sur $R^3 - \{0\}$ ($\{0\}$ ensemble constitué par l'origine). A toute fonction

$$\varphi(x, y, z) = \varphi(\mathbf{M}) \in \mathcal{H}_{R^3}$$

correspond la fonction

$$\psi(r, \theta, \omega) = \psi(\mu) = \varphi(r \sin\theta \cos\omega,\ r \sin\theta \sin\omega,\ r \cos\theta),$$

c'est-à-dire

$$\psi(\mu) = \varphi[\mathfrak{T}(\mu)];$$

ψ de carré sommable sur $R^+ \times S_2$ avec la mesure $r^2 \, dr \sin\theta \, d\theta \, d\omega$, c'est-à-dire $r^2 \, dr \, d\sigma$ ($d\sigma$, élément d'aire sur S_2) (d'après la formule de changement de variable). $\psi(r, \theta, \omega)$ est donc *sommable* dans toute région bornée de $R^+ \times S_2$ (toute région où r reste borné). Donc $\psi(r, \theta, \omega)$ est sommable sur S_2 (d'après le théorème de Fubini) pour presque toutes les valeurs de r, donc puisque $S_{l,m}(\theta, \omega)$ (9) est une fonction bornée sur S_2,

$$R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi \bar{S}_{l,m} \, d\sigma$$

existe pour presque toutes les valeurs de r.

On considère alors la fonction

$$R_{l,m}(r)\, S_{l,m}(\theta, \omega) = \psi_{l,m}(\mu)$$

définie presque partout sur $R^+ \times S_2$, donc définie presque partout sur $(R^+ - \{0\}) \times S_2$. L'application $\overset{-1}{\mathfrak{T}}$ permet d'en déduire une fonction

$$\varphi_{l,m}(x, y, z) = \varphi_{l,m}(\mathbf{M}) = \psi_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathfrak{T}}(\mathbf{M})\right]$$

définie presque partout sur $R^3 - \{0\}$, c'est-à-dire sur R^3.

Nous avons vu *dans la première partie* que $R_{l,m}(r)$ est de carré sommable pour $0 \leqq r < +\infty$ avec la mesure $r^2 \, dr$. Donc $R_{l,m}(r)\, S_{l,m}(\theta, \omega)$ est de carré sommable avec la mesure $r^2 \, dr \, d\sigma$, donc $\varphi_{l,m}(x, y, z)$ est de carré sommable dans R^3.

(9) $S_{l,m}(\theta, \omega)$ fonction sphérique de la première partie.

Considérons l'opérateur $P_{l,m}$ défini par $P_{l,m}(\varphi) = \varphi_{l,m}$. Il est linéaire, borné, idempotent et hermitique : c'est donc un projecteur.

Il est borné :

$$\|\varphi_{l,m}\|^2 = \int_0^{+\infty} r^2 |R_{l,m}|^2\, dr,$$

or on a vu que

$$|R_{l,m}(r)|^2 \leqq \int_{S_2} |\psi|^2 d\sigma, \qquad \text{donc} \quad \|\varphi_{l,m}(r)\|^2 \leqq \int_{R^3} |\varphi|^2\, dx\, dy\, dz = \|\varphi\|^2.$$

Il est idempotent :

$$P_{l,m}(\varphi_{l,m}) = \left[\int_{S_2} R_{l,m} \overline{S}_{l,m} S_{l,m}\, d\sigma\right] S_{l,m} = \varphi_{l,m}.$$

Il est hermitique : Soit φ_1 et $\varphi_2 \in H_{R_3}$

$$\langle \varphi_1, P_{l,m}(\varphi_2)\rangle = \int_0^{+\infty} r^2 \left[\int_{S_2} \psi_1 \overline{\psi}_{2,l,m}\, d\sigma\right] dr,$$

$$\psi_{2,l,m} = R_{2,l,m}(r)\, S_{l,m}(\omega) \qquad \text{et} \qquad R_{2,l,m}(r) = \int_{S_2} \psi \overline{S}_{l,m}(\theta_1, \omega_1)\, d\sigma_1,$$

$$\langle \varphi_1, P_{l,m}(\varphi_2)\rangle = \int_0^{+\infty} r^2 \left[\int_{S_2} \psi_1 \left(\int_{S_2} \overline{\psi}_2 S_{l,m}(\theta_1, \omega_1)\, d\sigma_1\right) \overline{S}_{l,m}(\theta, \omega)\, d\sigma\right] dr.$$

On peut permuter les deux intégrations sur la sphère S_2

$$= \int_0^{+\infty} r^2 \left[\int_{S_2} \overline{\psi}_2 \left(\int_{S_2} \psi_1 \overline{S}_{l,m}(\theta, \omega)\, d\sigma\right) S_{l,m}(\theta_1, \omega_1)\, d\sigma_1\right] dr,$$

$$= \int_0^{+\infty} \left(r^2 \int_{S_2} \overline{\psi}_2 \psi_{1,l,m}\, d\sigma_1\right) dr = \langle P_{l,m}(\varphi_1), \varphi_2\rangle$$

$P_{l,m}(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_{l,m}$ qui est une variété fermée de $\mathcal{H}$. Elle est donc composée des fonctions

$$\varphi_{l,m}(M) = \psi_{l,m}[\overset{-1}{\mathfrak{T}}(M)],$$

où

$$\psi_{l,m}(\mu) = \psi_{l,m}(r, \theta, \omega) = R_{l,m}(r)\, S_{l,m}(\theta, \omega)$$

est de carré sommable pour $0 \leqq r < +\infty$, avec la mesure $r^2\, dr$.

Les variétés $\mathcal{H}_{l,m}$ sont orthogonales entre elles :

$$\int_{R^3} \varphi_{l,m} \overline{\varphi}_{l',m'}\, dx\, dy\, dz = \int_0^{+\infty} r^2 R_{l,m} \overline{R}_{l',m'} \left[\int_{S_2} S_{l,m} \overline{S}_{l',m'}\, d\sigma\right] dr.$$

Or les $S_{l,m}$ forment un système orthogonal sur S_2, donc

$$\int_{S_2} S_{l,m} \overline{S}_{l',m'}\, d\sigma = 0, \qquad \text{si} \quad (l, m) \neq (l', m').$$

Les variétés $\mathcal{H}_{l,m}$ engendrent l'espace $\mathcal{H}_{R^3}$:

Soit

$$\varphi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \omega), \qquad \varphi \in \mathcal{H}_{R^3}.$$

$\psi(r, \theta, \omega)$ considéré comme fonction sur S_2 dépendant du paramètre r étant de carré sommable sur S_2 pour presque toutes les valeurs de r, nous avons *dans* $\mathcal{H}_{S_2}$ *pour presque tous les* r,

$$\psi(r, \theta, \omega) = \sum_{l,m} R_{l,m}(r)\, S_{l,m}(\theta, \omega) = \sum_{l,m} \psi_{l,m}(r, \theta, \omega),$$

$$R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi \bar{S}_{l,m}\, d\sigma$$

et

$$\int_{S_2} |\psi|^2\, d\sigma = \sum_{l,m} |R_{l,m}(r)|^2 \quad \text{(égalité de Parceval)},$$

puisque les fonctions sphériques forment un système complet d'où il résulte que

$$\int_{R+\times S_2} r^2 |\psi|^2\, dr\, d\sigma \geqq \sum_{l,m} \int_0^{+\infty} r^2 |R_{l,m}(r)|^2\, dr = \sum_{l,m} \int_{R+\times S_2} |\psi_{l,m}|^2 r^2\, dr\, d\sigma$$

comme dans $\mathcal{H}_{R+\times S_2}$ (avec la mesure $r^2\, dr\, d\sigma$) les $\psi_{l,m}$ forment un système orthogonal de fonctions, la série $\sum\limits_{l,m} \psi_{l,m}$ converge vers une fonction ψ_0 de $\mathcal{H}_{R+\times S_2}$ (avec la mesure $r^2\, dr\, d\sigma$). Il existe donc d'après le théorème de Fischer-Riesz une suite d'indices $N_1, N_2, \ldots, N_p, \ldots$ tel que $\psi_0 =$ limite presque partout de ψ_{N_p} où

$$\psi_{N_p} = \sum_{\substack{l \leqq N_p \\ |m| \leqq l}} \psi_{l,m}(r, \theta, \omega).$$

Mais *pour presque tous les* r

$$\psi = \sum_{l,m} R_{l,m}(r)\, S_{l,m}(\theta, \omega) = \lim_{p \to \infty} \psi_{N_p}$$

dans $\mathcal{H}_{S_2}$.

Et toujours d'après le théorème de Fischer-Riesz il existe une suite d'indices $p_1, p_2, \ldots, p_q, \ldots$ (qui dépendent de r pour lequel l'égalité précédente est vraie) telle que

$$\psi(r, \theta, \omega) = \lim \text{ presque partout sur } S_2 \text{ de } \psi_{N_{p_q}} \text{ si } q \to \infty;$$

or $\psi_0 = \lim$ presque partout de ψ_{N_p} sur S_2 pour presque toutes les valeurs de r, donc

$$\psi_0 = \lim \text{ presque partout sur } S_2 \text{ de } \psi_{N_q}$$

quelle que soit la suite $N_{p_1}, \ldots, N_{p_q}, \ldots$.

Donc, pour presque toutes les valeurs de r,

$$\psi_0 = \psi \text{ presque partout sur } S_2,$$

donc $\psi_0 = \psi$ presque partout sur $R^+ \times S_2$. Donc $\psi_0 = \psi$ dans $\mathcal{H}_{R^+ \times S_2}$. Donc

$$\psi = \sum_{l, m} \psi_{l,m}(r, \theta, \omega) \quad \text{dans } \mathcal{H}_{R^+ \times S_2},$$

donc

$$\varphi = \sum_{l,m} \varphi_{l,m} = \sum_{l,m} P_{l,m}(\varphi) \quad \text{dans } \mathcal{H}_{R_3}.$$

Donc les variétés $\mathcal{H}_{l,m}$ engendrent $\mathcal{H}_{R^3}$.

Enfin, les variétés $\mathcal{H}_{l,m}$ sont stables pour l'opérateur H tel qu'il est défini.

Soit $\varphi \in \mathcal{S}_{R^3} = D_0$, alors

$$P_{l,m}(\varphi) \in \mathcal{S}_{R^3}.$$

Montrons que $R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi \, \overline{S}_{l,m} \, d\sigma$ s'écrit

$$R_{l,m}(r) = r^l \chi(r^2),$$

où $\chi(u)$ est indéfiniment dérivable pour $u \geqq 0$ et à décroissance rapide à l'infini,

$$\psi(r, \theta, \omega) = \varphi(r \sin\theta \cos, \ r \sin\theta \sin\omega, \ r \cos\theta)$$

est indéfiniment dérivable en r, θ, ω si $r \geqq 0$. Donc $R_{l,m}(r)$ est indéfiniment dérivable en r pour $r \geqq 0$.

Calculons son développement de Mac Laurin à l'origine jusqu'à l'ordre $l + 2n$. Nous avons d'après Mac Laurin (en r)

$$\psi(r, \theta, \omega) = \psi(0, \theta, \omega) + r\psi'_r(0, \theta, \omega) + \ldots + \frac{r^l}{l!}\psi_r^{(l)}(0, \theta, \omega) + \ldots$$
$$+ \frac{r^{l+2n}}{(l+2n)!}\psi_r^{(l+2n)}(0, \theta, \omega) + \frac{r^{l+2n+1}}{(l+2n+1)!}\psi^{(l+2n+1)}(kr, \theta, \omega)$$

(où $< k < 1$, k dépendant de r, θ, ω); or

$$\psi(0, \theta, \omega) = \varphi(0, 0, 0),$$
$$(\psi'_r(0, \theta, \omega) = \varphi'_x(0, 0, 0) \sin\theta \cos\omega + \varphi'_y(0, 0, 0) \sin\theta \sin\omega + \varphi'_z(0, 0, 0) \cos\theta,$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$\psi_r^{(p)}(0, \theta, \omega) = [\varphi'_x(0, 0, 0) \sin\theta \cos\omega + \varphi'_y(0, 0, 0) \sin\theta \sin\omega + \varphi'_z(0, 0, 0) \cos\theta]^{(p)}.$$

Nous constatons que $\psi_r^{(h)}(0, \theta, \omega)$ est un *polynome homogène* de degré p en $e^{i\omega} \sin\theta$, $e^{-i\omega} \sin\theta$, $\cos\theta$ à coefficient constant. Or, un tel polynome est une combinaison linéaire de fonctions sphériques $S_{l,m}$ où les indices l sont $\leqq p$ et de *même parité* que p.

Autrement dit,

$$\psi_r^{(p)}(0, \theta, \omega) = \sum_{\substack{0 \leqq \lambda \leqq p/2 \\ |i| \leqq \lambda}} A_{\lambda,i} S_{p-2\lambda,i}(\theta, \omega),$$

les $A_{\lambda,i}$ étant des constantes.

Alors étant donné l'orthogonalité des fonctions sphériques

$$\int_{S_2} \psi_r^{(p)}(o, \theta, \omega)\,\bar{S}_{l,m}\,d\sigma = o \quad \begin{cases} \text{si } p < l, \\ \text{ou si } p > l, \end{cases}$$

p et l étant de parité différente. Nous avons donc

$$\begin{aligned} R_{l,m}(r) = {} & \frac{r^l}{l!}\int_{S_2} \psi_r^{(l)}(o, \theta, \omega)\,\bar{S}_{l,m}\,d\sigma + \ldots \\ & + \frac{r^{l+2n}}{(l+2n)!}\int_{S_2} \psi_r^{(l+2n)}(o, \theta, \omega)\,\bar{S}_{l,m}\,d\sigma \\ & + \frac{r^{l+2n+1}}{(l+2n+1)!}\int_{S_2} \psi_r^{(l+2n+1)}(kr, \theta, \omega)\,\bar{S}_{l,m}\,d\sigma; \end{aligned}$$

$\psi_r^{(l+2n+1)}(kr, \theta, \omega)$ étant bornée, on a pour $R_{l,m}(r)$ un développement de Mac Laurin du type

$$R_{l,m}(r) = r^l[a_0 + a_1 r^2 + \ldots + a_n r^{2n} + r^{2n}\,\varepsilon(r)].$$

Commé $R_{l,m}(r)$ est indéfiniment dérivable pour $r \geqq o$, il en résulte que $\dfrac{R_{l,m}(r)}{r^l}$ est également indéfiniment dérivable pour $r \geqq o$ et que son développement de Mac Laurin est

$$a_0 + a_1 r^2 + \ldots + a_n r^{2n} + r^{2n}\,\varepsilon(r),$$

ce qui montre qu'elle est indéfiniment dérivable comme *fonction de* r^2 pour $r \geqq o$ et que comme fonction de $r^2 = u$ son développement de Mac Laurin est

$$\chi_{l,m}(u) = a_0 + a_1 u + \ldots + a_n u^n + u^n\,\varepsilon_1(u),$$

donc

$$R_{l,m}(r) = r^l \chi_{l,m}(r^2).$$

Revenons à $\psi_{l,m} = \left[\int_{S_2} \psi\,\bar{S}_{l,m}\,d\sigma\right] S_{l,m}$,

$$\begin{aligned} \psi_{l,m} &= r^l \chi_{l,m}(r^2)\,S_{l,m}(\theta, \omega) \\ &= \chi_{l,m}(r^2)\,r^l S_{l,m}(\theta, \omega), \end{aligned}$$

donc

$$\varphi_{l,m} = \chi_{l,m}(x^2 + y^2 + z^2)\,P_{l,m}(x, y, z)$$

$P_{l,m}(x, y, z)$, polynome harmonique, est donc indéfiniment dérivable en x, y, z.

D'autre part,

$$R_{l,m}(r) = \int_{S_2} \psi\,\bar{S}_{l,m}\,d\sigma$$

étant à décroissance rapide à l'infini, $R_{l,m}(r)\;S_{l,m}(\theta, \omega)$, aussi $S_{l,m}$ et ses dérivées étant bornées sur la sphère. Donc

$$P_{l,m}(\varphi) \in \mathcal{S}_{R^3} = D_0,$$

donc

$$P_{l,m}(D_0) = D_0 \cap \mathcal{H}_{l,m}$$

est *dense* dans $\mathcal{H}_{l,m}$. H *et* $P_{l,m}$ *sont permutables.*

On a

$$\begin{aligned} H[P_{l,m}(\varphi)] &= H(\varphi_{l,m}) \\ &= \left[\frac{d^2}{dr^2} R_{l,m} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} R_{l,m} + \frac{R_{l,m}}{r}\right] S_{l,m} + \frac{1}{r^2} S_{l,m} \Delta_{S_2} S_{l,m} \\ &= \left[\frac{d^2}{dr^2} R_{l,m} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} R_{l,m} + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_{l,m}\right] S_{l,m} \in \mathcal{H}_{l,m}. \end{aligned}$$

Donc si $\varphi \in \mathcal{H}_{l,m}$, $H(\varphi) \in \mathcal{H}_{l,m}$; $\mathcal{H}_{l,m}$ est stable et puisque H est hermitique et défini sur une partie dense de $\mathcal{H}_{l,m}$,

$$H[P_{l,m}(\varphi)] = P_{l,m}[H(\varphi)]$$

(ce que l'on peut d'ailleurs vérifier directement).

Conséquence : Si $\varphi \in D_0$,

$$\varphi = \sum_{l,m} P_{l,m}(\varphi) \qquad = \sum_{l,m} \varphi_{l,m},$$

$$H(\varphi) = \sum_{l,m} P_{l,m}[H(\varphi)] = \sum_{l,m} H(\varphi_{l,m}),$$

série qui est donc convergente dans $\mathcal{H}_{R^3}$.

La restriction $H_{l,m}$ de H à $\mathcal{H}_{l,m}$ est hermitique dans $\mathcal{H}_{l,m}$ et définie sur une partie dense de $\mathcal{H}_{l,m}$.

Toute extension autoadjointe de H jouit des mêmes propriétés vis-à-vis de $P_{l,m}$ (et $\mathcal{H}_{l,m}$) et sa restriction donne une extension *autoadjointe* de $H_{l,m}$ dans $\mathcal{H}_{l,m}$.

Réciproquement si pour chaque $\mathcal{H}_{l,m}$ on définit une extension $\overline{H}_{l,m}$ autoadjointe de $H_{l,m}$ en posant

$$\overline{H}(\varphi) = \sum_{l,m} \overline{H}(\varphi_{l,m}),$$

c'est-à-dire si $\overline{H}$ est défini sur φ si et seulement s'il est défini sur $\varphi_{l,m}$ et si la série $\sum_{l,m} \overline{H}(\varphi_{l,m})$ est convergente, $\overline{H}$ est *autoadjoint* et jouit des propriétés précédentes.

OPÉRATEURS H_l. — A $\psi_{l,m} = R_{l,m}(r) S_{l,m}(\theta, \omega)$ correspond d'une façon biunivoque $R_{l,m}(r)$ définie pour $r \geqq 0$ tel que $r R_{l,m}(r)$ soit de carré sommable de 0 à $+\infty$.

L'application $\varphi_{l,m} \to r\mathrm{R}_{l,m} = \mathrm{I}(\varphi_{l,m})$ est *une isométrie* car

$$\|\varphi_{l,m}\| = \|r\mathrm{R}_{l,m}(r)\|$$

qui nous permet de transporter $\mathrm{H}_{l,m}$ dans $\mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$ en posant pour $\xi \in \mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$

$$\mathrm{H}_l(\xi) = \mathrm{I}\left\{\mathrm{H}_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathrm{I}}(\xi)\right]\right\},$$

$$\overset{-1}{\mathrm{I}}(\xi) = \frac{\xi}{r}\mathrm{S}_{l,m} \in \mathcal{H}_{l,m};$$

H_l est défini sur ξ si et seulement si $\mathrm{H}_{l,m}$ est défini sur $\frac{\xi}{r}\mathrm{S}_{l,m}$. H_l est hermitique et défini sur la partie de $\mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$ qui est l'image par I de $\mathrm{D}_0 \cap \mathcal{H}_{l,m}$, c'est-à-dire sur les fonctions $\xi(r) = r^{l+1}\chi(r^2)$, où $\chi(u)$ est un indéfiniment dérivable par rapport à u pour $u \geqq 0$, qui est une partie dense de $\mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$.

Nous avons

$$\begin{aligned}\mathrm{H}_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathrm{I}}(\xi)\right] &= \mathrm{H}_{l,m}\left(\frac{\xi}{r}\mathrm{S}_{l,m}\right) \\ &= \left[\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{\xi}{r}\right) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{\xi}{r}\right) + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\frac{\xi}{r}\right]\mathrm{S}_{l,m}\end{aligned}$$

et

$$\mathrm{H}_l(\xi) = \mathrm{I}\left\{\mathrm{H}_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathrm{I}}(\xi)\right]\right\} = r\left[\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{\xi}{r}\right) + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{\xi}{r}\right) + \left(\frac{1}{r^2} - \frac{l(l+1)}{r^3}\right)\xi\right],$$

donc

$$\mathrm{H}_l(\xi) = \xi'' + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\xi.$$

Extension de la définition des opérateurs H_l dans $\mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$. — La définition de H autoadjoint se ramène à la définition des opérateurs H_l autoadjoints.

Pour la commodité des démonstrations, nous allons étendre le domaine initial de H_l, $\mathrm{I}(\mathrm{D}_0 \cap \mathcal{H}_{l,m})$ en un domaine D_l. Nous verrons par la suite que cette extension était inutile en ce qui concerne la définition de H, mais elle nous apportera quelques résultats. Le domaine D_l sera constitué par les fonctions $\xi(r) = r^{l+1}\chi(r)$, où $\chi(r)$ est indéfiniment dérivable de $-\infty$ à $+\infty$ et à décroissance rapide (c'est-à-dire $\chi(r) \in \mathcal{S}_{\mathrm{R}}$). $\mathrm{D}_l \supset \mathrm{I}(\mathrm{D}_0 \cap \mathcal{H}_{l,m})$, car une fonction $\chi(r^2)$ [où $\chi(u)$ est indéfiniment dérivable pour $u \geqq 0$] peut toujours être prolongée pour $r < 0$ de telle sorte qu'elle appartienne à $\mathcal{S}_{\mathrm{R}}$.

H_l (dans l'espace $\mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$) est défini et hermitique sur D_l.

En effet

$$\mathrm{H}_l[r^{l+1}\chi(r)] = r^{l+1}\chi'' + 2(l+1)r^l\chi' + r^l\chi$$

est défini et continu origine comprise, de carré sommable puisque $\chi(r)$ est à décroissance rapide. Il est hermitique : si ξ_1 et $\xi_2 \in \mathrm{D}_l$,

$$\begin{aligned}\int_0^{+\infty}\left[\xi_1'' + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\xi_1\right]\bar{\xi}_2\,dr &= \lim_{\varepsilon \to \infty}\int_\varepsilon^{+\infty}\left[\xi_1''\bar{\xi}_2 + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\xi_1\bar{\xi}_2\right]dr \\ &= \lim_{\varepsilon \to \infty}\left[\int_\varepsilon^{+\infty}\xi_1\bar{\xi}_2'' + \left(\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\xi_1\bar{\xi}_2\,dx\right. \\ &\qquad\left. + \xi_1'(\varepsilon)\bar{\xi}_2(\varepsilon) - \bar{\xi}_2'(\varepsilon)\xi_1(\varepsilon)\right];\end{aligned}$$

on remarquera que

$$\xi_1\bar{\xi}_2\left(\frac{1}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)=r^l[r-l(l+1)]\chi_1\bar{\chi}_2$$

reste borné à l'origine. Or

$$\bar{\xi}'_1\bar{\xi}_2-\bar{\xi}'_2\xi_1=r^{2l+2}(\chi'_1\bar{\chi}_2-\bar{\chi}'_2\chi_1)\to 0,\quad \text{avec } r,$$

$$\int_0^{+\infty}\mathrm{H}_l(\xi_1)\bar{\xi}_2\,dr=\int_0^{+\infty}\xi_1\mathrm{H}_l(\bar{\xi}_2)\,dr.$$

Étude de l'adjoint H_l^* de H_l défini précédemment. — A chaque $\xi\in\mathcal{H}_{\mathrm{R}+}$ nous faisons correspondre la distribution

$$\mathrm{T}=r^l\xi\in\mathcal{S}'_{\mathrm{R}}$$

plus précisément *la distribution définie par*

$$\mathrm{T}(\chi)=\int_0^{+\infty}r^l\xi(r)\chi(r)\,dr\qquad\text{pour}\quad\chi\in\mathcal{S}_{\mathrm{R}}.$$

Autrement dit, T est une fonction identiquement nulle pour $r<0$ et égal à $r^l\xi(r)$ pour $r\geqq 0$.

Nous avons

$$\frac{d}{dr}[\mathrm{T}(\chi)]=-\mathrm{T}\left(\frac{d\chi}{dr}\right)=-\int_0^{+\infty}r^l\xi\frac{d\chi}{dr}\,dr,$$

$$\frac{d^2\mathrm{T}}{dr^2}=\int_0^{+\infty}r^l\xi\frac{d^2\chi}{dr^2}\,dr\qquad\text{et}\qquad r\frac{d^2\mathrm{T}}{dr^2}[\chi(r)]=\frac{d^2\mathrm{T}}{dr^2}(r\chi)=\mathrm{T}\left(r\frac{d^2\chi}{dr^2}+2\frac{d\chi}{dr}\right)$$

$$=\int_0^{+\infty}r^{l+1}\xi\frac{d^2\chi}{dr^2}\,dr+2\int_0^{+\infty}r^l\xi\frac{d\chi}{dr}\,dr.$$

Par conséquent,

$$\langle\xi,\mathrm{H}_l(\xi_1)\rangle=\int_0^{+\infty}\xi\,\mathrm{H}_l(\xi_1)\,dr,$$

avec $\xi_1\in\mathrm{D}_l$

$$\xi_1=r^{l+1}\chi(r),$$

$$\langle\xi,\mathrm{H}_l(\zeta_1)\rangle=\int_0^{+\infty}\xi[r^{l+1}\bar{\chi}''_1+2(l+1)\bar{\chi}'_1r^l+r^l\bar{\chi}_1]\,dr=\mathrm{T}[r\bar{\chi}''_1+2(l+1)\bar{\chi}'_1+\bar{\chi}_1]$$

$$=r\frac{d^2\mathrm{T}}{dr^2}(\bar{\chi}_1)-2l\frac{d\mathrm{T}}{dr}(\bar{\chi}_1)+\mathrm{T}(\bar{\chi}_1)=\left(r\frac{d^2}{dr^2}-2l\frac{d}{dr}+1\right)\mathrm{T}(\bar{\chi}_1),$$

donc

$$\langle\xi,\mathrm{H}_l(\xi_1)\rangle=u(\bar{\chi}_1)\qquad\text{si}\quad\xi_1\in\mathrm{D}_l,$$

où

$$u=r\frac{d^2\mathrm{T}}{dr^2}-2l\frac{d\mathrm{T}}{dr}+\mathrm{T},\qquad\text{avec}\quad\begin{cases}\mathrm{T}=r^l\xi & \text{si}\quad r\geqq 0,\\ \phantom{\mathrm{T}}=0 & \text{pour}\quad r<0.\end{cases}$$

Or si sur ξ, H_l^* est défini,

$$\langle\xi,\mathrm{H}_l(\xi_1)\rangle=\langle\xi_0,\xi_1\rangle,$$

où $\xi_0 = H_l^*(\xi)$ et réciproquement. Or

$$\langle \xi_0, \xi_1 \rangle = \int_0^{+\infty} r^{l+1} \xi_0 \overline{\chi}_1 \, dr = r\,T_0(\overline{\chi}_1), \qquad \text{avec} \quad T_0 = r^l \xi_0,$$

donc ceci entraîne que

$$u = r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + T = rT_0,$$

puisque $u(\overline{\chi}_1) = rT_0(\overline{\chi}_1)$ quel que soit $\chi_1 \in \mathcal{S}_R$. Réciproquement si

$$u = rT_0, \qquad \text{où} \quad u = r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + T,$$

T et T_0 correspondant à ξ et ξ_0, on a

$$\langle \xi, H_l(\xi_1) \rangle = u(\overline{\chi}_1) = rT_0(\overline{\chi}_1) = \langle \xi_0, \xi_1 \rangle$$

quel que soit $\xi_1 \in D_l$. Donc l'égalité $H^*(\xi) = \xi_0$ se traduit par

$$r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + T = rT_0.$$

Cherchons à résoudre les équations

$$H_l^*(\xi) \mp i\xi = 0,$$

elles se traduisent par

$$\text{(III)} \qquad r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \mp ir)\,T = 0,$$

où T est une distribution qui est une fonction identiquement nulle si $r < 0$ égale à $r^l\xi$, si

$$r \geqq 0, \qquad \xi \in \mathcal{H}_{R^+}.$$

T appartenant à $\mathcal{S}'_R$ nous faisons une transformation de Fourier pour discuter cette équation. Posons $s = \mathcal{F}(T)$ et nous appellerons t' la nouvelle variable, transformation symboliquement définie par

$$s = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2i\pi r t'}\, T\, dr.$$

Alors s vérifie l'équation (IV)

$$\frac{ds}{dt'}[4\pi^2 t'^2 \mp i] + s[8\pi^2(l+1)\,t' - 2i\pi] = 0.$$

Le coefficient de $\frac{ds}{dt'}$ ne s'annule pas sur l'axe réel, on n'a comme solution que les solutions classiques

$$s(t') = \left(\frac{t'-k}{t'+k}\right)^{\frac{i}{4\pi k}} \frac{1}{(t'^2 - k^2)^{l+1}}, \qquad k = \frac{e^{\mp\frac{i\pi}{4}}}{2\pi}$$

qui sont des fonctions sommables dont on peut, par conséquent, prendre la transformée de Fourier $\overline{\mathcal{F}}(s)$ par la formule classique ordinaire. Mais puisque $\overline{\mathcal{F}}(s)$ qui est une fonction $r^l\xi$, où ξ est de carré sommable pour $r \geqq 0$, doit être nulle pour $r < 0$, $s(t')$ comme fonction analytique de la variable t' doit être *holomorphe au-dessus de l'axe réel.* (En posant $2i\pi t' = -t$, on a en effet la *transformation de Laplace* qui est holomorphe pour $\mathcal{R}(t) > 0$.) Or toutes les solutions $\not\equiv 0$ de (IV) ont une singularité en

$$t' = \frac{e^{\mp\frac{i\pi}{4}}}{2\pi} \quad \text{et} \quad \frac{e^{\mp\frac{3i\pi}{4}}}{2\pi}.$$

Donc aucune des solutions de (III) ne convient (sauf celle qui est identiquement nulle). Donc l'équation

$$H_l^\star(\xi) \mp i\xi = 0$$

n'a que la solution $\xi = 0$; $H_l^\star$ est *autoadjoint.*

Définition de $H^\star$ autoadjoint. — Transportons $H_l^\star$ dans $\mathcal{H}_{l,m}$ par l'isométrie I. Nous obtenons l'adjoint $H_{l,m}^\star$ de $H_{l,m} = \overset{-1}{I}(H_l)$, c'est-à-dire l'adjoint de $H_{l,m}$ défini sur les fonctions du type

$$\varphi_{l,m} = \psi_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathfrak{A}}(M)\right], \qquad \text{où} \quad \psi_{l,m} = r^l\chi(r)\,S_{l,m}, \qquad \text{où} \quad \chi(r) \in \mathcal{S}_R$$

(on ne considère que sa restriction pour $r \geqq 0$), $H_{l,m}^\star$ est autoadjoint. H est alors considéré comme défini sur les combinaisons linéaires finies des fonctions $\varphi_{l,m}$ (qui forment le domaine D_1) et son adjoint $H^\star$ est alors autoadjoint et est défini sur une fonction φ si et seulement si $H_{l\,m}^\star$ est défini sur $\varphi_{l,m} = P_{l,m}(\varphi)$ et si $\sum_{l,m} H_{l,m}^\star(\varphi_{l,m})$ converge :

$$H^\star(\varphi) = \sum_{l,m} H_{l,m}^\star(\varphi_{l,m});$$

$D_1 \not\supset D_0$, car D_0 n'est pas seulement composé de combinaison linéaire *finie* de fonction du type $\psi_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathfrak{A}}(M)\right]$, où

$$\psi_{l,m} = r^l\chi(r^2)\,S_{l,m},$$

mais l'étude de H définie dans D_0 montre que $H^\star(\varphi)$ coïncide sur $\varphi \in D_0$ avec la première définition de H $\left[\text{puisque } \sum_{l,m} H_{l,m}(\varphi_{l,m}) \text{ converge vers } H(\varphi), \text{ si } \varphi \in D_0\right]$.

Étude de l'opérateur $H^\star$.

Recherche des fonctions propres. — Si φ est une fonction propre de $H^\star$ relative à la valeur propre λ, $\varphi_{l,m} = P_{l,m}(\varphi)$ est une fonction propre pour la même valeur propre λ de $H^{\star}_{l,m}$ et $I(\varphi_{l,m})$ est une fonction propre de $H^{\star}_{l}$ pour λ.

Nous cherchons donc les fonctions propres de $H^{\star}_{l}$.

On doit avoir $H^{\star}_{l}(\xi) = \lambda\xi$, ce qui se traduit en considérant la distribution T correspondante par l'équation

$$\text{(III)} \qquad r\frac{d^2T}{dr^2} - 2\frac{dT}{dr} + T = \lambda r T$$

(qui est la même que celle de la première partie).

Il n'est pas nécessaire de faire une transformation de Fourier pour discuter cette équation. En effet, nous cherchons une fonction solution au sens des distributions. Celle-ci doit coïncider avec une des solutions classiques dans chacune des deux demi-droites complémentaires de l'origine. Nous savons d'après la première partie que la solution régulière à l'origine ne convient sur la demi-droite $r \geq 0$, c'est-à-dire ne sont du type $r^l\xi$, $\xi \in \mathcal{H}_{R+}$ que si $\lambda = \frac{1}{4n^2}$, $n \geq l+1$; quant aux autres solutions, étant du type $F(r) + G(r)\,\mathrm{Log}\,r$ [10] où $F(0) \neq 0$, elles ne vérifient pas l'équation (III) en tant que distribution $\left[\text{mais l'équation : } r\frac{d^2}{dr^2}T - 2l\frac{d}{dr}T + T = K\delta,\ \delta, \text{ mesure de Dirac; K, une constante } = -2lF(0)\right]$.

Conclusion. — Nous obtenons les mêmes fonctions propres que dans la première partie.

Détaillons : $H^{\star}_{l}$ a pour valeurs propres les nombres

$$\lambda = \frac{1}{4n^2} \quad (n \geq l+1); \qquad H^{\star}(\xi) = \frac{1}{4n^2}\xi$$

à une seule solution $e^{-\frac{2n}{r}} L_{n-(l+1),2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right)$ (spectre simple pour $H^{\star}_{l}$). Donc $H^{\star}_{l,m}$ a pour fonction propre pour la même valeur de λ la seule solution

$$\varphi_{l,m} = \psi_{l,m}\left[\overset{-1}{\mathfrak{T}}(M)\right], \qquad \psi_{l,m} = r^l e^{-\frac{2n}{r}} L_{n-(l+1),2(l+1)}\left(\frac{r}{2n}\right) S_{l,m}(\theta, \omega),$$

$$\varphi_{l,m} = e^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2n}} L_{n-(l+1),2(l+1)}\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{2n}\right) P_{l,m}(x, y, z)$$

$[P_{l,m}(x, y, z) = \text{polynome harmonique}]$.

et finalement, $H^{\star}$ a les variétés propres pour chaque valeur $\lambda = \frac{1}{4n^2}$ qui sont engendrées par les $\varphi_{l,m}$ pour $l \leq n-1$, $|m| \leq l$.

---

[10] $G(r)$ est éventuellement nulle.

DOMAINE DE DÉFINITION DE H^*. — Supposons que H^* soit défini sur $\psi \in \mathcal{H}_{R^3}$. Si $\varphi \in D_0 = \mathcal{S}_R$

$$\int_{R^3} \overline{\varphi}\, H^*(\psi)\, dx\, dy\, dz = \int_{R^3} \psi\, H(\overline{\varphi})\, dx\, dy\, dz,$$

où

$$H(\varphi) = \Delta\varphi + \frac{\varphi}{r}$$

(opérateur différentiel ordinaire). $\frac{\psi}{r}$ est localement sommable $\Big($à l'origine ψ et $\frac{1}{r}$ étant de carré sommable, $\frac{\psi}{r}$ est sommable$\Big)$ et de carré sommable en dehors d'un voisinage de l'origine, c'est donc une distribution $\in \mathcal{S}'_{R^3}$, donc

$$\int_{R^3} \overline{\varphi}\, H^*(\psi)\, dx\, dy\, dz = \int_{R^3} \psi\, \overline{\Delta\varphi}\, dx\, dy\, dz + \int_{R^3} \frac{\psi}{r}\, \overline{\varphi}\, dx\, dy\, dz,$$

ou

$$\int_{R^3} \overline{\varphi} \left[H^*(\psi) - \frac{\psi}{r} \right] dx\, dy\, dz = \int_{R^3} \psi\, \overline{\Delta\varphi}\, dx\, dy\, dz$$

quel que soit $\varphi \in \mathcal{S}_{R^3}$. Donc

$$H^*(\psi) = \Delta\psi + \frac{\psi}{r}, \qquad \text{car} \quad H^*(\psi) - \frac{\psi}{r} = \Delta\psi,$$

où $\Delta\psi$, laplacien de ψ au sens des distributions, est une fonction localement sommable.

Donc si H^* est défini sur ψ, $\Delta\psi$ au sens des distributions est une fonction localement sommable, de carré sommable en dehors d'un voisinage de l'origine, $\Delta\psi + \frac{\psi}{r}$ est une fonction de carré sommable et

$$H^*(\psi) = \Delta\psi + \frac{\psi}{r}.$$

Conséquence. — Si ψ a un laplacien au sens habituel $\{\Delta\psi\}$ continue sauf peut-être à l'origine, possédant les propriétés qui viennent d'être énoncées plus haut pour $\Delta\psi$ au sens des distributions, alors sur ψ, H^* n'est pas défini, si $\{\Delta\psi\} \neq \Delta\psi$ au sens des distributions.

Supposons H^* défini sur ψ. On a alors

$$\int_{R^3} \overline{\varphi}\, \Delta\psi\, dx\, dy\, dz = \int_{R^3} \psi\, \overline{\Delta\varphi}\, dx\, dy\, dz.$$

Mais étant donné les hypothèses sur $\{\Delta\psi\}$,

$$\int_{R^3 - B(\varepsilon)} \psi\, \overline{\Delta\varphi}\, dx\, dy\, dz = \int_{R^3 - B(\varepsilon)} \overline{\varphi}\, \{\Delta\psi\}\, dx\, dy\, dz + \int_{S(\varepsilon)} \left(\psi\, \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\, \overline{\varphi} - \overline{\varphi}\, \overrightarrow{\mathrm{Grad}}\, \psi\right) \vec{n}\, d\sigma.$$

où $B(\varepsilon)$ et $S(\varepsilon)$ sont respectivement les boule et sphère de rayon ε centrées à l'origine. Puisque $\{\Delta\psi\}$ est localement sommable, si $\varepsilon \to 0$, les intégrales triples tendent vers une limite et l'intégrale de surface également

$$\int_{S(\varepsilon)} \left(\psi \,\overrightarrow{\operatorname{Grad}}\, \overline{\varphi} - \overline{\varphi}\, \overrightarrow{\operatorname{Grad}}\, \psi\right) \vec{n}\, d\sigma \to L(\varphi), \qquad \text{et} \qquad L = \Delta\psi - \{\Delta\psi\}$$

est une distribution $\in \mathcal{S}'_{R^3}$, comme $\Delta\psi$ et $\{\Delta\psi\}$, et est $\neq 0$ par hypothèse.

Cette distribution a pour support l'origine, ce qui est impossible puisque $\Delta\psi$ et $\{\Delta\psi\}$ sont des *fonctions*.

Or les fonctions φ_λ de la *famille abhérente* de la première partie sont telles que

$$H(\psi) = \{\Delta\psi\} + \frac{\psi}{r}$$

est de carré sommable, donc $\{\Delta\psi\}$ vérifie les hypothèses. Or H ainsi défini n'étant pas hermétique $\{\Delta\psi\} \neq \Delta\psi$ au sens des distributions. Donc sur les fonctions φ_λ, $H^\star$ n'est pas défini. Il existe donc des fonctions sur lesquelles $H^\star$ n'est pas défini.

Existence du spectre continu. — Supposons que le système des fonctions propres soit complet dans $\mathcal{H}_{R^3}$. Alors on aurait pour tout $\varphi \in \mathcal{H}_{R^3}$

$$\varphi = \sum_n a_n \varphi_n,$$

où φ_n est une fonction propre normalisée relative à la valeur

$$\lambda = \frac{1}{4n^2}, \qquad \text{avec} \quad \sum_n |a_n|^2 < +\infty,$$

mais

$$\sum_n a_n H(\varphi_n) = \sum_n \frac{a_n}{4n^2} H^\star(\varphi_n)$$

serait *convergente* et l'on aurait

$$H^\star(\varphi) = \sum_n \frac{a_n}{4n^2} H^\star(\varphi_n);$$

$H^\star$ serait défini sur toute fonction, ce qui n'est pas exact. Donc $H^\star$ possède un *spectre continu*.

L'existence de ce spectre est affirmée sans preuve dans un certain nombre de traités de Physique théorique et je pense que le fait que le système des valeurs propres ne soit pas complet a été effectivement démontré, mais, à ma connaissance, l'existence du spectre continu n'a jamais été prouvée faute de définition précise de H en tant qu'opérateur autoadjoint. En effet, si un opérateur hermétique A n'est pas autoadjoint, il n'a pas forcément de spectre réel.

DÉFINITION SIMPLIFIÉE DE $H^\star$. — Nous avons vu que, si $H^\star(\psi)$ existe, $\Delta\psi$ au sens des distributions est une fonction et $\Delta\psi+\frac{\psi}{r}$ est de carré sommable. Démontrons la *réciproque*. Soit $\psi\in\mathcal{H}_{R^3}$ tel que $\Delta\psi+\frac{\psi}{r}$ au sens des distributions soit une *fonction* de carré sommable. Par conséquent, on a

$$\int_{R^3}\overline{\varphi}\left(\Delta\psi+\frac{\psi}{r}\right)dx\,dy\,dz=\int_{R^3}\psi\left(\Delta\overline{\varphi}+\frac{\overline{\varphi}}{r}\right)dx\,dy\,dz$$

quel que soit $\varphi\in\mathcal{S}_{R^3}=D_0$.

Pour prouver la réciproque, il faut en principe démontrer que cette égalité reste vraie, quel que soit $\varphi\in D_1$.

Mais nous allons directement prouver que si H est supposé défini sur D_0, $H_1^\star$ son adjoint coïncide avec le précédent, et pour cela il suffit de prouver que cet adjoint est *autoadjoint* [III] : ayant alors il a un domaine de définition plus étendu que le précédent, il coïncide avec lui.

Le raisonnement reste le même. Il faut prouver qu'il n'existe que la fonction identiquement nulle qui vérifie l'équation

$$H_1^\star(\varphi)\mp i\varphi=0,$$

c'est-à-dire que dans $\mathcal{H}_{R+}$ si H_l est l'opérateur

$$H_l(\xi)=\xi''+\left[\frac{1}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\xi$$

défini sur les fonctions $\xi=r^l\chi(r^2)$, où $\chi(u)$ est indéfiniment dérivable pour $u\geqq 0$, il a un adjoint $H_{1l}^\star(\xi)$ autoadjoint, c'est-à-dire que l'équation

$$H_{1,l}^\star(\xi)\mp i\xi=0$$

n'a comme solution que la fonction identiquement nulle.

Nous employons le même procédé que plus haut. Toute fonction $\chi(r^2)$ étant la restriction à $r\geqq 0$ d'une fonction de $\mathcal{S}_R$ à chaque $\xi\in\mathcal{H}_{R+}$, nous associons $T=r^l\xi$ si $r\geqq 0$ et identiquement nulle si $r<0$. L'équation $H_l^\star(\xi)+i\xi=0$ se traduit par

$$\text{(V)}\qquad T\left[r\frac{d^2\chi}{dr^2}+2(l+1)\frac{d\chi}{dr}+\chi\mp ir\chi\right]=0.$$

car, suivant les mêmes calculs que plus haut,

$$\langle H_{1l}^\star(\xi),\,r^{l+1}\overline{\chi}\rangle=\langle\xi,\,H_l(r^{l+1}\overline{\chi})\rangle=T\left[r\frac{d\chi_2}{dr^2}+2(l+1)\frac{d\chi}{dr}+\chi\right]$$

quelle que soit la fonction $\chi\in\mathcal{S}_R$ dont la restriction à $r\geqq 0$ est une fonction de r^2 indéfiniment dérivable. Or ces fonctions χ sont les fonctions qui, à l'origine, ont toutes leurs dérivées impaires nulles. Elles forment la variété $v\subset\mathcal{S}_R$

orthogonale aux distributions, δ', δ''', ..., $\delta^{(2p+1)}$, ... (dérivées d'ordre impair de δ).

Si nous posons

$$J(\chi) = r\frac{d^2\chi}{dr^2} + 2(l+1)\frac{d\chi}{dr} + (1 \mp ir)\chi$$

(opérateur continu dans $\mathcal{S}_R$), l'équation (V) signifie que T est orthoyonal à $J^t(v)$, c'est-à-dire que $J^t(T)$ est orthogonal à v, J^t est le transposé de J défini par

$$J^t(T)[\chi] = T[J(\chi)];$$

donc

$$J^t(T) = r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \mp ir)T$$

doit être orthogonal à v. Or les distributions orthogonales à v sont à support ponctuel (origine) et sont des combinaisons linéaires finies de δ et ses dérivées. Donc ici des combinaisons linéaires finies des dérivées d'ordre impair de δ : $\sum_{p \leq p_0} A_p \delta^{(2p+1)}$, donc nous avons

$$J^t(T) = \sum_{p \leq p_0} A_p \delta^{(2p+1)}.$$

Autrement dit, T doit vérifier l'équation

$$r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \mp ir)T = \sum_{p \leq p_0} A_p \delta^{(2p+1)}.$$

Nous cherchons comme solution une fonction. En dehors de l'origine, elle coïncide avec une solution classique. D'après le théorème de Fuchs, il y a une solution régulière à l'origine qui, commençant par des termes en r^{2l+1} vérifie l'équation avec le deuxième membre nul. Cette fonction, annulée pour $r < 0$ vérifie l'équation sans deuxième membre en tant que distribution et ne peut convenir puisque nous savons d'après ce qui précède qu'il n'y a pas de solution lorsque le deuxième membre est nul [équation (III) plus haut]. Les autres solutions fonctions annulées pour $r < 0$ vérifient l'équation avec un deuxième membre égal à $k\delta$ (*voir* plus haut, p. 140), donc ne peuvent convenir. Il n'y a donc pas de solution convenable et $H^\star_{1l}$ est autoadjoint.

Nous avons alors la définition simple de $H^\star$: $H^\star$ est défini sur $\varphi \in \mathcal{H}_{R^3}$ si et seulement si $\Delta\varphi + \frac{\varphi}{r}$, où $\Delta\varphi$ est le laplacien au sens des distributions, est une fonction de carré sommable.

Donc, en *particulier*, si le laplacien ordinaire coïncidant avec le laplacien au sens des distributions est de carré sommable et si φ est bornée à l'origine, $H^\star(\varphi)$ est égale à l'expression classique.

CHANGEMENT DU CHAMP INITIAL DE DÉFINITION. — Si un opérateur A est autoadjoint dans un espace de Hilbert, il existe une partie dense de $\mathcal{H}$, soit D tel que si $\varphi \in D$, $A^p(\varphi)$ existe et $\in D$ quel que soit p; D pouvant servir de champ initial de définition pour A (c'est-à-dire que l'adjoint de la restriction de A à D coïncide avec A).

Nous allons définir un tel champ pour $H^\star$.

Définissons le champ pour $H_l^\star$

$$H_l(\varphi) = \varphi'' + \left[\frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\varphi,$$

$$\varphi = r^{l+1}\chi(r), \qquad \chi \in \mathcal{S}_R,$$

D_{2l} va être constitué des fonctions de ce type tel que $H_l^p(\varphi)$ soit du même type, quel que soit p,

$$H_l^p(\varphi) = r^{l+1}\chi_p(r), \qquad \text{où} \quad \chi_p(r) \in \mathcal{S}_R.$$

Nous poserons le développement de *Mac Laurin de* $\chi(r)$ égal à

$$a_0 + a_1 r + \ldots + a_n r^n + \ldots,$$

et celui de $\chi_p(r)$ à

$$a_0^p + a_1^p r + \ldots + a_n^p r^n + \ldots$$

Supposons que

$$H_l^p(\varphi) \sim r^{l+1}[a_0^p + \ldots + a_n^p r^n + \ldots] \sim r^{l+1}\chi_p(r),$$

$$H_l^{p+1}(\varphi) = H_l[H_l^p(\varphi)] = r^{l+1}\chi_p'' + 2(l+1)r^l\chi_p' + r^l\chi_p$$

qui a le développement de Mac Laurin

$$r^l[a_0^p + 2(l+1)a_1^p] + [2(2l+2)a_2^p + a_1^p]r^{l+1} + \ldots$$
$$+ [a_n^p + (n+1)(2l+2+n)a_{n+1}^p]r^{l+n} + \ldots$$

dont il faut et il suffit que

$$a_0^p + 2(l+1)a_1^p = 0$$

et alors

$$a_n^{p+1} = a_{n+1}^p + (n+2)(2l+3+n)a_{n+2}^p.$$

La relation de récurrence montre que a_n^p est une combinaison linéaire de $a_{n+p}, \ldots, a_{n+2p}$. En effet, on a

$$a_n^1 = a_{n+1} + (n+2)(2l+3+n)a_{n+2}, \qquad \text{pour} \quad p = 1.$$

Si a_n^p est une combinaison de $a_{n+p}, \ldots, a_{n+2p}$,

$$a_n^{p+1} = a_{n+1}^p + (n+2)(2l+3+n)a_{n+2}^p$$

est une combinaison linéaire de $a_{n+p+1}, \ldots, a_{n+2(p+1)}$, donc a_0^p est une combinaison linéaire de $a_p, \ldots, a_{2p}$ et a_1^p est une combinaison linéaire de $a_{p+1}, \ldots, a_{2p+1}$, donc $a_0^p + 2(l+1)a_1^p$ est une combinaison linéaire de $a_p, \ldots, a_{2p+1}$:

$$a_0^p + 2(l+1)a_1^p = \sum_{i=0}^{i=p+1} A_i^p a_{p+i}.$$

Si bien que la condition pour que

$$H_l^p(\varphi) = r^{l+1}\chi_p(r)$$

quel que soit p s'exprime par une infinité de relations linéaires :

Pour $p = 0, 1, \ldots,, p, \ldots,$

$$\sum_{i=0}^{i=p+1} A_l^p a_{p+i} = 0.$$

Pour $p = 0$, la première relation étant

$$a_0 + 2(l+1)a_1 = 0.$$

Comme

$$a_{p+1} = \frac{d^{p+i}}{dr^{p+i}}[\chi(0)]\frac{1}{(p+i)!},$$

les conditions s'écrivent

$$\sum_{i=0}^{i=p+1} \frac{A_l^p}{(p+i)!}\frac{d^{p+i}}{dr^{p+i}}[\chi(0)],$$

ce que l'on peut exprimer en disant que dans $\mathcal{S}_R$ les fonctions $\chi(r)$ convenables appartiennent à la variété v_{2l} fermée orthogonale aux distributions

$$T_p = \sum_{i=0}^{i=p+1} \frac{A_l^p}{(p+i)!}\delta^{(p+i)}, \qquad (p = 0, 1, \ldots, p).$$

Nous remarquerons que les combinaisons sont du type triangulaire, ce qui assure leur indépendance linéaire.

Considérons H_l défini dans $D_{2,l} \subset D_l$ et montrons que son adjoint $H_{2,l}^\star$ est auto-adjoint.

Par le même calcul déjà fait deux fois ci-dessus,

$$\langle H_{2,l}^\star(\xi), r^{l+1}\overline{\chi}\rangle = T\left[r^2\frac{d^2\chi}{dr^2} + 2(l+1)\frac{d\chi}{dr} + \chi\right],$$

T correspond à ξ toujours de la même façon ($\chi \in v_{2l}$).

Si ξ vérifie la relation

$$H_{2l}^\star(\xi) \mp i\xi = 0,$$

c'est que

$$T\left[r\frac{d^2\chi}{dr^2} + 2(l+1)\frac{d\chi}{dr} + (1 \mp ir)\chi\right] = 0$$

quel que soit $\chi \in v_{2l}$. T doit donc être orthogonal à la variété $J(v_{2l})$, où

$$J = r\frac{d^2}{dr^2} - 2l\frac{d}{dr} + (1 \mp ir)$$

comme plus haut, donc $J^l(T)$ est orthogonale à $\varphi_{2,l}$

$$J^l(T) = r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \mp ir)\,T$$

appartient à variété orthogonale à $\varphi_{2,l}$. Or cette variété est engendrée par les T_p qui ont pour support l'origine, donc $J^l(T)$ a pour support l'origine et est une combinaison linéaire finie de δ et ses dérivées, donc c'est une combinaison linéaire finie des distributions T_p. On a donc l'équation

$$(\mathrm{III}_2) \qquad r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \mp r)\,T = \sum_{p \leq p_0} B_p T_p,$$

équation du même type que (III_1) et nous cherchons des solutions du même type. Or cette équation n'a pas de solution convenable à moins que, peut-être, le deuxième membre se réduise à $k\delta$.

Or, étant donné le type triangulaire des expressions des T_p en fonction de δ et de ses dérivées, aucune combinaison des T_p ne peut donner $k\delta[T_0 = S + 2(l+2)\delta']$. Donc il n'y a aucune solution à l'équation

$$H_{2,l}(\xi) \mp i\xi = 0$$

qui soit $\neq 0$. Donc $H^{\star}_{2,l}$ est autoadjoint et comme $D_{2,l} \subset D_l$, $H^{\star}_{2,l} = H^{\star}_l$. Finalement H peut être considérée comme définie initialement sur les combinaisons linéaires finies de fonction du type

$$\varphi_{l,m}\big[\overset{-1}{\mathfrak{T}}(M)\big] = \varphi_{l,m}, \qquad \text{où} \quad \psi_{l,m} = r^l \chi_l(r)\, S_{l,m}(\theta, \omega),$$

c'est-à-dire sur le domaine $D_2 \subset D$ qui est le domaine engendré algébriquement par les $\overset{-1}{I}(D_{2,l})$ et qui est dense dans $\mathcal{H}_{R^3}$,

$$D_2 \not\subset D_0 = \mathcal{S}_{R^3}.$$

Remarque. — On ne peut pas choisir dans $\mathcal{S}_{R^3}$ un domaine $D_3 \subset D_0$ *de définition* sur lequel $H^{\star p}(\varphi)$ existe et $\in D_3$ quel que soit p. En effet, si $H^{\star p}(\varphi) \in \mathcal{S}_{R^3}$ quel que soit p, $H^{\star}(\varphi) = H(\varphi)$ au sens ordinaire et est donc indéfiniment dérivable. Si $\varphi_{l,m}$ est sa projection sur $\mathcal{H}_{l,m}$,

$$\varphi_{l,m} = \psi_{l,m}\big[\overset{-1}{\mathfrak{T}}(M)\big] \qquad \text{et} \qquad \psi_{l,m} = r^l \chi(r^2)\, S_{l,m}.$$

$H^p(\psi_{l,m})$ doit être du même type, donc

$$H^p_l[r^{l+1}\chi(r^2)] = r^{l+1}\chi_p(r^2),$$

$\chi_p(r^2)$ considéré comme appartenant à $\mathcal{S}_R$ doit donc appartenir à la fois à $D_{2,l}$ et $I(D_0 \cap \mathcal{H}_{l,m})$. Donc χ_l doit être orthogonale en tant que fonction de $\in \mathcal{S}_R$ aux distributions T_p et aux distributions $\delta^{(2q+1)}$. Par conséquent, si l'on prend pour domaine initial le domaine $D_{2,l} \cap I(D_0 \cap \mathcal{H}_{l,m})$ pour H_l, pour que ξ vérifie l'équation

$$H^{*}_{3,l}(\xi) \mp i\xi = 0.$$

$H^{*}_{3,l}$ étant l'adjoint de H_l avec ce domaine initial, il faut et il sufit que la distribution T correspondante vérifie une équation du type

$$(\mathrm{III}_3) \qquad r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \pm ir)T = \sum_{p \leq p_0} B_p T_p + \sum_{q \leq q_0} \delta^{(2q+1)}.$$

Or, parmi ces équations, nous avons

$$(\mathrm{III}_3) \qquad r\frac{d^2T}{dr^2} - 2l\frac{dT}{dr} + (1 \mp ir)T = \delta,$$

car $\delta = T_0 - 2(l+1)\delta'$ et il y a effectivement une solution convenable $\neq 0$ pour $l = 0$.

Posons, en effet, $s = \mathcal{F}(T)$ (transformation de Fourier). L'équation III_3 devient l'équation

$$(4\pi^2 t'^2 \mp i)\frac{ds}{dt'} + s(8\pi^2 t' - 2i\pi) = 2i\pi,$$

où

$$4\pi^2(t'^2 - k^2)\frac{ds}{dt'} + s(8\pi^2 t - 2i\pi) = 2i\pi.$$

Donc la solution générale s'écrit

$$k = \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{2\pi} \qquad \text{ou} \qquad k = \frac{e^{-\frac{3i\pi}{4}}}{2\pi}.$$

$$2i\pi\left[\int\left(\frac{t'-k}{t'+k}\right)^{-\frac{i}{4\pi k}} dt'\right]\left(\frac{t'-k}{t'+k}\right)^{-\frac{i}{4\pi k}} \frac{1}{t'^2 - k^2}.$$

Une de ses solutions est holomorphe au-dessus de l'axe réel et toutes les solutions sont de module de carré sommable sur l'axe réel.

En effet, si l'on pose $t' = -k + h$, l'équation devient

$$4\pi^2 h(h+2k)\frac{ds}{dh} + s[8\pi^2 h + 8\pi^2 k - 2i\pi] = 2i\pi$$

qui a une solution développable en série entière

$$s = a_0 + a_1 h + \ldots + a_n h^n + \ldots,$$

ce qui donne

$$a_0 = \frac{2i\pi}{8\pi^2 k - 2i\pi}$$

et la relation de récurrence

$$a_n[4\pi^2(2+n) - 2i\pi] + 8n\pi^2 a_{n-1} = 0$$

définissant un développement convergent.

La solution holomorphe $s(t')$ au point $t' = -k$ n'a comme seul point singulier que $t' = k$ au-dessous de l'axe réel. Sa transformée de Fourier $\overline{\mathcal{F}}(s)$ vérifie donc (III_3) pour $l = 0$, c'est la fonction ξ de carré sommable *nulle* pour $r < 0$.

Car

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2i\pi r t'} s(t')\, dt' = 0 \qquad \text{si} \quad r < 0 ;$$

et alors ξ vérifie une des équations

$$\mathrm{H}^{\star}_{3,l}(\xi) \mp i\xi = 0,$$

donc $\mathrm{H}^{\star}_{3,l}(\xi)$ n'est pas autoadjoint

Donc on ne peut choisir comme domaine de définition pour H un ensemble de fonctions contenu dans $\mathcal{S}_{\mathrm{R}^3}$ sur lequel $\mathrm{H}^p(\varphi) \in \mathrm{D}_0$ quel que soit p.

BIBLIOGRAPHIE.

[I] Weitzel, *Lehrbuch des Theorischen Physik*, Springer, 1950.

[II] J. V. Neumann, *Fondements mathématiques de la mécanique quantique*, Alcan, 1946, traduction Proca.

[III] Bèla V. Nagy, *Spectral Darstellung linearer transformationen des Hilbertschen Raumes*, Springer, 1942.

[IV] L. Schwartz, *Théorie des Distributions* (Hermann, *Actualités Scientifiques et Industrielles*, t. **1091** et **1122**).

[V] L. Schwartz, *Transformation de Laplace des distributions* (Communication du Séminaire de Mathématiques de l'Université de Lund, tome supplémentaire, 1952, dédié à M. Riesz).

[VI] J. Colmez, *Définition de certains opérateurs différeniiels dans un espace de Hilbert de fonction de carré sommable* (*C. R. Acad. Sc.*, t. **240**, 1955, p. 37-39).