

Chapitre V : Le moment cinétique en mécanique quantique

1

I) Intérêt du moment cinétique en mécanique quantique

II) Relations de commutation des moments cinétiques

Moment cinétique orbital, Moment cinétique (généralisation)

III) Spectre d'un moment cinétique

Valeurs propres et vecteurs propres de \hat{J}^2 et \hat{J}_Z

IV) Opérateurs « échelle » \hat{J}_+ et \hat{J}_-

V) Base standard et représentation standard du moment cinétique

VI) Le moment cinétique de spin

Valeurs et vecteurs propres, matrices de Pauli, moment magnétique de spin

VII) Le moment cinétique orbital

Harmoniques sphériques

Chapitre V : Le moment cinétique en mécanique quantique

2

I) Intérêt du moment cinétique en mécanique quantique

1) Le Hamiltonien d'un système en **rotation** peut être exprimé en fonction de **son moment cinétique orbital**

→ Mouvement de rotation par ex des molécules

Classification des niveaux d'énergie : - moléculaires

- atomiques

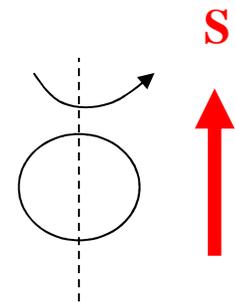
- nucléaires

Observation des niveaux discrets par spectroscopie

→ Interprétation microscopique du **magnétisme**

2) Le moment cinétique de spin (pas d'analogie en mécanique classique)

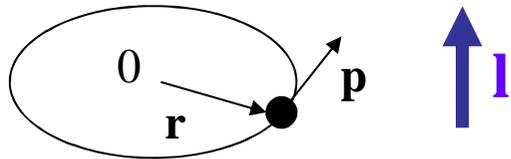
→ Interprétation microscopique du **magnétisme**



II) Relations de commutation des moments cinétiques

1) Le moment cinétique orbital

En mécanique classique $\mathbf{l} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$



$$\begin{cases} l_x = yp_z - zp_y \\ l_y = zp_x - xp_z \\ l_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$

En mécanique quantique, on applique les règles de quantification

$$\begin{array}{l} \mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{R}} \\ \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{P}} \end{array} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{l} \rightarrow \hat{\mathbf{L}} \quad \hat{\mathbf{L}} \quad \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y \\ \hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z \\ \hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x \end{cases}$$

On peut montrer les relations de commutations suivantes : (voir Annexe A)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar\hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar\hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar\hat{L}_y \end{aligned}$$

2) Le moment cinétique $\hat{\mathbf{J}}$ (généralisation)

On définit le moment cinétique $\hat{\mathbf{J}}$ par des relations de commutations

On appelle moment cinétique $\hat{\mathbf{J}}$ ($\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$) tout ensemble d'observables ($\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$) qui vérifient les relations de commutations :

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] &= i\hbar\hat{J}_z \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] &= i\hbar\hat{J}_x \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] &= i\hbar\hat{J}_y \end{aligned}$$

On définit l'observable \hat{J}^2 :

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

On peut montrer que : (voir Annexe A feuille manuscrite)

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_y] = 0$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

Ce qui s'écrit également : $[\hat{J}^2, \hat{\mathbf{J}}] = 0$

D'un point de vue physique, cela signifie que l'on peut mesurer simultanément avec une incertitude nulle le carré du moment cinétique et sa projection suivant un axe

III) Spectre d'un moment cinétique

a) Valeurs propres

On peut montrer que (voir annexe C)

Les valeurs propres de \hat{J}^2 valent $\mathbf{j(j+1)\hbar^2}$

Les valeurs propres de \hat{J}_z valent $\mathbf{m\hbar}$

Avec **j entier ou demi-entier positif** : $j=0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$

Et pour j donné: **m = -j, -j+1, ..., j-1, j**

b) Vecteurs propres $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ Il existe base de kets propres communs

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

(Rq ces opérateurs ne constituent obligatoirement pas un ECOC)

$|j, m\rangle$ est ket propre de J^2 associé à la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$
est ket propre de J_z associé à la valeur propre $m\hbar$

On appelle la base constitués des kets $|j, m\rangle$ la base standard

orthonormalité de la base standard

$$\langle j, m |, j', m' \rangle = \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{m=+j} |j, m\rangle \langle j, m| = \hat{Id}$$

IV) Introduction des opérateurs « échelle » \hat{J}_+ et \hat{J}_-

On définit

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$$

et

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$$

NB : ces opérateurs ne sont pas hermitiques mais sont adjoints l'un de l'autre

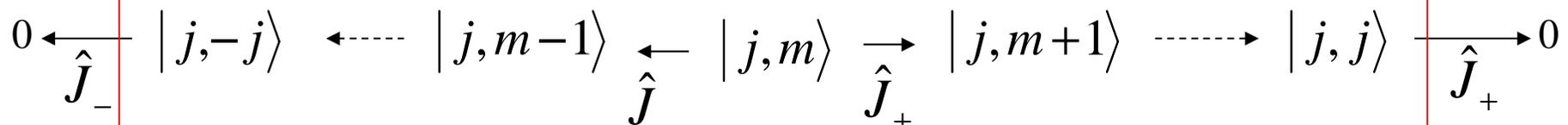
Ces opérateurs sont souvent utilisés ds les calculs (voir relations utiles en annexe BI) et permettent de démontrer les relations de la page 6 de ce cours (qui sont démontrées ds l'annexe C)

Action des opérateurs « échelle » \hat{J}_+ et \hat{J}_- sur les états $|j, m\rangle$

On peut montrer que : (démontré partiellement ds annexe BII)

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad \text{et} \quad \hat{J}_+ |j, +j\rangle = 0$$

$$\hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad \text{et} \quad \hat{J}_- |j, -j\rangle = 0$$



V) Base standard et représentation standard du moment cinétique

Idée: on peut ranger les vecteurs de la base standard ds un certain ordre afin que les représentations de \hat{J}_x , \hat{J}_y , \hat{J}_z et \hat{J}^2 dans cette base soit des matrices les plus simples possibles

● Quelque soit l'ordre des vecteurs de la base standard

i) Représentation de \hat{J}_z

$$\forall |j, m\rangle \in \mathcal{E}, \hat{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

donc \hat{J}_z est **diagonal** dans la base standard

$$|j, m\rangle \left[\begin{array}{c} \hat{J}_z |j, m\rangle \\ \left(\begin{array}{cc} \diagdown & \text{---} \circ \\ \text{---} m\hbar & \circ \\ \circ & \diagup \end{array} \right) \end{array} \right]$$

ii) Représentation de \hat{J}^2

$$\forall |j, m\rangle \in \mathcal{E}, \hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

donc \hat{J}^2 est **diagonal** dans la base standard

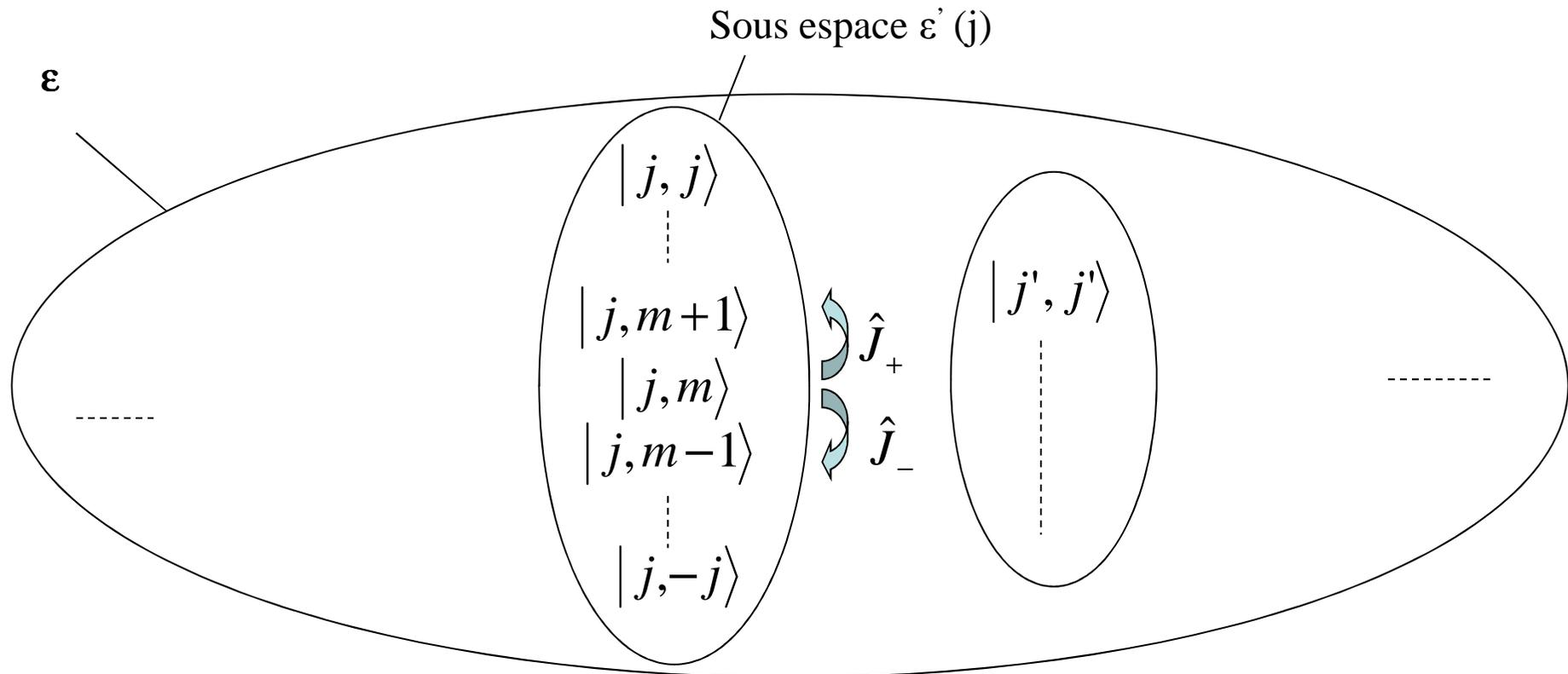
$$|j, m\rangle \left[\begin{array}{c} \hat{J}^2 |j, m\rangle \\ \left(\begin{array}{cc} \diagdown & \text{---} \circ \\ \text{---} j(j+1)\hbar^2 & \circ \\ \circ & \diagup \end{array} \right) \end{array} \right]$$

- Cherchons une partition de l'espace des états ε qui laisse les sous-espaces invariants par \hat{J}_+ et \hat{J}_-

C'est-à-dire par \hat{J}_x , \hat{J}_y car $\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$ et $\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2i$

Cette partition est : $\varepsilon = \bigoplus \varepsilon'(j)$ somme directe sur tous les j

Dans $\varepsilon'(j)$, j est fixé et $-j \leq m \leq j$ dégénérescence ($\varepsilon'(j)$) = $2j+1$



3) Représentation de \hat{J}_{\pm} dans la base standard (partitionnée en $\varepsilon'(j)$)

La matrice correspondante est bloc-diagonale

	$\hat{J}_{\pm}(\varepsilon'(j))$	$\hat{J}_{\pm}(\varepsilon'(j'))$	
$\varepsilon'(j)$	$(2j+1)(2j+1)$	0	0	0
$\varepsilon'(j')$	0	$(2j'+1)(2j'+1)$	0	0
.	0	0		0
.				
.				
.				

\hat{J}_{\pm}

\hat{J}_{\pm} sont bloc-diagonales ➔ \hat{J}_x et \hat{J}_y sont bloc-diagonales

Bilan: dans la base standard (partitionnée en $\varepsilon'(j)$)

\hat{J}_z et \hat{J}^2 sont diagonales

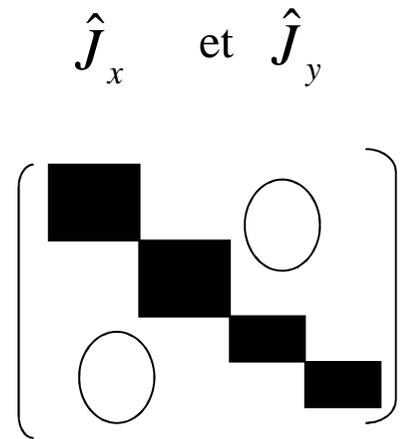
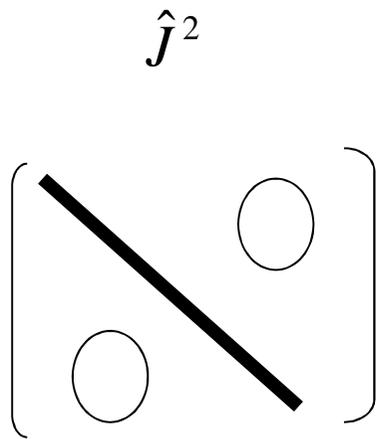
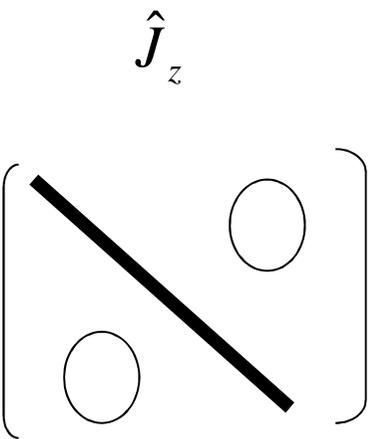
\hat{J}_x et \hat{J}_y sont bloc-diagonales

Récapitulons $\{ |j, m\rangle \}_{k, j, m}$ base standard partitionnée en $\varepsilon'(j)$

$$\langle j, m | \hat{J}^2 | j', m' \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}$$

$$\langle j, m | \hat{J}_z | j', m' \rangle = m\hbar \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}$$

$$\langle j, m | \hat{J}_\pm | j', m' \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{j, j'} \delta_{m, m' \pm 1}$$



Généralisation:

A priori, même si $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ les opérateurs \hat{J}^2, \hat{J}_z ne constituent pas un ECOC

On choisit une autre observable, notée \hat{A} telle que $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{A}$ forment un ECOC

Les valeurs propres de \hat{A} sont notées k

On va noter la base de kets propres communs aux trois observables $|k, j, m\rangle$
(base standard)

$$\hat{J}^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle$$

$$\hat{A} |k, j, m\rangle = k |k, j, m\rangle$$

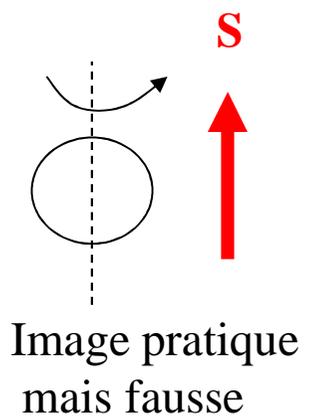
VI) Le moment cinétique de spin

Contrairement au moment cinétique orbital, il n'a pas d'équivalent classique

Origine : mécanique quantique relativiste (Equation de Dirac)

Mise en évidence expérimentale: expérience de Stern et Gerlach (1922)

Spin 1/2 : ex spin de l'électron



Notations $\hat{\mathbf{J}} \longrightarrow \hat{\mathbf{S}}$

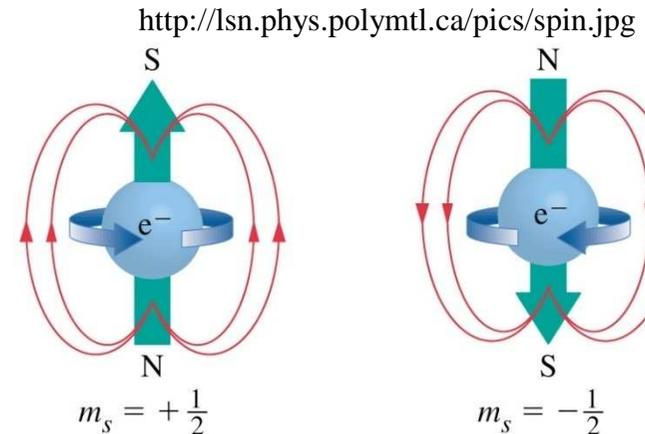
$\hat{J}_z \longrightarrow \hat{S}_z$ $j \longrightarrow s$

$\hat{J}^2 \longrightarrow \hat{S}^2$ $m \longrightarrow m_s$

Spin « 1/2 » cas particulier de la théorie du moment cinétique $j = 1/2$ noté $s = 1/2$

$m_s = -1/2, +1/2$

Base standard $\left\{ \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$



Dans le sous-espace $\mathcal{E}'\left(\frac{1}{2}\right)$

$$\hat{S}_z \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) - \left(-\frac{1}{2}\right) \left(1 - \frac{1}{2}\right)} \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

$$\hat{S}_+ \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

$$\hat{S}_- \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

On a donc

$$\hat{S}_+ \rightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_- \rightarrow \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

donc, comme $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$ et $\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$

On a :

$$\left. \begin{aligned} \hat{S}_x &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_y &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_z &\rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \text{Matrices de Pauli}$$

Une conséquence du moment cinétique de spin : le moment magnétique de spin de l'électron

a) Rappel: en mécanique classique, à un électron dont le mouvement est un mvt de rotation circulaire \longrightarrow Boucle de courant \longrightarrow Moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$

Le moment magnétique orbital de l'électron s'écrit
$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \mathbf{l}$$

On applique le principe de correspondance $\mathbf{l} \rightarrow \hat{\mathbf{L}}$

L'opérateur moment magnétique orbital de l'électron s'écrit
$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \hat{\mathbf{L}}$$

b) Il existe également un moment magnétique d'origine purement quantique dû au spin de l'électron

L'opérateur moment magnétique de spin de l'électron s'écrit
$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \hat{\mathbf{S}}$$

Nb1) Ces moments magnétiques sont à l'origine du **magnétisme**

Nb2) tout ceci est vrai pour l'électron dans le vide

VII) Le moment cinétique orbital

Ecriture en représentation « \mathbf{r} » en coordonnées sphériques

En mécanique classique $\mathbf{l} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$

$$\begin{cases} l_x = yp_z - zp_y \\ l_y = zp_x - xp_z \\ l_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$

on applique les règles de quantification

$$\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{R}}$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{P}}$$

$$\mathbf{l} \rightarrow \hat{\mathbf{L}}$$

$$\begin{cases} \hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y \\ \hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z \\ \hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x \end{cases}$$

On passe en représentation « \mathbf{r} »: $\langle \mathbf{r} | klm \rangle = \langle x, y, z | klm \rangle = \psi_{klm}(x, y, z)$

- En coordonnées cartésiennes

$$\begin{array}{ll} \hat{X} \rightarrow .x & \hat{P}_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{Y} \rightarrow .y & \hat{P}_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{Z} \rightarrow .z & \hat{P}_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \end{array}$$



$$\begin{cases} \hat{L}_x \Rightarrow -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{L}_y \Rightarrow -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{L}_z \Rightarrow -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{cases}$$

- On passe en coordonnées sphériques $\langle \mathbf{r} | klm \rangle = \langle r, \theta, \varphi | klm \rangle = \psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$

19

$(x, y, z) \Rightarrow (r, \theta, \varphi)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{L}_x \Rightarrow i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y \Rightarrow i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z \Rightarrow -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}^2 \Rightarrow -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \\ \hat{L}_+ \Rightarrow \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_- \Rightarrow \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{array} \right.$$

$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$ sont des fonctions propres communes de \hat{L}^2 et \hat{L}_z

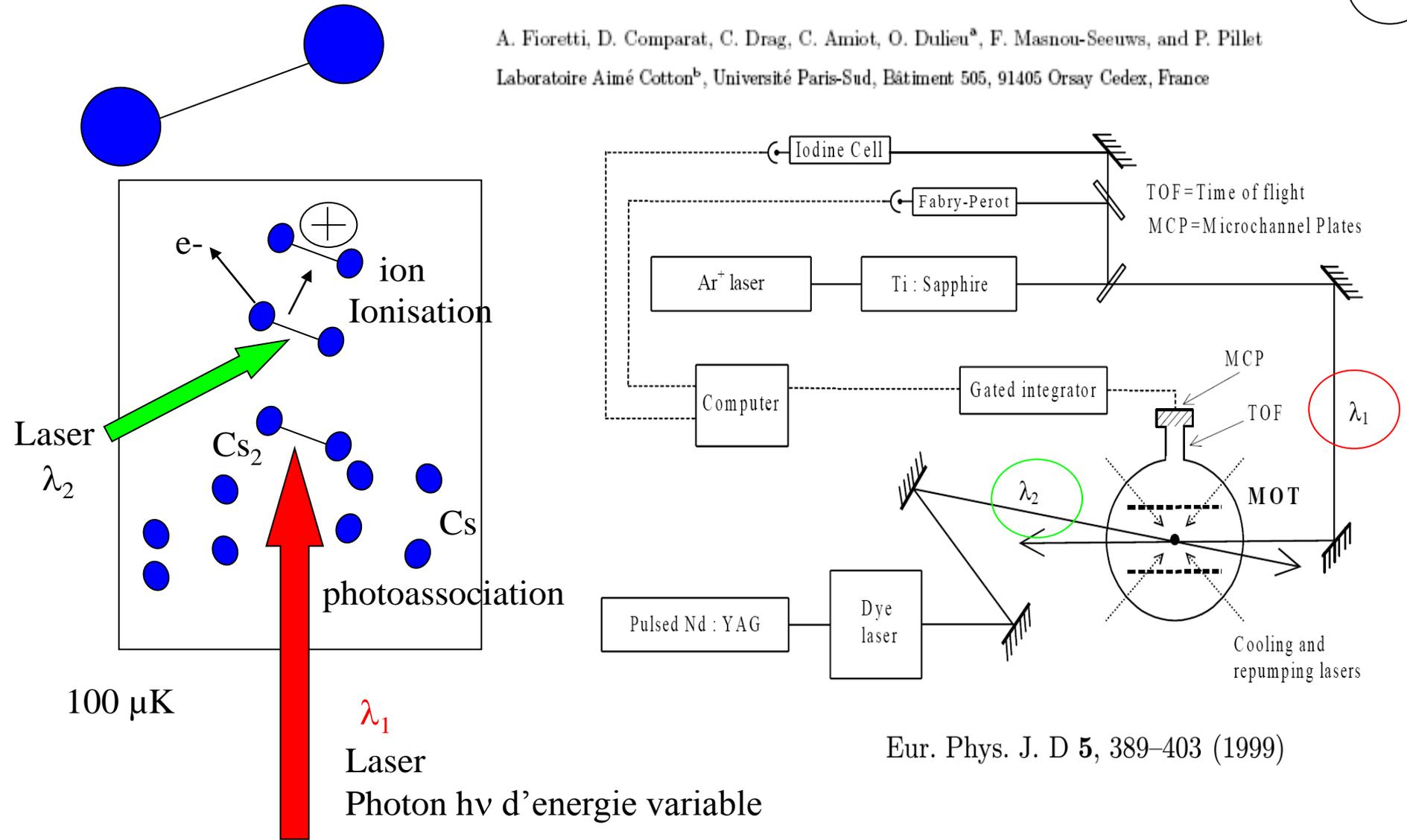
Les premières harmoniques sphériques

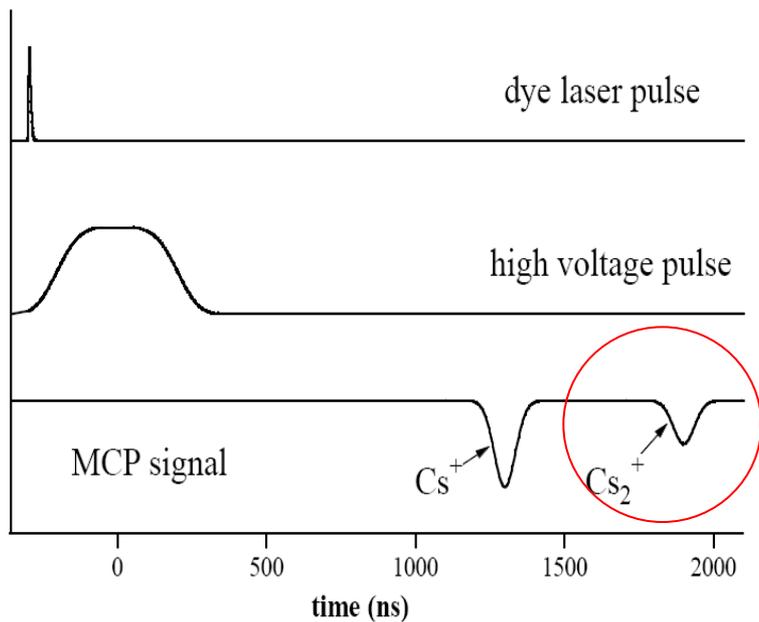
$$\begin{aligned} l=0 \quad m=0 \quad Y_0^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ l=1 \quad m=0 \quad Y_1^0(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ m=\pm 1 \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \end{aligned}$$

Illustration 1: utilisation du moment cinétique orbital ds la résolution du pb de la molécule de Cesium Cs₂ en rotation (rotateur rigide) autour de son centre de masse

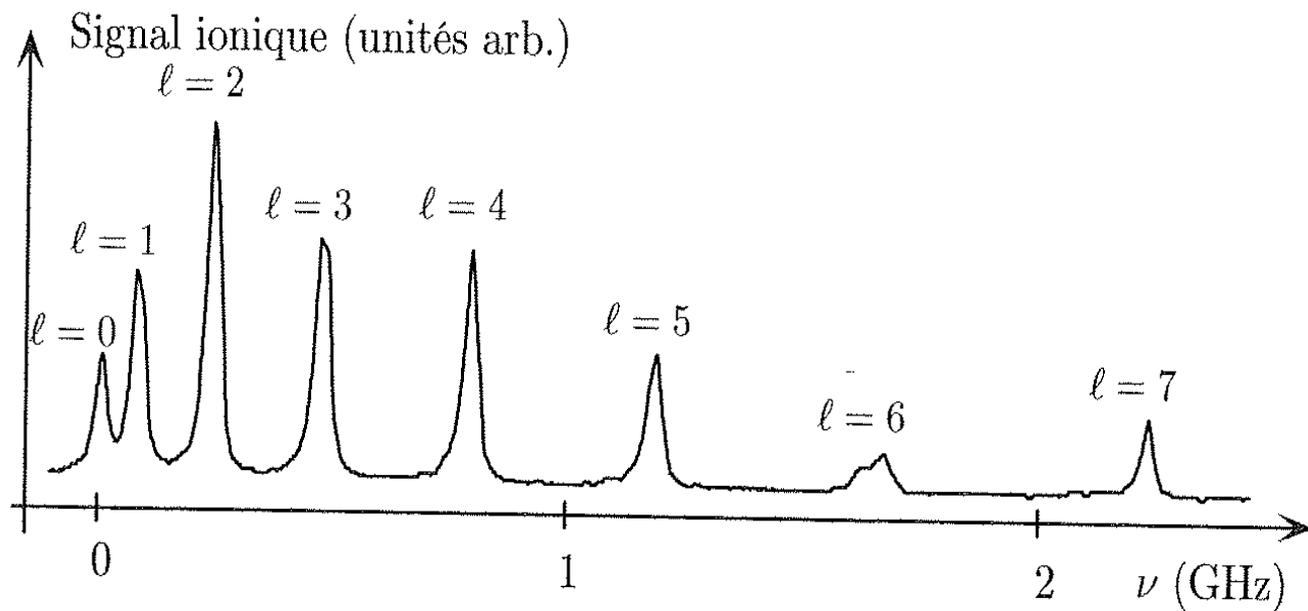
11.1

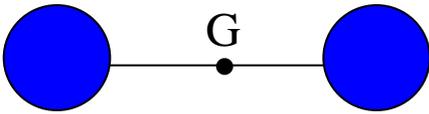
A. Fioretti, D. Comparat, C. Drag, C. Amiot, O. Dulieu^a, F. Masnou-Seeuws, and P. Pillet
 Laboratoire Aimé Cotton^b, Université Paris-Sud, Bâtiment 505, 91405 Orsay Cedex, France





↕ Signal ionique prop au nbre de molécules de Cs_2 créées





$$E = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(r_1 - r_2)$$

11.3

➔ Pb à 2 corps: corps 1 et 2

Soit G le centre de gravité On pose : $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ $\mu = \frac{mm}{m+m} = \frac{m}{2}$ $M = 2m$

Problème à deux corps se ramène à celui d'un système constitué:

- d'une particule fictive située au centre de gravité et de masse M

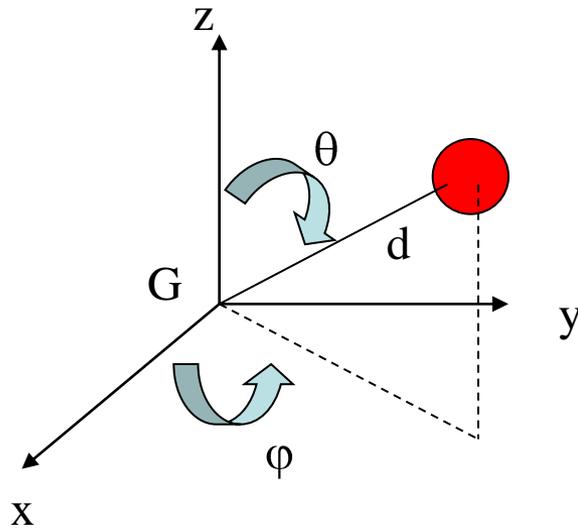
- d'une particule fictive de masse réduite μ , d'impulsion \mathbf{p}_μ et de position $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$

$$E = \frac{p_G^2}{2M} + \frac{p_\mu^2}{2\mu} + V(r)$$

➔ On se place ds le référentiel du centre de gravité $E = \frac{p_\mu^2}{2\mu} + V(r)$

➔ Approximation du rotateur rigide: corps 1 et 2 rigidement liés : $r = \text{cste} = d$

$$E = \frac{p_\mu^2}{2\mu} + \text{cst} \quad \rightarrow \quad E = \frac{p_\mu^2}{2\mu}$$



En représentation « \mathbf{r} »

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \frac{-\hbar^2 \Delta\psi(\mathbf{r})}{2\mu}$$

En coordonnées sphériques

$$\hat{H}\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{-\hbar^2 \Delta\psi(r, \theta, \varphi)}{2\mu}$$

$$\Delta\psi \text{ s'écrit } \Delta\psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2(\psi)}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2(\psi)}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\text{Comme } r = \text{cste} = d \quad \Delta\psi = \frac{1}{d^2} \left(\frac{\partial^2(\psi)}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2(\psi)}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\text{Or } \hat{L}^2 \Rightarrow -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

D'où: $\Delta\psi = \frac{1}{\hbar^2 d^2} L^2\psi \quad \rightarrow \quad \hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \frac{\hat{L}^2\psi(\mathbf{r})}{2d^2\mu}$

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2d^2\mu}$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

$$E = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$$

On pose $I = d^2\mu$

Moment d'inertie

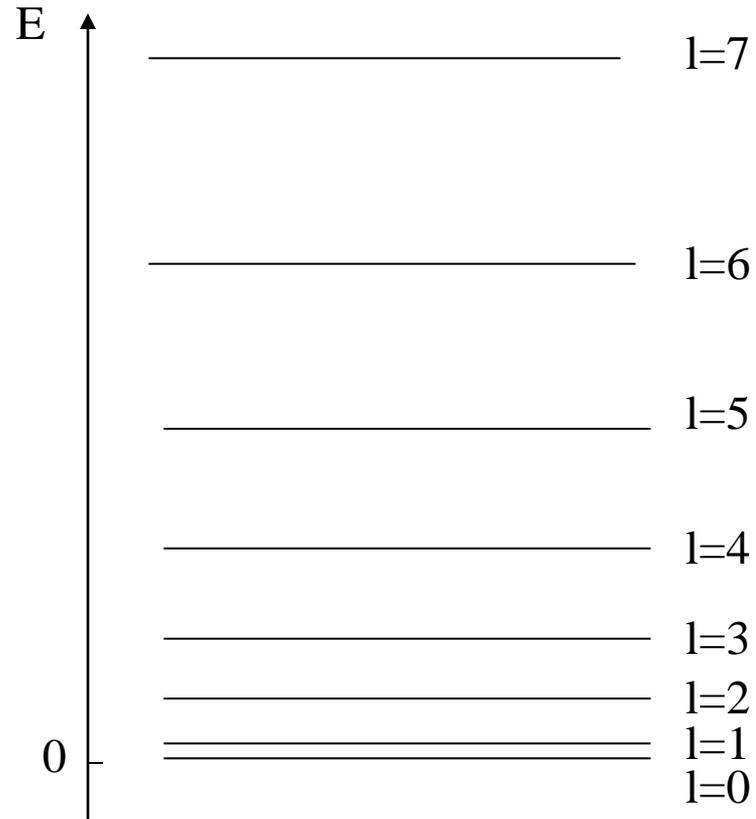


Illustration2: utilisation du moment cinétique orbital ds la résolution (partielle) du pb de l'atome d'hydrogène

12.1

Atome d'hydrogène : un électron et un proton en interaction coulombienne

$$E = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r_e - r_p)}$$

Problème à deux corps se ramène à celui d'un système constitué:

- d'une particule fictive située au centre de gravité et de masse $M = m_e + m_p$

- d'une particule fictive de masse réduite $\mu = (m_e m_p) / (m_e + m_p)$, d'impulsion \mathbf{p}_μ et de position $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$

Cette particule fictive subit un potentiel central : $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r_e - r_p)}$

qui ne dépend que de la distance entre les deux particules initiales (électron et proton)

$V(r, \theta, \phi)$

Ordres de grandeur:

$$\begin{aligned} m_e &= 9.10^{-31} \text{ kg} & \longrightarrow & m_p \sim 1000 m_e \\ m_p &= 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \end{aligned}$$

→ $M \sim m_p$ le proton est pratiquement confondu avec le centre de gravité

→ $\mu \sim m_e$ l'électron est pratiquement confondu avec la particule fictive de masse μ

Par la suite, on s'intéresse au mouvement de la particule fictive de masse μ ,
C'est à dire, en première approximation au mouvement, de l'électron

$$E_e = \frac{\mathbf{p}_\mu^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{(x^2 + y^2 + z^2)}}$$

Principe de correspondance

$$\hat{H}_e = \frac{\hat{p}_\mu^2}{2\mu} + V(\hat{\mathbf{r}})$$

Représentation « r »

$$\hat{H}_e \psi(x, y, z) = \frac{-\hbar^2 \Delta \psi(x, y, z)}{2\mu} + V(x, y, z) \cdot \psi(x, y, z)$$

En coordonnées sphériques

$$\hat{H}_e \psi(r, \theta, \varphi) = \frac{-\hbar^2 \Delta \psi(r, \theta, \varphi)}{2\mu} + V(r, \theta, \varphi) \cdot \psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\text{avec} \quad V(r, \theta, \varphi) = V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\hat{H}_e \psi(r, \theta, \varphi) = \frac{-\hbar^2 \Delta \psi(r, \theta, \varphi)}{2\mu} + V(r) \cdot \psi(r, \theta, \varphi)$$

$$\Delta \psi \text{ s'écrit } \Delta \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 (\psi)}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 (\psi)}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\text{Rappel : } \hat{L}^2 \Rightarrow -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\hat{H}_e \psi = \frac{-\hbar^2 \partial^2 (r\psi)}{2\mu r \partial r^2} + \frac{\hat{L}^2 \psi}{2\mu r^2} + V(r) \cdot \psi \quad (\text{a})$$

\hat{L}^2 agit sur les variables θ et φ

$\hat{\mathbf{L}}(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ agit sur les variables θ et φ

\hat{V} agit sur la variable r

$$[\hat{V}, \hat{L}^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}_e, \hat{L}^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{I}^2 \text{ est une constante du mouvement}$$

$$[\hat{V}, \hat{\mathbf{L}}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}_e, \hat{\mathbf{L}}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{l} \text{ est une constante du mouvement}$$

Remarque) en mécanique classique, pour un potentiel central, on a :

12.4

$$\mathbf{F} = -\vec{g} \text{grad } V(r) = -\frac{dV}{dr} \mathbf{e}_r$$

force radiale qui dérive du potentiel central et qui s'exerce sur la particule

Théorème du moment cinétique

$$\frac{d\mathbf{l}}{dt} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{F} = \mathbf{r} \wedge \left(-\frac{dV}{dr} \mathbf{e}_r \right) = \mathbf{0} \longrightarrow \mathbf{l} \text{ est une constante du mouvement}$$

Conséquence $[\hat{H}_e, \hat{L}^2] = 0$ $[\hat{H}_e, \hat{L}_z] = 0$ $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$

 $(\hat{H}_e, \hat{L}^2, \hat{L}_z)$ possèdent une base de vecteurs propres communs

Si nous trouvons une telle base, nous aurons forcément trouvé les états propres de \hat{H}_e

Cherchons à déterminer une base de ce type

Les fonctions Ψ de cette base doivent vérifier:

$$\begin{cases} \hat{H}_e \psi = E \psi \\ \hat{L}^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \psi \\ \hat{L}_z \psi = m\hbar \psi \end{cases}$$



Cherchons des solutions à ce système de 3 équations de la forme $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$

(Car on sait déjà que seules les solutions de ce type satisferont au 2 dernières équations)

d'après (a)
$$\hat{H}_e \psi = \frac{-\hbar^2 \partial^2 (r\psi)}{2\mu r \partial r^2} + \frac{\hat{L}^2 \psi}{2\mu r^2} + V(r) \cdot \psi$$

$$\hat{H}_e \psi = E \psi$$

$$\hat{H}_e R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{-\hbar^2 \partial^2 (rR(r))}{2\mu r \partial r^2} Y_l^m(\theta, \varphi) + \frac{\hat{L}^2 R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)}{2\mu r^2} + V(r) \cdot R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = E R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$



$$\frac{-\hbar^2 \partial^2 (rR(r))}{2\mu r \partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)R(r)}{2\mu r^2} + V(r) \cdot R(r) = E R(r)$$

Pour l donné: une équation avec des solutions notées $E \equiv E_{kl}$ associées aux fonctions $R_{kl}(r)$

On pose: $R_{kl}(r) = \frac{1}{r} u_{kl}(r)$

$$\frac{-\hbar^2 \partial^2 (u_{kl}(r))}{2\mu \partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)u_{kl}(r)}{2\mu r^2} + V(r) \cdot u_{kl}(r) = E_{kl} u_{kl}(r)$$

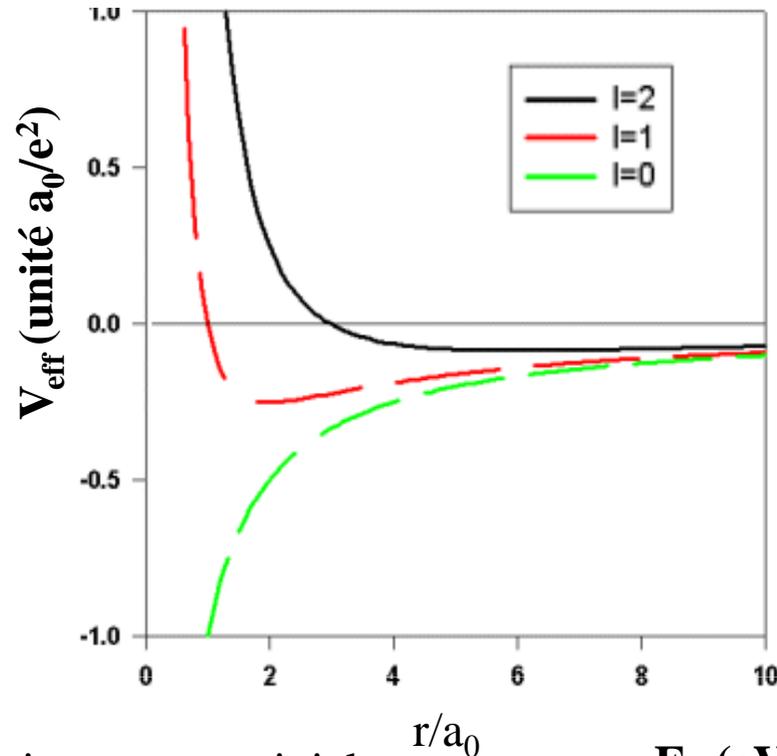
Equation de Schrödinger radiale à une dimension

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \quad \text{est un potentiel effectif}$$

Potentiel effectif
qui dépend de l

$$V_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$$

<http://electron6.phys.utk.edu/qm2/modules/m1-3/2/p1.gif>

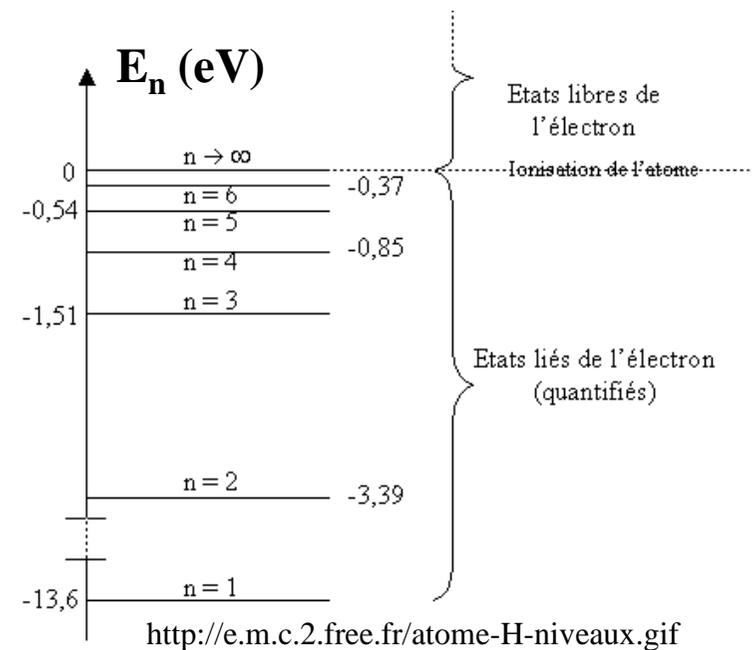


La résolution de cette équation est non triviale
(voir Livre C. Cohen-Tannoudji p804-813)
Les nombres quantiques (k,l) se condensent
en un nombre quantique noté n

On peut montrer

$$n \text{ entier } \geq 1 \text{ et } l=0,1,\dots, n-1$$

$$E_n = -13,6 \text{ eV}/n^2$$



II 1) Montrons que $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ Annexe A

$$[L_x, L_y] = [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] = \underbrace{[y p_z, z p_x]}_{(2)} - \underbrace{[z p_y, z p_x]}_{(2)} - \underbrace{[y p_z, x p_z]}_{(3)} + \underbrace{[z p_y, x p_z]}_{(4)}$$

Calcul de (2) : $[z p_y, z p_x] = z p_y z p_x - z p_x z p_y$

rappel $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ $= z p_y p_x z - z p_x p_y z = z \underbrace{[p_y, p_x]}_{=0} z = 0$

de m (3) = 0

$$\Rightarrow [L_x, L_y] = [y p_z, z p_x] + [z p_y, x p_z] = y p_z z p_x - z p_x y p_z + z p_y x p_z - x p_z z p_y$$

$$= y p_z z p_x - y z p_x p_z + x z p_z p_y - x p_z z p_y$$

$$= y \underbrace{[p_z, z]}_{i\hbar} p_x + x \underbrace{[z, p_z]}_{i\hbar} p_y$$

$$= i\hbar (x p_y - y p_x) = i\hbar L_z \Rightarrow [L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

II 2) Montrons que $[J_x^2, J_x^2] = 0$

$$[J_x^2, J_x^2] = [J_x^2 (J_y^2 + J_z^2), J_x^2] = \underbrace{[J_x^2, J_y^2]}_{=0} + [J_x^2, J_z^2] + [J_y^2, J_x^2] + [J_z^2, J_x^2]$$

$$= [J_y^2, J_x^2] + [J_z^2, J_x^2] = \underbrace{J_y^2 J_x^2 - J_x^2 J_y^2}_{(1)} + \underbrace{J_z^2 J_x^2 - J_x^2 J_z^2}_{(2)}$$

calcul de (1) : $J_y^2 J_x^2 - J_x^2 J_y^2 = J_y (J_y J_x^2) - (J_x^2 J_y) J_y$

$$= J_y (J_x J_y - [J_x, J_y]) - (J_x J_y) J_y$$

$$= J_y (J_x J_y - [J_x, J_y]) - (J_y J_x + [J_x, J_y]) J_y$$

$$= \cancel{J_y J_x J_y} - J_y \underbrace{[J_x, J_y]}_{i\hbar J_z} - \cancel{J_y J_x J_y} - \underbrace{[J_x, J_y]}_{i\hbar J_z} J_y$$

$$= -i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y$$

calcul de (2) : $J_z^2 J_x^2 - J_x^2 J_z^2 = J_z (J_z J_x^2) - (J_x^2 J_z) J_z$

$$= J_z (J_x J_z + [J_z, J_x]) - (J_z J_x + [J_x, J_z]) J_z$$

$$= \cancel{J_z J_x J_z} + J_z \underbrace{[J_z, J_x]}_{i\hbar J_y} - \cancel{J_z J_x J_z} - \underbrace{[J_x, J_z]}_{-i\hbar J_y} J_z$$

$$= i\hbar J_z J_y + i\hbar J_y J_z$$

donc $\{J^2, J_z\} = \textcircled{1} + \textcircled{2} = -i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y + i\hbar J_x J_y + i\hbar J_y J_x$
 $\Rightarrow \{J^2, J_z\} = 0$ de m^e $\{J^2, J_x\} = 0$ et $\{J^2, J_y\} = 0$

III 2) Montrons que $\{J_3, J_+\} = \hbar J_+$ (i)

$$\begin{aligned} \{J_3, J_+\} &= \{J_3, J_x + iJ_y\} = \{J_3, J_x\} + i\{J_3, J_y\} \\ &= i\hbar J_y + i(-i\hbar J_x) \\ &= i\hbar J_y + \hbar J_x = \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+ \end{aligned}$$

Montrons que $\{J_3, J_-\} = -\hbar J_-$ (ii)

$$\begin{aligned} \{J_3, J_-\} &= \{J_3, J_x - iJ_y\} = \{J_3, J_x\} - i\{J_3, J_y\} \\ &= i\hbar J_y - i(-i\hbar J_x) \\ &= i\hbar J_y - \hbar J_x = -\hbar(J_x - iJ_y) = -\hbar J_- \end{aligned}$$

Montrons que $\{J_+, J_-\} = 2\hbar J_3$ (iii)

$$\begin{aligned} \{J_+, J_-\} &= \{J_x + iJ_y, J_x - iJ_y\} = \underbrace{\{J_x, J_x\}}_{=0} + i\{J_x, J_y\} + i\{J_y, J_x\} - i^2 \underbrace{\{J_y, J_y\}}_{=0} \\ &= -i(i\hbar J_z) + i(-i\hbar J_z) = 2\hbar J_3 \end{aligned}$$

Montrons que $\{J^2, J_+\} = 0$ (iv)

$$\{J^2, J_x + iJ_y\} = \underbrace{\{J^2, J_x\}}_{=0} + i\underbrace{\{J^2, J_y\}}_{=0} = 0$$

$$\text{de m^e } \{J^2, J_-\} = \{J^2, J_x - iJ_y\} = \underbrace{\{J^2, J_x\}}_{=0} - i\underbrace{\{J^2, J_y\}}_{=0} = 0$$

Montrons que $J_+ J_- = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_3$ (v)

$$\begin{aligned} J_+ J_- &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i(J_y J_x - J_x J_y) \\ &= J_x^2 + J_y^2 - i(J_x J_y - J_y J_x) \\ &= J_x^2 + J_y^2 - i(i\hbar J_z) = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_3 \end{aligned}$$

de m^e $J_- J_+ = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_3$ (vi)

Montrons que $J^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_3^2$

$$(v) + (vi) \Rightarrow J_+ J_- + J_- J_+ = 2(J_x^2 + J_y^2) \rightarrow J_x^2 + J_y^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+)$$

$$\rightarrow J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_3^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + J_3^2$$

Annexe B: Propriétés des opérateurs « échelle » \hat{J}_+ et \hat{J}_-

B1

I) Relations de calcul utiles

On montre que : (Voir feuille manuscrite (annexe A))

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hbar \hat{J}_+ \quad (\text{i})$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hbar \hat{J}_- \quad (\text{ii})$$

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_z \quad (\text{iii})$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0 \quad (\text{iv})$$

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hbar \hat{J}_z \quad (\text{v})$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - \hbar \hat{J}_z \quad (\text{vi})$$

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_z^2 \quad (\text{vii})$$

II) Action des opérateurs « échelle » \hat{J}_+ et \hat{J}_- sur les états $|j, m\rangle$

B2

Si $|j, m\rangle$ ket propre de \hat{J}^2, \hat{J}_z avec les valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$

Alors, si $m = -j$: $J^-|j, m\rangle = 0$ (i)

si $m > -j$: $J^-|j, m\rangle$ est ket propre de \hat{J}^2 avec la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$ (ii)

est ket propre de \hat{J}_z avec la valeur propre $(m-1)\hbar$ (iii)

$$\begin{aligned}
 \text{(i) si } m=-j \quad \left\| J^-|j, m\rangle \right\|^2 &= \langle j, m | J^+ J^- |j, m\rangle \\
 &= \langle j, m | J^2 - J_z^2 + \hbar J_z |j, m\rangle \\
 &= j(j+1)\hbar^2 - m(m-1)\hbar^2 = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(i) si } m > -j \quad J^2(J_-|j, m\rangle) &= J_-(J^2|j, m\rangle) = \hbar^2(j(j+1))J_-|j, m\rangle \\
 &\quad \uparrow \\
 &\quad [\hat{J}^2, \hat{J}_-] = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_z (J_- |j, m\rangle) &= (J_- J_z - \hbar J_-) |j, m\rangle = m\hbar J_- |j, m\rangle - \hbar J_- |j, m\rangle \\
 &= (m-1)\hbar J_- |j, m\rangle \\
 \uparrow \\
 [\hat{J}_z, \hat{J}_-] &= -\hbar \hat{J}_-
 \end{aligned}$$

de même

Si $|j, m\rangle$ ket propre de \hat{J}^2, \hat{J}_z avec les valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$

Alors, si $m = j$: $J^+ |j, m\rangle = 0$

si $m < j$: $J^+ |j, m\rangle$ est ket propre de \hat{J}^2 avec la valeur propre $j(j+1)\hbar^2$

est ket propre de \hat{J}_z avec la valeur propre $(m+1)\hbar$

Annexe C: valeurs propres de \hat{J}^2 et \hat{J}_z

- a) On note $m\hbar$ les valeurs propres de l'opérateur \hat{J}_z (m quelconque a priori)
- b) On peut montrer que les valeurs propres de \hat{J}^2 sont **positives** (i) et peuvent se mettre sous la forme : $j(j+1)\hbar^2$ **avec j réel positif ou nul** (ii)

Demo:

(i) Soit $|\psi\rangle$ ket propre de \hat{J}^2 associé à la valeur propre λ

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{J}^2 | \psi \rangle &= \lambda \langle \psi | \psi \rangle = \lambda \|\psi\|^2 \rightarrow \geq 0 \\
 &= \langle \psi | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{J}_x^2 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{J}_y^2 | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{J}_z^2 | \psi \rangle \\
 &= \langle \psi | \hat{J}_x^+ \hat{J}_x | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{J}_y^+ \hat{J}_y | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{J}_z^+ \hat{J}_z | \psi \rangle \\
 &= \|\hat{J}_x | \psi \rangle\|^2 + \|\hat{J}_y | \psi \rangle\|^2 + \|\hat{J}_z | \psi \rangle\|^2 \geq 0 \rightarrow \lambda \geq 0
 \end{aligned}$$

(ii) Montrons qu'à toute valeur propre $\lambda \geq 0$ on peut associer un $j \geq 0$ de manière univoque

On peut toujours écrire $\lambda = \hbar^2 \mu$ avec $\mu \geq 0$

$$\mu\hbar^2 = j(j+1)\hbar^2 \longrightarrow \mu = j(j+1)$$

$$\text{Equation du second degré en } j : j^2 + j - \mu = 0 \longrightarrow \Delta = 1 + 4\mu \geq 0$$

\longrightarrow Deux racines réelles dont une seule positive

$$\text{c) } \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

On va noter la base de kets propres communs à \hat{J}^2, \hat{J}_z $|j, m\rangle$

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

d) On peut montrer que $-j \leq m \leq j$

$$\begin{aligned} \|\hat{J}_+ |j, m\rangle\|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle \geq 0 \\ &= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \geq 0 \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 \geq 0 \\ &= j(j+1) - m^2 - m = j(j+1) - m(m+1) \geq 0 \end{aligned}$$

Polynôme d'ordre 2 en j qui s'annule pour j=m, donc on peut le factoriser par (j-m)

$$(j - m)(j + m + 1) \geq 0 \quad (i)$$

s'annule pour j=m et j= -1-m, sinon (j-m) > 0 et (j+m+1) > 0 est la seule solution (ii)

(en effet (j-m) < 0 et (j+m+1) < 0 est impossible car cela mène à j < -1/2, or j doit être ≥ 0)

$$(ii) \longrightarrow -j - 1 \leq m \leq j \quad (iii)$$

$$\begin{aligned}
\|\hat{J}_- |j, m\rangle\|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_+ \hat{J}_- |j, m\rangle \geq 0 \\
&= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \geq 0 \\
&= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 \geq 0 \\
&= j(j+1) - m^2 + m = j(j+1) - m(m-1) \geq 0
\end{aligned}$$

Polynôme d'ordre 2 en j qui s'annule pour $j=m-1$, donc on peut le factoriser par $(j-m+1)$

$$(j-m+1)(j+m) \geq 0$$

s'annule pour $j=m-1$ et $j = -m$, sinon $(j-m+1) > 0$ et $(j+m) > 0$ est la seule solution (iv)

(en effet $(j-m+1) < 0$ et $(j+m) < 0$ est impossible car cela mène à $j < -1/2$, or j doit être ≥ 0)

$$(iv) \longrightarrow -j \leq m \leq j+1 \quad (v)$$

$$(iii) \text{ et } (v) \longrightarrow -j \leq m \leq j \quad (vi)$$

e) Spectre de \hat{J}^2 et \hat{J}_z

On peut montrer que

Si \hat{J} est un moment cinétique :

Les valeurs propres de \hat{J}^2 valent $j(j+1)\hbar^2$

Les valeurs propres de \hat{J}_z valent $m\hbar$

Avec **j entier ou demi-entier positif** : $j=0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$

Et pour j donné: **m = -j, -j+1, ..., j-1, j**

Démonstration :

Si $|j, m\rangle$ ket propre de \hat{J}_z avec la valeur propre $m\hbar$

$m+j$ est réel positif ou nul (car $-j \leq m$) quelconque a priori, donc il existe un entier p positif ou nul tel que :

$$p \leq m + j < p + 1$$

$$-j \leq m - p < -j + 1 \quad (*)$$

Appliquons p fois \hat{J}_- au ket $|j, m\rangle$

$\hat{J}_-^p |j, m\rangle$ est vecteur propre de \hat{J}_z avec pour valeur propre associée $m - p$

Appliquons encore \hat{J}_-

Si $m-p = -j \longrightarrow \hat{J}_-^{p+1} |j, m\rangle = 0$ (a)

Si $m-p > -j \longrightarrow \hat{J}_-^{p+1} |j, m\rangle$ est vecteur propre de \hat{J}_z avec pour valeur propre associée $m - p - 1$ (b)

$$-j \leq m - p - 1 \quad \text{d'après (vi)}$$

$$m - p - 1 < -j \quad \text{d'après (*)}$$

\longrightarrow C'est impossible donc (b) est impossible, seul (a) est possible $\longrightarrow m-p = -j$

De même

$m-j$ est réel négatif ou nul (car $m \leq j$) quelconque a priori, donc il existe un entier q positif ou nul tel que :

$$-q - 1 < m - j \leq -q$$

$$j - 1 < m + q \leq +j \quad (**)$$

Appliquons q fois \hat{J}_+ au ket $|j, m\rangle$

$\hat{J}_+^q |j, m\rangle$ est vecteur propre de \hat{J}_z avec pour valeur propre associée $m + q$

Appliquons encore \hat{J}_+

Si $m+q = j \longrightarrow \hat{J}_+^{q+1} |j, m\rangle = 0$ (c)

Si $m+q < j \longrightarrow \hat{J}_+^{q+1} |j, m\rangle$ est vecteur propre de \hat{J}_z avec pour valeur propre associée $m + q + 1$ (d)

$$m + q + 1 \leq j \quad \text{d'après (vi)}$$

$$j < m + q + 1 \quad \text{d'après (**)}$$

\longrightarrow C'est impossible donc (d) est impossible, seul (c) est possible $\longrightarrow m+q = j$

$$\left. \begin{array}{l} m-p = -j \\ m+q = j \end{array} \right\} p+q = 2j \longrightarrow j = (p+q)/2$$

\longrightarrow j est entier ou demi-entier

- Pour j donné, quelque soit m , on peut écrire m sous la forme $m=-j+p$ avec p entier ≥ 0
- Pour j donné, quelque soit m , on peut écrire m sous la forme $m=+j-q$ avec q entier ≥ 0
- j est entier ou demi-entier
- $-j \leq m \leq j$

→ pour j donné: **$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$**

Annexe D) Quelques propriétés des harmoniques sphériques

D1

1) Etude de $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$ fonctions propres communes de \hat{L}^2 et \hat{L}_z

$$\begin{cases} \hat{L}^2 \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \Rightarrow \hbar^2 l(l+1) \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \\ \hat{L}_z \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \Rightarrow m \hbar \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \end{cases}$$

$$\begin{cases} - \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = l(l+1) \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \quad (i) \\ -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = m \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \quad (ii) \end{cases}$$

Les dérivées concernent uniquement les variables θ et φ , et ne portent pas sur r

Si une fonction d'onde $\mu_{klm}(r, \theta, \varphi)$ est solution de (i) et (ii), alors toute fonction $f(r) \mu_{klm}(r, \theta, \varphi)$ est également solution de (i) et (ii)

En fait, on pourrait démontrer que toutes les fonctions solutions de (i) et (ii) sont du type :

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = R_{klm}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Les fonctions $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont appelées harmoniques sphériques

Remarque : on normalise séparément la partie angulaire et la partie radiale de $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$

$$\iiint |\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)|^2 d^3r = 1 \quad \begin{matrix} \longrightarrow \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta = 1 \\ \searrow \int_0^{+\infty} |R_{klm}(r)|^2 r^2 dr = 1 \end{matrix}$$

$$d^3r = \sin\theta r^2 dr d\theta d\varphi$$

3) Valeurs de l et de m

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = m \psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$$

$$\longrightarrow -i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m(\theta, \varphi) = m Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$\longrightarrow Y_l^m(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) e^{im\varphi}$$

Or $\varphi \in [0, 2\pi[\quad \longrightarrow Y_l^m(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_l^m(\theta, \varphi)$

$$e^{im2\pi} = 1 \quad \begin{array}{l} \longrightarrow \text{ m est entier} \\ \longrightarrow \text{ l est entier} \end{array}$$

donc l est **entier** et $-l \leq m \leq +l$

2) Propriétés des harmoniques sphériques

Il est possible, à partir du système d'équations (i) et (ii) de calculer

$$Y_l^l(\theta, \varphi) \text{ puis de calculer tous les } Y_l^m(\theta, \varphi) \text{ en appliquant } \hat{L}_-$$

Les propriétés essentielles des harmoniques sphériques sont énoncées par la suite. Pour des démonstrations complètes, se référer par exemple À « Mécanique quantique Tome I » (C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe édition Hermann) p 670-672 et p 684-696

Relation de récurrence

$$\hat{L}_\pm Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi)$$

Orthonormalisation

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} (Y_l^m(\theta, \varphi))^* Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Relation de type fermeture

$$\sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{m=+l} Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi')$$

Parité

$$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$$

$$\begin{cases} r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi - \theta \\ \varphi \rightarrow \varphi + \pi \end{cases}$$

$$Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Conjugaison complexe

$$Y_l^m(\theta, \varphi)^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$$

Les premières harmoniques sphériques

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$