

RÉSOLUTION DE L'ATOME D'HYDROGÈNE PAR L'ÉTUDE DE SYMÉTRIES

ALEXANDRE MICHEL, THOMAS KOSC

Le modèle de l'atome d'hydrogène est le premier succès historique de la mécanique quantique, ayant prédit les niveaux d'énergie quantifiés de l'électron. Son enseignement dans le cycle universitaire est capital. Pourtant, sa résolution exacte passe souvent par de lourds calculs analytiques menés à partir de l'équation de Schrödinger, qu'il est possible d'éviter en considérant toutes les propriétés de symétrie qu'un tel système possède. L'objectif de cet article est d'aboutir au résultat bien connu des niveaux quantifiés de l'atome d'hydrogène sans effectuer de calculs analytiques.

1. INTRODUCTION

Cet article traite la quantification des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène par une résolution algébrique. C'est Pauli [1] qui en 1926 trouve que les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont discrets et évoluent en $1/n^2$, en s'intéressant uniquement à des considérations algébriques et non en résolvant l'équation de Schrödinger. C'est cette démarche que nous allons reprendre en étudiant un objet qui suscita l'intérêt de nombreux physiciens : le vecteur de Runge-Lenz. L'histoire de ce vecteur tient notamment dans ses nombreuses redécouvertes au fil des siècles. C'est Hermann au XVII^{ème} siècle qui fût le premier à étudié géométriquement ce vecteur dans le cadre d'un problème à force centrale en carré inverse. Laplace fin XVIII^{ème} puis Hamilton au XIX^{ème} et enfin Gibbs début XX^{ème} redécouvrent le vecteur de Runge-Lenz par des approches analytiques [2]. Il sera finalement référencé dans des traités de Runge et Lenz puis utilisé par Pauli comme vecteur de Runge-Lenz dans l'article sur le traitement quantique de l'atome d'hydrogène en 1926 [1].

Il est une quantité conservée du problème de Kepler, directement lié à l'excentricité de la trajectoire. Après l'étude classique de ce vecteur, nous l'utilisons pour la résolution algébrique du problème de l'atome d'hydrogène dans le cadre quantique. C'est grâce à l'étude des algèbres de Lie engendrées par les observables qui commutent avec le hamiltonien du système (qui sont donc liées aux quantités conservées du problème) que l'on peut remonter à la quantification des niveaux d'énergies de l'atome d'hydrogène. Notamment, nous serons amenés à étudier l'algèbre $\mathfrak{so}(4)$ à partir des résultats établis en amont sur l'algèbre de type moment cinétique $\mathfrak{so}(3)$.

2. ÉTUDE CLASSIQUE DU PROBLÈME DE KEPLER ET VECTEUR DE RUNGE-LENZ

Considérons un problème à force centrale à deux corps dans le cadre de la mécanique classique (par exemple un corps gravitant autour d'un astre attracteur), donné par un potentiel de la forme $V(d) = \frac{-k}{d}$, où k est une constante qui caractérise la force d'un corps sur l'autre et d la distance qui les sépare.

Supposons le système isolé, nous rappelons que le mouvement de ce système peut être décomposé en somme d'un mouvement du centre de masse et d'un mouvement relatif des deux corps. Nous nous intéressons uniquement à la dynamique relative des deux corps. Notons \mathbf{p} l'impulsion relative du système formé par l'astre attracteur et l'astre gravitant, \mathbf{r} la position relative des deux astres. Tout se passe donc comme si on étudiait une particule fictive de masse réduite μ , de position \mathbf{r} et d'impulsion \mathbf{p} . Rappelons les expressions de quelques observables qui seront utiles dans la suite de l'étude :

$$\begin{aligned} H &= \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{k}{r} \quad \text{hamiltonien du mouvement relatif,} \\ \mathbf{L} &= \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad \text{moment cinétique de la particule fictive,} \\ \mathbf{A} &= \frac{1}{\mu k} (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) - \frac{\mathbf{r}}{r}. \end{aligned} \quad (1)$$

La dernière quantité est le vecteur de Runge-Lenz adimensionné pour cette particule [2].

Pour un mouvement à force centrale, il est bien connu que le moment cinétique et le hamiltonien sont des quantités conservées, qui proviennent respectivement de l'invariance du problème par rotation et translation temporelle. La conservation du moment cinétique implique que

le mouvement de la particule fictive est contenu dans un plan. Un calcul direct permet de démontrer que le vecteur de Runge-Lenz (1) est également une quantité conservée :

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = 0.$$

Cette relation peut s'écrire en termes de crochets de Poisson, formulation hamiltonienne de l'évolution temporelle des observables, et qui sera utile plus tard pour la transition vers la formulation quantique du problème :

$$\begin{aligned} \{H, \mathbf{A}\} &= \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial q_i} \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

avec somme implicite sur la variable muette i (la convention de sommation d'Einstein est utilisée dans tout l'article). Dans la suite nous énumérons plusieurs propriétés du vecteur de Runge-Lenz classique. Nous montrons que sa norme est liée au mouvement de la particule fictive : puisqu'il est somme d'un produit vectoriel contenant \mathbf{L} et d'une partie radiale (orthogonale à \mathbf{L}) (1), il est orthogonal au moment cinétique. Il est donc contenu dans le plan de la trajectoire à tout instant et étant conservé, on peut fixer l'axe Ox du repère cartésien selon \mathbf{A} et l'axe Oz de ce même repère de façon perpendiculaire au plan de la trajectoire, comme cela est fait sur la Figure 1. Le vecteur de Runge-Lenz donne ainsi une direction privilégiée à la trajectoire, qui se trouve être le demi-grand axe si le mouvement est elliptique. Il n'est nul besoin de préciser l'origine du repère, puisque l'on s'intéresse au mouvement relatif du problème à deux corps. Dans un tel repère, en évaluant la quantité $\mathbf{A} \cdot \mathbf{r}$, nous démontrons que l'équation paramétrisée de la trajectoire s'écrit :

$$r(\theta) = \frac{L^2/\mu k}{1 + A \cos(\theta)}, \quad (3)$$

où θ est défini comme l'angle entre l'axe Ox et le vecteur position \mathbf{r} , ce qui montre que A est directement relié à l'excentricité de la trajectoire. Le prochain résultat est plus essentiel pour la suite de l'article, car relie le carré du vecteur de Runge-Lenz à l'énergie du problème, et nous

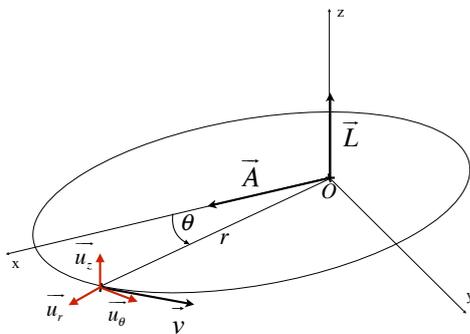


Fig. 1 Schéma visualisant la paramétrisation du mouvement de la particule fictive ainsi que diverses grandeurs vectorielles.

verrons que dans la formulation quantique du problème à force centrale, on trouvera un résultat analogue. En physique classique, nous montrons que :

$$\mathbf{A}^2 = 1 + \frac{2L^2}{\mu k^2} H. \quad (4)$$

Nous retrouvons la propriété que le signe de l'énergie (signe de H) détermine la nature de la trajectoire : si l'énergie est négative, l'excentricité est inférieure à 1 et le système est dans un état lié (trajectoire elliptique). Inversement, si l'énergie est positive ou nulle, l'excentricité est supérieure ou égale à 1 ce qui correspond à un état de diffusion (trajectoire parabolique ou hyperbolique). Nous nous arrêtons là pour les résultats classiques du vecteur de Runge-Lenz dans la cadre du problème de Kepler. Des résultats plus approfondis sont donnés dans les diverses références en fin d'article. Avec pour objectif le résultat de la quantification des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène, étudions la formulation quantique de ce problème à deux corps.

3. APPROCHE QUANTIQUE DU PROBLÈME

Traiter le problème de l'atome d'hydrogène défini précédemment en mécanique quantique se fera en appliquant la quantification canonique (6) sans plus rentrer dans les détails. En termes des variables d'impulsion et position relatives, les relations canoniques du crochet de Poisson en mécanique classique étaient :

$$\{r_i, p_j\} = \delta_{ij}. \quad (5)$$

En formalisme quantique, les observables sont des opérateurs agissant sur l'espace de Hilbert du problème étudié. Nous remplaçons formellement le crochet de Poisson pour les observables par le commutateur, avec un facteur $1 / i \hbar$. Nous utiliserons la quantification canonique habituelle suivante où l'on omet d'écrire l'opérateur identité :

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_i] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (6)$$

Par convention, les observables en mécanique quantique porteront un chapeau, afin de rappeler au lecteur que nous manipulons des opérateurs. D'un point de vue formel, on cherche à diagonaliser le hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{k}{\hat{r}}$, ici exprimé en termes des opérateurs d'impulsion relative et de position relative du système à deux corps interagissant par un potentiel coulombien. De manière générale, la diagonalisation d'un tel hamiltonien indépendant du temps se fait en résolvant l'équation aux valeurs propres $\hat{H}\Psi = E\Psi$, avec E l'énergie du système et Ψ fonction d'onde d'un état propre d'énergie E . Cette équation est une équation aux dérivées partielles dont la résolution analytique est lourde en calculs. Les motivations de ce projet sont justement d'éviter ces calculs en étudiant les symétries du problème. Dans la continuité de la première partie, nous allons donc nous intéresser aux observables qui commutent avec le hamiltonien.

Nous savons qu'en mécanique classique, l'évolution temporelle d'une observable qui ne dépend pas explicitement

du temps est donnée par son crochet de Poisson avec le hamiltonien classique du problème. Nous rappelons qu'en vertu du théorème d'Ehrenfest, l'évolution temporelle de la valeur moyenne d'observable \hat{B} en représentation de Schrödinger, ne dépendant pas explicitement du temps, dans un état quelconque est donnée par :

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{B} \rangle}{dt} = \langle [\hat{B}, \hat{H}] \rangle. \quad (7)$$

Une quantité conservée est donc une observable qui commute avec le hamiltonien du problème. Dans la suite, nous nous plaçons dans la représentation de Schrödinger pour mener les calculs.

Pour un problème à force centrale, il est bien connu que le moment cinétique orbital défini par l'opérateur hermitique $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ est une quantité conservée puisqu'elle commute avec le hamiltonien. Cela en fait une observable intéressante pour la résolution algébrique de l'atome d'hydrogène, d'autant que ses éléments propres sont bien connus. En effet, en utilisant la quantification canonique (6), il est aisément démontrable que les trois composantes du moment cinétique orbital vérifient les relations de commutation :

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k. \quad (8)$$

D'un point de vue mathématique, les trois composantes de l'opérateur vectoriel $\hat{\mathbf{L}}$ génèrent une algèbre de Lie isomorphe à $\mathfrak{so}(3)$ [3]. Cette propriété permet de calculer les valeurs propres des opérateurs $\hat{\mathbf{L}}^2$ et \hat{L}_z . Les valeurs propres de ces deux opérateurs peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \\ \hat{L}_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Elles font intervenir deux paramètres j et m , qui pour des opérateurs satisfaisant les relations de commutation (8) sont contraints à ne prendre que des valeurs entières ou demi-entières : $2j \in \mathbb{N}$ et $2m \in \mathbb{Z}$. Il est toutefois possible de démontrer que pour le moment cinétique orbital $\hat{\mathbf{L}}$, les valeurs demi-entières ne sont pas permises, propriété que nous admettons. Nous savons aussi que la construction des opérateurs de montée et de descente $\hat{L}^\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ permet de générer tous les états propres $|j, m\rangle$, et montrer qu'à j fixé, m est contraint à varier dans l'intervalle $[-j, j]$.

Un moment cinétique en mécanique quantique est défini comme un opérateur vectoriel vérifiant les relations de commutations (8). Nous pouvons donc généraliser les résultats précédents à tous les moments cinétiques en mécanique quantique. Ils joueront un rôle important dans la suite, car ils serviront à quantifier les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène. Pour autant, bien que les vecteurs propres du moment cinétique orbital soient aussi des vecteurs propres du hamiltonien avec lequel il commute, rien ne relie le moment cinétique à l'énergie du problème. En d'autres termes, les valeurs propres de $\hat{\mathbf{L}}$ ne nous renseignent pas sur les valeurs des énergies du problème (bien que les vecteurs propres associés renseignent sur les dégénérescences des valeurs propres du hamiltonien), ce qui

motive l'étude d'une autre grandeur : le vecteur de Runge-Lenz.

Nous rappelons qu'en mécanique classique, l'expression du vecteur de Runge-Lenz était

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\mu k} (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) - \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (10)$$

En appliquant le principe de correspondance, il convient de faire attention à l'hermiticité de l'opérateur de Runge-Lenz. Notons que $(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}})_i^\dagger = -(\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}})_i$. Nous prendrons donc pour expression de l'opérateur de Runge-Lenz [2] :

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}}{2\mu k} - \frac{\hat{\mathbf{r}}}{\hat{r}}, \quad (11)$$

qui assure l'hermiticité de $\hat{\mathbf{A}}$. Notons aussi le choix d'adimensionner cette observable. L'idée est maintenant de s'intéresser aux différentes propriétés de l'opérateur de Runge-Lenz, et voir comment elles sont modifiées relativement au cas classique vu en Section 2.

La propriété essentielle qui motive l'étude même de l'opérateur de Runge-Lenz est sa relation de commutation avec le hamiltonien du problème. Il se trouve que cet opérateur commute avec le hamiltonien, donc qu'il s'agit toujours d'une quantité conservée, à prendre au sens quantique (son évolution temporelle en représentation de Heisenberg est nulle) :

$$[\hat{H}, \hat{A}_j] = 0. \quad (12)$$

D'autre part, nous avons vu qu'en mécanique classique, la définition du vecteur de Runge-Lenz conduisait directement à son orthogonalité au moment cinétique classique. Le produit scalaire $\mathbf{L} \cdot \mathbf{A}$ était donc nul. Ce résultat est toujours valable en formulation quantique, bien qu'il ne constitue plus un produit scalaire, seulement une somme de composition d'opérateurs :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{A}} &= \hat{L}_k \hat{A}_k = 0, \\ \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{L}} &= \hat{A}_k \hat{L}_k = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Nous insistons sur le fait que ce résultat n'implique pas que ces deux opérateurs commutent. Leur relation de commutation est d'ailleurs non triviale et est donnée par [4], [5] et [6] :

$$[\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{A}_k = [\hat{A}_i, \hat{L}_j]. \quad (14)$$

L'étendue de ces calculs de commutateurs, bien que représentant une grande partie du travail à effectuer, revêt peu d'intérêt physique. Ils se calculent tous à partir de la relation de commutation canonique (6). C'est dans ce sens que nous donnons un dernier commutateur d'importance capitale pour la suite :

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k - \frac{2\hat{H}}{\mu k^2}. \quad (15)$$

On peut par contre noter le changement par rapport au cas classique de la formule du carré de l'opérateur $\hat{\mathbf{A}}$ qui nous servira dans la suite de l'étude :

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \frac{2}{\mu k^2} \hat{H} (\hat{\mathbf{L}}^2 + \hbar^2) + 1. \quad (16)$$

Lorsque \hbar tend vers 0, on retrouve le résultat classique (4). L'apparition d'un terme supplémentaire vient du fait que nous manipulons des opérateurs et non plus des scalaires, avec des relations de commutation non triviales. En résumé pour le moment, nous avons formulé l'approche quantique du problème de l'atome d'hydrogène. Il s'agit somme toute de diagonaliser le hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{k}{\hat{r}}$. Nous avons vu que le moment cinétique orbital commute avec le hamiltonien ce qui signifie que ces deux opérateurs sont codiagonalisables. Cependant, l'action du hamiltonien sur les états propres du moment cinétique n'est pas connue, ce qui nous empêche de remonter aux valeurs propres du hamiltonien, donc aux énergies de l'atome d'hydrogène. C'est l'opérateur de Runge-Lenz qui va nous permettre de conclure sur la quantification de ces énergies.

4. ALGÈBRE $\mathfrak{so}(4)$ ET QUANTIFICATION DE L'ÉNERGIE

L'idée est de construire des observables intéressantes, à savoir des observables aisément diagonalisables et qui apportent des informations sur le spectre du hamiltonien. Pour la suite, prenons un sous-espace propre de l'espace de Hilbert sur lequel le hamiltonien admet E comme valeur propre et notons-le \mathcal{H}_E . Faisons l'hypothèse que cette énergie soit négative. Il s'agit d'une hypothèse raisonnable, dans le sens où nous cherchons à décrire les états liés de l'atome d'hydrogène. Considérons alors les deux opérateurs vectoriels suivant agissant sur ce sous-espace propre :

$$\begin{aligned}\hat{K}_+ &= \frac{1}{2} \left(\hat{L} + \sqrt{\frac{\mu k^2}{-2E}} \hat{A} \right), \\ \hat{K}_- &= \frac{1}{2} \left(\hat{L} - \sqrt{\frac{\mu k^2}{-2E}} \hat{A} \right).\end{aligned}\quad (17)$$

Puisque ce sont des combinaisons linéaires du moment cinétique et du vecteur de Runge-Lenz, les composantes des opérateurs \hat{K}_+ et \hat{K}_- commutent avec le hamiltonien, donc stabilisent tous ses sous-espaces propres, en particulier celui d'énergie E auquel on s'intéresse. Pour les calculs à venir, comme nous ne manipulerons que des opérateurs stabilisant le sous-espace propre d'énergie E , nous remplacerons l'opérateur hamiltonien \hat{H} qui interviendra dans les expressions trouvées par le scalaire E .

En utilisant les relations de commutation (14) et (15), ainsi que la remarque précédente, on parvient à démontrer que les deux opérateurs ainsi construits commutent entre eux :

$$[(\hat{K}_+)_i, (\hat{K}_-)_j] = 0. \quad (18)$$

De la même manière, on démontre que les relations de commutations des deux opérateurs vectoriels sont de type moment cinétique :

$$\begin{aligned}[(\hat{K}_+)_i, (\hat{K}_+)_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} (\hat{K}_+)_k, \\ [(\hat{K}_-)_i, (\hat{K}_-)_j] &= i\hbar \epsilon_{ijk} (\hat{K}_-)_k.\end{aligned}\quad (19)$$

C'est une étape importante du raisonnement. Les opérateurs \hat{K}_+ et \hat{K}_- engendrent tous les deux une algèbre de Lie isomorphe à $\mathfrak{so}(3)$ et puisqu'ils commutent entre eux, ces deux algèbres sont indépendantes. Formulé autrement, en rappelant que $\mathfrak{so}(3) \times \mathfrak{so}(3)$ est isomorphe à $\mathfrak{so}(4)$, \hat{K}_+ et \hat{K}_- sont les générateurs d'une algèbre isomorphe à $\mathfrak{so}(4)$. Nous sommes donc en train de chercher à caractériser les éléments propres d'opérateurs générant une algèbre de type $\mathfrak{so}(4)$.

Nous admettons que le sous-espace propre d'énergie E que l'on étudie est de dimension finie. Il est alors une représentation de $\mathfrak{so}(4)$ de dimension finie, donc on sait qu'il peut s'écrire comme somme de représentations irréductibles de $\mathfrak{so}(4)$. Cherchons alors toutes les représentations irréductibles de cette algèbre. On utilise le théorème [3] énonçant qu'une représentation irréductible de $\mathfrak{so}(4)$ est le produit tensoriel de deux représentations irréductibles de $\mathfrak{so}(3)$. Or nous savons déjà caractériser les représentations irréductibles de $\mathfrak{so}(3)$ (9) : elles sont indexées par un demi-entier s , et décrites par une base $|s, p\rangle$ où l'on a $p \in [-s, s]$. Choisir une représentation irréductible de $\mathfrak{so}(4)$, c'est alors choisir un couple de demi-entiers (s_+, s_-) ; notons-la $V(s_+, s_-)$. Une base de cette représentation est donnée par l'Équation (20) :

$$|s_+, s_-, p_+, p_-\rangle. \quad (20)$$

Pour s_+ fixé (on rappelle que s_+ est positif ou nul), p_+ peut varier entre $-s_+$ et s_+ , et on a le même résultat pour s_- et p_- . L'action des opérateurs \hat{K}_\pm^2 et $(\hat{K}_\pm)_z$ sur les vecteurs de la base ainsi définie est :

$$\begin{aligned}\hat{K}_+^2 |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle &= \hbar^2 s_+ (s_+ + 1) |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle \\ \hat{K}_-^2 |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle &= \hbar^2 s_- (s_- + 1) |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle, \\ (\hat{K}_+)_z |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle &= \hbar p_+ |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle, \\ (\hat{K}_-)_z |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle &= \hbar p_- |s_+, s_-, p_+, p_-\rangle.\end{aligned}\quad (21)$$

On vient de voir que \mathcal{H}_E est somme directe de représentations irréductibles de $\mathfrak{so}(4)$. Choisissons une de ces représentations, indexée par s_+ et s_- , et telle que l'action des opérateurs \hat{K}_\pm sur les éléments de la base est donnée par l'Équation (21). On calcule alors la valeur de \hat{K}_+^2 et de \hat{K}_-^2 en tant qu'opérateurs que l'on applique à un état du sous-espace propre d'énergie E [4]. Pour cela on utilise notamment les relations (13) ainsi que la formule donnant le carré de l'opérateur \hat{A} en mécanique quantique (16) (différente de celle du cas classique) :

$$\hat{K}_+^2 = \hat{K}_-^2 = -\frac{\mu k^2}{8E} - \frac{\hbar^2}{4}. \quad (22)$$

Cette dernière égalité, mise de paire avec l'Équation (21), implique l'égalité $s_+ = s_-$. On définit alors un seul demi-entier s afin d'alléger les notations. Nous introduisons un nouveau nombre noté n tel que $n = 2s + 1 \in \mathbb{N}^*$. On calcule finalement la quantité suivante de deux manières différentes (avec l'Équation (21) d'une part et avec

l'Équation (22) d'autre part) :

$$\begin{aligned} -2\hat{K}_+^2 - 2\hat{K}_-^2 &= -\hbar^2 (n^2 - 1) \\ &= \frac{\mu k^2}{2E} + \hbar^2. \end{aligned} \quad (23)$$

Il en découle le résultat bien connu de l'énergie quantifiée de l'atome d'hydrogène :

$$E = \frac{-\mu k^2}{2\hbar^2 n^2} \propto \frac{-1}{n^2}, \quad (24)$$

où n est le nombre quantique principal que l'on obtient avec l'approche analytique. On définit alors $E_n = \frac{-\mu k^2}{2\hbar^2 n^2}$. Cette formule donne les niveaux d'énergie discrets de l'atome d'hydrogène sans considération du spin ni des effets relativistes.

Nous venons de démontrer que, prenant un sous-espace propre d'énergie E que l'on suppose de dimension finie, l'énergie ne peut prendre que la forme donnée par l'Équation (24). Ce sous-espace peut s'écrire comme une somme directe de représentations irréductibles $V(s, s)$ apparaissant $q(s)$ fois : on note alors $\mathcal{H}_E = V(s, s)^{q(s)}$, s étant fixé par la relation $n = 2s + 1$. L'entier $q(s)$ ainsi défini correspond à la multiplicité de $V(s, s)$.

Pour reconstruire l'espace de Hilbert \mathcal{H} en entier, il convient d'effectuer la somme directe des sous-espaces propres d'énergie E_n . Formellement, la dernière phrase peut se traduire mathématiquement par l'égalité :

$$\mathcal{H} = \bigoplus_s V(s, s)^{q(s)}. \quad (25)$$

La question qui se pose maintenant est : pour un demi-entier s donné, avec quelle multiplicité la représentation $V(s, s)$ apparaît-elle ? En particulier, nous n'avons pas démontré que $q(s)$ était toujours non nul. Si $q(s)$ s'annulait pour un certain s_0 , cela signifierait que le sous-espace propre associé à l'énergie E_{2s_0+1} est vide, donc que l'énergie en question n'est en fait pas une solution du problème. Nous admettons que $q(s) = 1$ pour tout demi-entier positif s : en parcourant l'espace de Hilbert \mathcal{H} , chaque représentation $V(s, s)$ est atteinte, et elle n'est atteinte qu'une seule fois.

Par conséquent, le spectre de l'atome d'hydrogène est exactement le spectre donné par l'Équation (24) où l'entier n peut prendre toutes les valeurs de \mathbb{N}^* . Une autre conséquence porte sur la dégénérescence de l'énergie E_n . À n fixé, le sous-espace propre en question est isomorphe à la représentation de $\mathfrak{so}(4)$ que l'on a notée $V(s, s)$ (avec $n = 2s + 1$), dont on sait qu'elle est de dimension $(2s+1)^2 = n^2$: on retrouve la dégénérescence bien connue du problème de l'atome d'hydrogène (sans considération de spin).

5. CONCLUSION

Pour conclure, nous avons vu qu'il était possible de résoudre le problème de l'atome d'hydrogène de façon quan-

tique en n'étudiant que des propriétés algébriques. Cette démarche est d'autant plus intéressante qu'elle est motivée par l'étude de quantités conservées, donc de symétries, qui jouent un rôle fondamental en physique. La symétrie liée au vecteur de Runge-Lenz n'est pas développée dans ce projet, et donnerait une suite intéressante. Nous avons vu que l'algèbre de Lie liée à cette symétrie est $\mathfrak{so}(4)$, et l'interprétation de cette symétrie est rendue difficile par le fait qu'une représentation matricielle de cette algèbre se ferait en dimension 4 : il s'agirait de rotations dans \mathbb{R}^4 . Le fait qu'elle ne soit pas intuitive lui vaut parfois le nom de symétrie cachée. Une discussion détaillée est faite à ce sujet dans la référence [7]. On peut également relier les résultats et les paramètres trouvés algébriquement avec les formules analytiques et les nombres quantiques obtenus en résolvant l'équation de Schrödinger.

REMERCIEMENTS

Nous tenons sincèrement à remercier Karol Kozłowski pour toutes ses remarques constructives qu'il a faites sur notre travail, ainsi que Sylvain Lacroix pour ses relectures attentives, ses explications et pour nous avoir accompagnés tout au long de ce projet. Enfin, nous remercions Camille Eloy pour nous avoir donné l'opportunité de diffuser cet article dans ce journal.

RÉFÉRENCES

- [1] W PAULI JR. "Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik". In : *Zeitschrift für Physik* 36.5 (1926), p. 336–363.
- [2] Alex ALEMI. "Laplace-Runge-Lenz Vector". In : (2009).
- [3] Robert GILMORE. *Lie groups, physics, and geometry : an introduction for physicists, engineers and chemists*. Cambridge University Press, 2008.
- [4] M.J.G. Veltman B.Q.P.J. de WIT et G. 't HOOFT. "Lie groups in physics". In : *Institute for Theoretical Physics Utrecht University Beta Faculty* (2007).
- [5] Myron BANDER et Claude ITZYKSON. "Group theory and the hydrogen atom (I)". In : *Reviews of modern Physics* 38.2 (1966), p. 330.
- [6] DGW PARFITT et ME PORTNOI. "The two-dimensional hydrogen atom revisited". In : *Journal of Mathematical Physics* 43.10 (2002), p. 4681–4691.
- [7] Sean J. WEINBERG. "The SO(4) Symmetry of the Hydrogen Atom". In : (2011).

□ ALEXANDRE MICHEL
M2 Sciences de la Matière
Parcours FEADéP Physique
ENS de Lyon - Université Lyon 1
alexandre.michel@ens-lyon.fr

□ THOMAS KOSC
M2 Sciences de la Matière
Parcours Sciences et Innovations
ENS de Lyon - Université Lyon 1
thomas.kosc@ens-lyon.fr