

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique

Université Akli Mohand Oulhadj - Bouira -

X•⊙V•εX •κ||ε □:κ:|∧ :||κ•X - X:⊙ε⊙:ε -



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة أكلي محمد أولحاج
- البويرة -

Faculté des Sciences et des Sciences Appliquées

كلية العلوم والعلوم التطبيقية

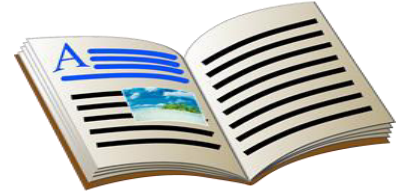
Département de Physique

Polycopié de cours

En : Physique

Spécialité : Physique fondamentale

Niveau : 3^{ème} année Licence



Cours de Mécanique Quantique II

Par : Bouchemla Nedjma et Benaïche Salim

Année : 2021 /2022

Préambule

Le présent cours est destiné aux étudiants de 3^{ème} année licence : spécialité physique fondamentale. Il comporte cinq chapitres relatifs à la mécanique quantique II et un autre comportant des exercices d'application.

Le premier chapitre est consacré à des rappels d'outils mathématiques de base de la mécanique quantique où nous évoquons en premier lieu les notions d'espace de Hilbert, les vecteurs Ket et Bra ainsi que les différentes propriétés et opérations qui découlent de cette nouvelle notation vu pour la première fois par l'étudiant. En second lieu, nous insistons sur les notions de valeurs et de vecteurs propres d'une observable physique tout comme le concept mathématique de l'énergie et de la fonction d'onde.

Dans le deuxième chapitre, nous introduisons le moment cinétique d'une particule où nous développons ses différentes propriétés, ses valeurs et vecteurs propres et sa représentation matricielle. En conséquence, nous construirons explicitement une base de vecteurs propres dite base standard et nous étudierons le moment cinétique orbitale qui sera vu en détails sous forme d'exercices d'applications dans le chapitre 5. Aussi, cette partie sera finalisée par l'introduction de la notion d'addition de deux moments cinétiques.

Le mouvement d'une particule dans un potentiel central représente une très bonne application du moment cinétique orbital. A cet effet, nous consacrons le troisième chapitre de ce polycopié à l'étude de ce type de potentiel dit coulombien ou en générale potentiel central. Pour ce faire, nous commençons par exprimer le moment cinétique orbital en coordonnées sphérique et à écrire l'équation de Schrödinger correspondante. Ensuite, nous spécifions le cas de l'atome d'hydrogène où nous allons extraire la partie radiale de la fonction d'onde correspondante au mouvement de l'électron dans un potentiel central.

Dans le quatrième chapitre, nous traitons les systèmes physiques qui subissent de petites perturbations par des méthodes spécifiques dites les méthodes d'approximations, et qui sont représenté a ce niveaux d'enseignement par la méthode des perturbations stationnaires et la méthode des variations.

Le cinquième chapitre consiste à traiter le phénomène de diffusion dans le cas d'un potentiel central. Nous introduisons les notions physiques telles que la section efficace et le déphasage. Nous utilisons la méthode des ondes partielles pour le calcul de la section efficace.

Pour terminer, nous introduisons le chapitre six qui comporte un nombre important de problèmes et d'exercices d'applications afin de se familiariser avec les différentes notions énumérées précédemment dans les divers chapitres.

Par ailleurs, il est à noter que le contenu du cours de la matière mécanique quantique II est très étendu. Pour cette raison, il faut impérativement choisir une méthodologie d'enseignement afin de respecter les limites imposées par le nombre d'heures signalé dans le canevas de formation et aussi une méthodologie de rédaction pour faire apparaître toutes les notions de base du cours mais ranger dans un nombre de pages raisonnables.

Table des matières

1	Les outils mathématiques de la Mécanique quantique (Rappel)	1
1.1	Espace de Hilbert	1
1.2	Notation de Dirac	1
1.3	Quelques propriétés	2
1.4	Définir une base dans l'espace des états :	4
1.5	Opérateur de projection	4
1.6	Base discrète et base continue	5
1.7	Représentation matricielle des états	6
1.7.1	Représentation matricielle d'un Ket	6
1.7.2	Représentation matricielle d'un Bra	6
1.7.3	Représentation matricielle d'un opérateur	6
1.8	Valeurs propres et états propres associées à un opérateur	7
1.8.1	Valeurs propres	7
1.8.2	Vecteurs propres	7
1.9	Propriétés fondamentales	7
2	Moment cinétique	9
2.1	Définition	9
2.2	Les valeurs propres et les vecteurs propres de J^2 et J_z	11
2.2.1	Les valeurs possibles de m (valeur propre J_z)	12
2.2.2	Les valeurs propres de J :	15
2.2.3	Valeurs propres de J_+ et J_- :	16
2.3	Représentation standard	18
2.3.1	Définition	18
2.3.2	Exemple : Base standard de l'espace des fonctions d'ondes d'une particule sans spin	18
2.4	Matrice associée au moment cinétique	20
2.4.1	Les éléments de matrice associés à J_z .	20
2.4.2	Les éléments des matrices associés aux opérateurs J_x et J_y	21
2.5	Addition de moments cinétiques.	22
2.6	Valeur propre de J_z	23

2.7	Valeurs propres de J^2	24
3	Particule dans un Potentiel Central et application a l'atome	
	d'hydrogène	25
3.1	Introduction	25
3.1.1	Moment cinétique.....	28
3.1.2	Les harmoniques sphériques	29
3.2	Mouvement dans un potentiel coulombien	31
3.3	Application à l'atome d'hydrogène	34
3.3.1	Solution de l'équation radiale	34
4	Les méthodes d'approximations	40
4.1	Méthodes des Perturbations stationnaires :	40
4.1.1	Introduction	40
4.1.2	Principe de la méthode des perturbations stationnaires	41
4.1.3	Perturbation d'un niveau non dégénéré	42
4.1.4	Perturbation d'un niveau d'énergie dégénéré.	43
4.2	Méthode des variations :	43
4.2.1	Introduction	43
4.2.2	Méthode des variations pour le niveau fondamental	45
5	Diffusion d'une particule sans spin par un potentiel central	48
5.1	Introduction	48
5.2	Principe de calcul de la section efficace	49
5.3	Méthode des ondes partielles	51
5.4	Expression de $\varphi(r)$, $f(\theta)$ et $\sigma(\theta)$ en fonction du déphasage δ_l :	53
5.5	Théorème optique :	55
5.6	Application (potentiel de portée finie)	55
6	Exercices d'applications	59
6.1	Exercices du chapitre 1	59
6.2	Exercices du chapitre 2	63
6.3	Exercices du chapitre 3	66
6.4	Exercices du chapitre 4	67
6.4.1	Partie 1 : les perturbations stationnaires	67
6.4.2	Partie 2 : La Méthode des variations	70
6.5	Exercices du chapitre 5.	71

Chapitre 1

Les outils mathématiques de la Mécanique quantique (Rappel)

1.1 Espace de Hilbert

Tout état quantique d'une particule est caractérisé par un vecteur d'état appartenant à l'espace des états ξ , un espace vectoriel appelé espace de Hilbert. Le vecteur d'état est un vecteur qui contient toute l'information sur le système physique étudié.

1.2 Notation de Dirac

Un vecteur quelconque de l'espace des états ξ , est appelé vecteur-ket ou plus simplement ket, on le note par le symbole $|\ \rangle$, en mettant à l'intérieur un signe distinctif permettant de le différencier des autres états. Par exemple, si le ket est associé à un état décrit par une fonction $\psi(r)$ on pourra le noter $|\psi\rangle$.

Les fonctions que l'on manipulait en mécanique ondulatoire étaient complexes. On admettra qu'il existe un espace dual ξ^* , de l'espace des états, dont les vecteurs d'états peuvent être associés aux fonctions complexes conjuguées des fonctions associées aux vecteurs d'état de ξ .

A tout vecteur-ket $|\psi\rangle$ de l'espace ξ , correspond un vecteur dans l'espace dual ξ^* que l'on nomme vecteur-bra¹ $\langle\psi|$.

1.3 Quelques propriétés :

1- Si λ est un complexe et $|\psi\rangle$ un ket de ξ , alors $\lambda|\psi\rangle$ est également un ket de ξ que l'on peut noter $|\lambda\psi\rangle$.

2- Le bra associé à $\lambda|\psi\rangle$ est $(\lambda^*\langle\psi|)$ où λ^* est le complexe conjugué de λ et on peut le noter $\langle\lambda\psi|$, on a donc $\langle\lambda\psi| = \lambda^*\langle\psi|$.

3- Le produit scalaire de deux kets $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ est noté $\langle\psi|\varphi\rangle$ et nous avons les propriétés suivantes

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \quad (\text{a})$$

$$\langle\psi|\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2\rangle = \lambda_1\langle\psi|\varphi_1\rangle + \lambda_2\langle\psi|\varphi_2\rangle \quad (\text{linéarité}) \quad (\text{b})$$

$$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle \quad (\text{anti-linéarité}) \quad (\text{c})$$

4- Normalisation et orthogonalité²

	Mécanique ondulatoire de Schrodinger	Formalisme quantique de Dirac
<i>normalisation</i>	$\int_{\text{tout l'espace}} \psi^* \psi \, dv = 1$	$\langle\psi \psi\rangle = 1$
<i>Orthonormalité</i>	$\int_{\text{tout l'espace}} \psi_i^* \psi_j \, dv = \delta_{ij}$	$\langle\psi_i \psi_j\rangle = \delta_{ij}$

5- Notion d'opérateurs

5-1- Le produit d'un ket par un bra est un opérateur

$$A = |\psi\rangle\langle\varphi|, \quad A \text{ est dit opérateur} \quad (1.1)$$

¹En anglais, bracket signifie "crochet"

² δ_{ij} est le symbole de Kronecker ; $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$

alors

$$A|\chi\rangle = |\psi\rangle \underbrace{\langle\varphi|\chi\rangle}_{=\lambda} = \lambda|\psi\rangle \quad (1.2)$$

5-2- Lorsque l'on fait agir l'opérateur A sur un ket $|\psi\rangle$, on obtient un nouveau ket :

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad (1.3)$$

5-3- De même :

$$A|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1A|\psi_1\rangle + \lambda_2A|\psi_2\rangle, \quad \lambda_i : \text{complexes} \quad (1.4)$$

5-4- On appelle "élément de matrice" de A entre φ et ψ , le produit scalaire

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle, \quad (1.5)$$

5-5- A partir de l'opérateur A , on définit l'opérateur adjoint de A et qu'on note A^+ qui vérifie

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad \text{alors} \quad \langle\psi'| = \langle\psi|A^+ \quad (1.6)$$

et comme

$$\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* \quad (1.7)$$

alors

$$\underbrace{\langle\psi'|\varphi\rangle} = \langle\psi|A^+|\varphi\rangle \quad (1.8)$$

$$\text{et } \langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle^* \quad (1.9)$$

d'où

$$\langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^* \quad (1.10)$$

5-7- Lorsqu'un opérateur coïncide avec son adjoint $A = A^+$, on dit que l'opérateur A

est "Hermitique" et l'on a

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^* \quad (1.11)$$

1.4 Définir une base dans l'espace des états :

Comme dans tout espace vectoriel, il existe une infinité de bases orthonormées que l'on peut définir dans ξ . Si cet espace est de dimension n , alors on aura n vecteurs de base $|u_i\rangle$, $i = 1 \dots n$ vérifiant la relation d'orthonormalité :

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (1.12)$$

et tout ket $|\psi\rangle$ de ξ pourra s'écrire

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |u_1\rangle + \lambda_2 |u_2\rangle + \lambda_3 |u_3\rangle + \dots + \lambda_n |u_n\rangle \quad (1.13)$$

$$= \sum_{i=1}^N \lambda_i |u_i\rangle. \quad (1.14)$$

les λ_i sont les composantes de $|\psi\rangle$ sur les vecteurs de base $|u_i\rangle$.

1.5 Opérateur de projection :

Pour calculer les composantes λ_n , on utilise l'opérateur P_i dit opérateur de projection

$$P_i = |u_i\rangle \langle u_i|, \quad (1.15)$$

qui permet de calculer la composante λ_i

$$P_i |\psi\rangle = \lambda_1 |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i | u_1 \rangle}_{=0} + \lambda_2 |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i | u_2 \rangle}_{=0} + \dots + \lambda_i |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i | u_i \rangle}_{=1} + \dots + \lambda_N |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i | u_N \rangle}_{=0}, \quad (1.16)$$

d'où

$$P_i |\psi\rangle = \lambda_i |u_i\rangle, \quad (1.17)$$

donc si l'on additionne tous les opérateurs projections, on doit retrouver toutes les composantes du vecteur $|\psi\rangle$

$$\sum_{i=1}^N P_i |\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i |u_i\rangle = |\psi\rangle, \quad (1.18)$$

on a donc

$$\sum_{i=1}^N P_i = 1 \leftarrow \text{opérateur identité} \quad (1.19)$$

qui représente la relation de fermeture et qui signifie que la base est complète et suffisante pour bien décrire l'état $|\psi\rangle$.

1.6 Base discrète et base continue

Lorsque les états sont quantifiés, on a une "base discrète" des états, et on doit utiliser le signe somme $\left(\sum\right)$, comme dans les relations précédentes, donc on écrit

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (d)$$

$$\sum_{i=1}^N P_i = 1 \quad (e)$$

lorsque les états ne sont pas quantifiés, on a une "base continue" et on doit passer au signe intégrale $\left(\int\right)$

$$\langle w_a | w_b \rangle = \delta(a - b), \quad \delta \text{ et le delta de Dirac} \quad (f)$$

$$\int |w_a\rangle \langle w_b| = 1. \quad (g)$$

1.7 Représentation matricielle des états

1.7.1 Représentation matricielle d'un Ket

Dans la base des $|u_i\rangle$, le ket $|\psi\rangle$ est représenté par ses composantes λ_i de l'équation (1.13)

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |u_1\rangle + \lambda_2 |u_2\rangle + \lambda_3 |u_3\rangle + \dots + \lambda_n |u_n\rangle$$

le ket est présenté par le vecteur (matrice) colonne des coefficients

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \lambda_n \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

1.7.2 Représentation matricielle d'un bra :

Dans l'espace dual, le bra associé au ket précédent, dans la base des $\langle u_i|$ s'écrit

$$\langle\psi| = \lambda_1^* \langle u_1| + \lambda_2^* \langle u_2| + \dots + \lambda_n^* \langle u_n| \quad (1.21)$$

le bra est présenté par le vecteur (matrice) ligne des coefficients

$$\langle\psi| = \left(\lambda_1^* \quad \lambda_2^* \quad \cdot \quad \cdot \quad \lambda_n^* \right) \quad (1.22)$$

1.7.3 Représentation matricielle d'un opérateur :

Dans la base des vecteurs $|u_i\rangle$, un opérateur A est représenté par une matrice dont les éléments sont définis par(1.5)

$$A_{ij} = \langle u_i| A |u_j\rangle \quad (1.23)$$

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & A_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & A_{nn} \end{pmatrix} \text{ c'est une matrice carrée} \quad (1.24)$$

1.8 Valeurs propres et états propres associées à un opérateur :

1.8.1 Valeurs propres :

La résolution de l'équation

$$A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad (1.25)$$

dite équation aux valeurs propres, est bien connue en algèbre linéaire. La diagonalisation de A permet de déterminer les valeurs de λ qui sont les solutions de

$$\det(A - \lambda 1) = 0 \quad (1.26)$$

où 1 est l'opérateur identité.

1.8.2 vecteurs propres :

On trouve les vecteurs propres en résolvant le système d'équations (1.25) pour chaque valeurs de λ .

1.9 Propriétés fondamentales :

- Les vecteurs propres d'un opérateurs sont orthogonaux.

- la matrice de l'opérateur (dans le cas où elle représenté dans la base de ses vecteurs propres) est diagonale. les éléments diagonaux sont les valeurs propres.
- les valeurs propres d'une observable sont réelles.
- le nombre d'états propres est égal à la dimension de la matrice.
- la même valeur propre peut être associée à plusieurs états propres. on dit qu'elle est dégénérée.

Chapitre 2

Moment cinétique

2.1 Définition

En physique, le moment cinétique orbital \vec{L} d'une particule est défini par :

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{P} \quad (2.1)$$

où $\vec{r}(x, y, r)$ est le vecteur position et $\vec{P}(P_x, P_y, P_z)$ est le vecteur quantité de mouvement.

Soit L_x, L_y, L_z les composantes cartésiennes de \vec{L}

$$L_x = (yP_z - zP_y) \quad (2.2)$$

$$L_y = (zP_x - xP_z) \quad (2.3)$$

$$L_z = (xP_y - yP_x) \quad (2.4)$$

On mécanique quantique, on associe à ces composants cartésiennes les opérateurs

IL_x, IL_y, IL_z qui vérifient les règles de commutation suivantes

$$[IL_x, IL_y] = i\hbar IL_z \quad (2.5)$$

$$[IL_y, IL_z] = i\hbar IL_x \quad (2.6)$$

$$[IL_z, IL_x] = i\hbar IL_y \quad (2.7)$$

avec

$$[x, P_x] = i\hbar \quad (2.8)$$

$$[y, P_y] = i\hbar \quad (2.9)$$

$$[z, P_z] = i\hbar \quad (2.10)$$

$$[x, P_y] = [x, P_z] = 0 \quad (2.11)$$

$$[y, P_x] = [y, P_z] = 0 \quad (2.12)$$

$$[z, P_x] = [z, P_y] = 0 \quad (2.13)$$

Ces relations de commutations représentent la relation de passage de la mécanique classique vers la mécanique quantique.

On peut montrer facilement que :

$$[IL^2, IL_z] = [IL^2, IL_y] = [IL^2, IL_x] = 0 \quad (2.14)$$

avec $IL^2 = IL_x^2 + IL_y^2 + IL_z^2$

En général l'opérateur vectoriel \vec{J} est un moment cinétique si les composantes $\vec{J}_x, \vec{J}_y, \vec{J}_z$ vérifient les relations de commutations :

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad (2.15)$$

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad (2.16)$$

$$[J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad (2.17)$$

et

$$[J^2, J_z] = 0 \quad (2.18)$$

cela signifie qu'on peut mesurer simultanément J^2 et J_z .

2.2 Les valeurs propres et vecteurs propres de J^2 et

J_z

J^2 et J_z commutent c'ad $[J^2, J_z] = 0$, mais l'ensemble $\{J^2, J_z\}$ ne constitue pas un ensemble complet d'opérateurs qui commutent (ECOC).

Soit A un opérateur qu'il faut adjoindre à J^2 et J_z pour obtenir un tel ECOC, donc J^2 et J_z et A possèdent en commun un ensemble de vecteurs propres orthonormés qui forme une base unique d'un espace vectoriel.

On associe aux opérateurs A , J^2 et J_z les valeurs propres α , j et m respectivement tel que pour tout ensemble $\{A, J^2, J_z\}$ correspond une base complète orthonormée des vecteurs $|\alpha, j, m\rangle$ avec

$$\langle \alpha', j', m' | \alpha, j, m \rangle = \delta_{\alpha'\alpha} \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (2.19)$$

où δ est le symbole de "Kronecker"

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (2.20)$$

et les valeurs propres de J^2 et J_z dans la base $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ sont tel que

$$J^2 |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\alpha, j, m\rangle \quad (2.21)$$

$$J_z |\alpha, j, m\rangle = \hbar m |\alpha, j, m\rangle \quad (2.22)$$

2.2.1 Les valeurs possibles de m (valeur propre J_z)

On définit les opérateurs d'échelle J_+ et J_-

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad (2.23)$$

$$J_- = J_x - iJ_y \quad (2.24)$$

où les opérateurs J_+ et J_- sont adjoint l'un de l'autre c'est-à-dire que

$$(J_+)^+ = (J_x + iJ_y)^+ = J_x - iJ_y = J_- \quad (2.25)$$

$$(J_-)^+ = (J_x - iJ_y)^+ = J_x + iJ_y = J_+ \quad (2.26)$$

où J_+ et J_- vérifient les relations suivantes

$$J_- J_+ = J^2 - J_z (J_z + 1) \quad (2.27)$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z (J_z - 1). \quad (2.28)$$

Appliquant ces opérateurs $J_- J_+$ et $J_+ J_-$ aux vecteurs propres $|\alpha, j, m\rangle$

$$J_- J_+ |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] |\alpha, j, m\rangle \quad (2.29)$$

$$J_+ J_- |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m-1)] |\alpha, j, m\rangle \quad (2.30)$$

comme on peut les écrire sous la forme

$$J_- J_+ |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 (j+m)(j+m+1) |\alpha, j, m\rangle \quad (2.31)$$

$$J_+ J_- |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 (j+m)(j-m+1) |\alpha, j, m\rangle \quad (2.32)$$

La norme de $J_+ |\alpha, j, m\rangle$ et $J_- |\alpha, j, m\rangle$

$$|J_+ |\alpha, j, m\rangle|^2 = (\langle \alpha, j, m | J_-) (J_+ |\alpha, j, m\rangle) = \hbar^2 (j+m)(j+m+1) \geq 0 \quad (2.33)$$

de même

$$|J_- |\alpha, j, m\rangle|^2 = (\langle \alpha, j, m | J_+) (J_- |\alpha, j, m\rangle) = (j+m)(j-m+1) \geq 0 \quad (2.34)$$

Donc les valeurs possibles de m sont $(2j+1)$ valeurs qui vérifient (2.32) et (2.33) d'où

$$-j \leq m \leq +j \quad (2.35)$$

Exemple

pour $j = 1$

$$j = 1 \Rightarrow -1 \leq m \leq 1 \rightarrow |\alpha, j, m\rangle = \begin{cases} |\alpha, 1, 1\rangle \\ |\alpha, 1, 0\rangle \\ |\alpha, 1, -1\rangle \end{cases}$$

Pour $j = +\frac{1}{2}$

$$j = \frac{1}{2} \Rightarrow -\frac{1}{2} \leq m \leq \frac{1}{2} \rightarrow |\alpha, j, m\rangle = \begin{cases} |\alpha, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |\alpha, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{cases}$$

la relation $-j \leq m \leq +j$ fournit la valeur maximale et minimale de m

$$m_{\max} = +j \quad (2.36)$$

$$m_{\min} = -j. \quad (2.37)$$

où nous avons immédiatement

$$J_+ |\alpha, j, m_{\max}\rangle = 0 \quad (2.38)$$

$$J_- |\alpha, j, m_{\min}\rangle = 0 \quad (2.39)$$

Appliquant maintenant les opérateurs $J_z J_+$ et $J_z J_-$ sur les états $|\alpha, j, m\rangle$, on peut montrer que

$$J_z J_+ |\alpha, j, m\rangle = J_+ (J_z + 1) |\alpha, j, m\rangle \quad (2.40)$$

$$J_z J_- |\alpha, j, m\rangle = J_- (J_z - 1) |\alpha, j, m\rangle \quad (2.41)$$

d'où

$$J_z J_+ |\alpha, j, m\rangle = J_+ [\hbar(m+1)] |\alpha, j, m\rangle = \hbar(m+1) J_+ |\alpha, j, m\rangle \quad (2.42)$$

$$J_z J_- |\alpha, j, m\rangle = J_- [\hbar(m-1)] |\alpha, j, m\rangle = \hbar(m-1) J_- |\alpha, j, m\rangle \quad (2.43)$$

ces résultats montrent que $J_{\pm} |\alpha, j, m\rangle$ est vecteur propre de J_z par la valeur propre $(m \pm 1)$

c'est-à-dire que

$$J_+ |\alpha, j, m\rangle \propto |\alpha, j, m + 1\rangle \quad (2.44)$$

$$J_- |\alpha, j, m\rangle \propto |\alpha, j, m - 1\rangle \quad (2.45)$$

2.2.2 Les valeurs propres de \mathbf{J} :

Soit le vecteur $|\alpha, j, m\rangle$ et on considère le cas où $m = m_{\min}$ c'est-à-dire $m_{\min} = -j \Rightarrow |\alpha, j, m\rangle = |\alpha, j, -j\rangle$, appliquant J_+ sur l'état $|\alpha, j, -j\rangle$ p fois

$$\begin{aligned} J_+ |\alpha, j, -j\rangle &\propto |\alpha, j, -j + 1\rangle \\ (J_+)^2 |\alpha, j, -j\rangle &\propto |\alpha, j, -j + 2\rangle \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ (J_+)^p |\alpha, j, -j\rangle &\propto |\alpha, j, -j + p\rangle \end{aligned}$$

où p est un entier positif.

On considère maintenant le cas où $m = m_{\max} = +j$, appliquant J_- sur l'état $|\alpha, j, m_{\max}\rangle$ q fois

$$\begin{aligned} J_- |\alpha, j, +j\rangle &\propto |\alpha, j, j - 1\rangle \\ (J_-)^2 |\alpha, j, +j\rangle &\propto |\alpha, j, j - 2\rangle \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ (J_-)^q |\alpha, j, +j\rangle &\propto |\alpha, j, j - q\rangle \end{aligned}$$

où q est aussi un entier positif. Nous voulons par la suite déterminer dans quelles conditions, le vecteur $|\alpha, j, -j + p\rangle$ est égal au vecteur $|\alpha, j, j - q\rangle$, ceci se traduit par $-j + p = j - q \Rightarrow j = \frac{p+q}{2}$, p et q étant des entiers positifs, alors j est un entier ou demi-entier positif.

En résumé nous avons les règles suivantes pour le moment cinétique J :

- Les valeurs propre de J^2 sont de la forme $\hbar^2 j(j+1)$
- Les valeurs propre de J_z sont de la forme $(\hbar m)$ ou $-j \leq m \leq j$
- Si $\hbar^2 j(j+1)$ et $\hbar m$ sont les valeurs propres correspondants a un état propre commun a J^2 et J_z , alors les seules valeurs possibles de m sont les $2j+1$ valeurs $m = -j, -j+1, \dots, -j-1, \dots, +j$.

2.2.3 Valeurs propres de J_+ et J_- :

en partant des équations (2.44) et (2.45) nous avons

$$J_+ |\alpha, j, m\rangle \propto |\alpha, j, m+1\rangle$$

$$J_- |\alpha, j, m\rangle \propto |\alpha, j, m-1\rangle$$

autrement dit

$$J_+ |\alpha, j, m\rangle = A |\alpha, j, m+1\rangle \quad (2.46)$$

$$J_- |\alpha, j, m\rangle = B |\alpha, j, m-1\rangle \quad (2.47)$$

où A et B sont les valeurs propres de J_+ et J_- successivement. Maintenant, calculons les l'éléments de la matrice $(J_- J_+)$

$$\langle \alpha, j, m | J_- J_+ | \alpha, j, m \rangle = ?$$

on utilisant (2.27) et (2.29) d'une part $J_+ J_- = J^2 - J_z (J_z + 1)$ et $J_- J_+ | \alpha, j, m \rangle = \hbar^2 (j+m)(j+m+1) | \alpha, j, m \rangle$, et d'autre part, si nous injectons la relation de fermeture

$I = \sum_{m'} |\alpha, j', m'\rangle \langle \alpha, j', m'|$ nous obtenons

$$\begin{aligned}
\langle \alpha, j, m | J_- (I) J_+ | \alpha, j, m \rangle &= \sum_{m'} \langle \alpha, j, m | \underbrace{J_-}_{\alpha, j', m'} | \alpha, j', m' \rangle \langle \alpha, j', m' | \underbrace{J_+}_{\alpha, j, m} | \alpha, j, m \rangle \\
&= \sum_{m'} A.B \langle \alpha, j, m | \alpha, j', m' - 1 \rangle \langle \alpha, j', m' | \alpha, j, m + 1 \rangle \\
&= \sum_m A.B \delta_{jj'} \delta_{m' - 1} \delta_{m' m + 1} \\
&= \langle \alpha, j, m | J_- | \alpha, j, m' - 1 \rangle \langle \alpha, j, m' | J_+ | \alpha, j, m \rangle \quad (2.48)
\end{aligned}$$

comme J_+ et J_- sont adjoint l'un de l'autre

$$\langle \alpha, j, m | J_- | \alpha, j, m \rangle = \langle \alpha, j, m | J_+ | \alpha, j, m \rangle^* \quad (2.49)$$

d'où

$$\langle \alpha, j, m | J_- J_+ | \alpha, j, m \rangle = \|J_+ | \alpha, j, m \rangle\|^2 = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \quad (2.50)$$

et

$$J_{\pm} | \alpha, j, m \rangle = \hbar [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle \quad (2.51)$$

d'où

$$A = \hbar [j(j+1) - m(m+1)]^{\frac{1}{2}} \quad (2.52)$$

$$B = \hbar [j(j+1) - m(m-1)]^{\frac{1}{2}} \quad (2.53)$$

2.3 Représentation standard

2.3.1 Définition

On appelle base standard de ξ , toute base orthonormée formée par les vecteurs $|\alpha, j, m\rangle$, vecteurs propres communs à J^2 et J_z tel que

$$\begin{cases} J^2 |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\alpha, j, m\rangle, \\ J_z |\alpha, j, m\rangle = \hbar m |\alpha, j, m\rangle \\ J_{\pm} |\alpha, j, m\rangle = \hbar [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} |\alpha, j, m \pm 1\rangle \end{cases} \quad (2.54)$$

2.3.2 Exemple : Base standard de l'espace des fonctions d'ondes d'une particule sans spin

Soit une particule sans spin de moment cinétique orbital IL , l'ensemble $\{IL^2, IL_z\} \neq \text{ECOC} \rightarrow \{H, IL^2, IL_z\} = \text{ECOC}$ et soit $\Psi_{n,l,m}$ les fonctions d'ondes communes à H, IL^2 et IL_z , on sait que

$$IL^2 \Psi_{n,l,m} = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{n,l,m} \quad (2.55)$$

$$IL_z \Psi_{n,l,m} = \hbar m \Psi_{n,l,m} \quad (2.56)$$

- Quelle est la condition pour que les fonctions $\Psi_{n,l,m}$ forment une base standard ?

Si les $\Psi_{n,l,m}$ forment une base standard alors elles vérifient les relations (2.54)

$$\begin{cases} IL^2 \Psi_{n,l,m} = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{n,l,m} \\ IL_z \Psi_{n,l,m} = \hbar m \Psi_{n,l,m} \\ IL_{\pm} \Psi_{n,l,m} = \hbar [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} \Psi_{n,l,m \pm 1} \end{cases} \quad (2.57)$$

d'une autre part, les fonctions $\Psi_{n,l,m}$ s'écrivent en coordonnées sphériques (r, θ, φ) tel que

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l,m}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2.58)$$

avec $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques, avec

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle l, m | \theta, \varphi \rangle, \quad (2.59)$$

où $|l, m\rangle$ c'est la représentation discrete des états propres du moment orbital \vec{L} et $Y_l^m(\theta, \varphi)$ c'est la représentation de c'est états dans l'espace des configuration $|\vec{r}\rangle \equiv |x, y, z\rangle \equiv |r, \theta, \varphi\rangle$ (comme il y a un autre espace dit espace des phases $|\vec{p}\rangle \equiv |P_x, P_y, P_z\rangle \equiv |P_r, P_\theta, P_\varphi\rangle$)

On a :

$$IL_\pm \Psi_{n,l,m} \stackrel{\text{base standard}}{=} \hbar [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} \Psi_{n,l,m \pm 1}, \quad (2.60)$$

d'autre pard

$$IL_\pm \Psi_{n,l,m} = IL_\pm (R_{n,l,m}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)) \quad (2.61)$$

$$= R_{n,l,m}(r) IL_\pm Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2.62)$$

puisque IL_\pm s'écrit en cordonnées sphériques comme

$$IL_\pm = e^{i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \text{ ne dépende pas de } r \quad (2.63)$$

alors

$$IL_\pm \Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{n,l,m}(r) \hbar [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (2.64)$$

comme nous avons égalité entre les équations (2.60) et (2.64) $\Rightarrow R_{n,l}(r) = R_{n,l,m \pm 1}$. Pour que les fonction d'ondes $\Psi_{n,l,m}(\vec{r})$ forment une base standard, il faudrait que les $R_{n,l,m}(r) = R_{n,l}(r)$ c'est-à-dire que la partie radiale de la fonction d'onde ne dépendent pas du nombre quantique magnétique m .

2.4 Matrice associe au moment cinétique

Soit l'ensemble $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ Constitué une base de $\xi(\alpha, j)$ tel que $\dim \xi(\alpha, j) = 2j + 1$, alor, on peut associé à j_x, j_y et j_z à une matrice dans $\xi(\alpha, j)$.

Nous voulons calculer les éléments de matrice entre les vecteurs appartenant au même sous-espace $\xi(\alpha, j)$

2.4.1 Les élément de matrice associe à J_z

On sait que $J_z |\alpha, j, m\rangle = \hbar m |\alpha, j, m\rangle$, alors il en résulte que

$$\begin{aligned} \langle \alpha, j, m' | J_z | \alpha, j, m \rangle &= \langle \alpha, j, m' | \hbar m | \alpha, j, m \rangle \\ \langle \alpha, j, m' | J_z | \alpha, j, m \rangle &= \hbar m \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (2.65)$$

Exemple

$$j = s = \frac{1}{2} \rightarrow m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \Rightarrow \{|\alpha, s, m_s\rangle\} \equiv \{|\alpha, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\alpha, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$$

$$[s_z] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

En général la représentation matricielle de l'opérateur J_z notée $[J_z]$

$$[J_z] = \hbar \begin{pmatrix} j & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & j-1 & \dots & 0 & 0 \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -j+1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -j \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

2.4.2 Les éléments des matrices associées aux opérateurs J_x et

J_y

Comme J_x et J_z s'écrivent en fonction de J_+ et J_- , alors on doit commencer par le calcul des éléments des matrices associées aux opérateurs d'échelle J_+ et J_-

$$\langle \alpha, j, m' | J_+ | \alpha, j, m \rangle = \hbar [j(j+1) - m(m+1)]^{\frac{1}{2}} \langle \alpha, j, m' | \alpha, j, m+1 \rangle \quad (2.68)$$

$$\langle \alpha, j, m' | J_- | \alpha, j, m \rangle = \hbar [j(j+1) - m(m-1)]^{\frac{1}{2}} \langle \alpha, j, m' | \alpha, j, m-1 \rangle \quad (2.69)$$

donc les éléments de la matrices associées aux opérateurs d'échelle J_+ et J_- , en utilisant (2.53) nous obtenons immédiatement

$$\langle \alpha, j, m' | J_+ | \alpha, j, m \rangle = \hbar [j(j+1) - m(m+1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{m', m+1} \quad (2.70)$$

$$\langle \alpha, j, m' | J_- | \alpha, j, m \rangle = \hbar [j(j+1) - m(m-1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{m', m-1} \quad (2.71)$$

et comme $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$ et $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$

nous obtenons facilement les éléments de matrice de J_x et J_y

$$\langle \alpha, j, m' | J_x | \alpha, j, m \rangle = \frac{\hbar}{2} \left[[j(j+1) - m(m+1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{m', m+1} + [j(j+1) - m(m-1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{m', m-1} \right] \quad (2.72)$$

$$\langle \alpha, j, m' | J_y | \alpha, j, m \rangle = \frac{\hbar}{2i} \left[[j(j+1) - m(m+1)]^{\frac{1}{2}} \delta_{m', m+1} + [j(j+1) - m(m-1)] \delta_{m', m-1} \right] \quad (2.73)$$

Exemple : pour $j = s = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} [S_+] &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, [S_-] = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ [S_x] &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, [S_y] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ et } [S_z] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.74)$$

où on retrouve les matrices de Pauli :

$$[s_i] = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \text{ avec } i = x, y, z \quad (2.75)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

2.5 Addition de moments cinétique

Soit deux systèmes physique (1) et (2) ayant chacun un moment cinétique \vec{j}_1, \vec{j}_2 respectivement, on note ξ_i , le deux espaces vectoriels engendrés par les vecteurs des deux bases $\{|\alpha, j_i, m_i\rangle\}$ avec $i = 1, 2$

Les vecteurs des deux bases doivent satisfaires les relations

$$J_i^2 |\alpha_i, j_i, m_i\rangle = \hbar^2 j_i (j_i + 1) |\alpha_i, j_i, m_i\rangle \quad (2.77)$$

$$J_{iz} |\alpha_i, j_i, m_i\rangle = \hbar m_i |\alpha_i, j_i, m_i\rangle \quad (2.78)$$

$$J_{\pm i} |\alpha_i, j_i, m_i\rangle = \hbar \sqrt{[j_i (j_i + 1) - m_i (m_i \pm 1)]} |\alpha_i, j_i, m_i \pm 1\rangle \quad (2.79)$$

On considère le système global formé par l'union des deux systèmes (1) et (2) et qui est caractérisé par le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$. On définit la base standard formée par les vecteurs $\{|\alpha, J, M\rangle\}$.

Le problème : comment déterminer les valeurs de J et de M en fonction de j_1, j_2 et m_1, m_2 ? pour répondre à cette question, on définit le produit tensoriel ξ de deux sous espace ξ_1 et ξ_2 :

$$\xi = \xi_1 \otimes \xi_2 \quad (2.80)$$

et

$$|\alpha, J, M\rangle \equiv |\alpha_1 \alpha_2, j_1 j_2, m_1 m_2\rangle = |\alpha_1, j_1, m_1\rangle \otimes |\alpha_2, j_2, m_2\rangle \quad (2.81)$$

on peut montrer que

$$[J^2, J_{1z}] \neq 0, [J^2, J_{2z}] \neq 0 \quad (2.82)$$

c'est-à-dire que J^2 ne commute pas avec J_{1z} et J_{2z} ($[J^2, J_{iz}] \neq 0$) et les autres opérateurs commutent

$$[J^2, j_1^2] = [J^2, j_2^2] = [J_z, j_1^2] = [J_z, j_2^2] = 0 \quad (2.83)$$

2.6 Valeur propre de J_z

$\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ donc $J_z = j_{1z} + j_{2z}$, appliquant l'opérateur J_z sur l'état $|\alpha_1 \alpha_2, j_1 j_2, m_1 m_2\rangle$

$$\begin{aligned} J_z |\alpha_1 \alpha_2, j_1 j_2, m_1 m_2\rangle &= (j_{1z} + j_{2z}) |\alpha_1 \alpha_2, j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \\ &= [j_{1z} |\alpha_1, j_1, m_1\rangle] |\alpha_2, j_2, m_2\rangle + |\alpha_1, j_1, m_1\rangle [j_{2z} |\alpha_2, j_2, m_2\rangle] \\ &= \hbar (m_1 + m_2) |\alpha_1 \alpha_2, j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \\ &= \hbar M |\alpha_1 \alpha_2, j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \end{aligned} \quad (2.84)$$

Donc : $M = m_1 + m_2$ sont les valeurs propres de J_z

- Valeur maximale de M

$$M = m_1 + m_2 \rightarrow M_{\max} = m_{1\max} + m_{2\max} \Rightarrow M_{\max} = +j_1 + j_2$$

• Valeur minimale de M

$$M = m_1 + m_2 \rightarrow M_{\min} = m_{1\min} + m_{2\min} \Rightarrow M_{\min} = -j_1 - j_2 = -(j_1 + j_2) \text{ d'où}$$

$$-(j_1 + j_2) \leq M \leq (j_1 + j_2) \quad (2.85)$$

2.7 Valeurs propres de J^2

Pour j_1 et j_2 donnée, la valeur propre de J^2 (moment cinétique total) sont telque $J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$

Rq : ce sont des entier ou des demi-entier positifs

$$\dim \xi(j_1, j_2) = \sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (2.86)$$

d'âù nous avons $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ valeurs de J^2 .

Chapitre 3

Particule dans un Potentiel Central et application a l'atome d'hydrogène.

3.1 Introduction

On s'intéresse au problème de la quantification du mouvement d'une particule dans un potentiel central; c'est-à-dire dans un potentiel invariant par rotation autrement dit il ne dépend que de la distance (rayon r), à un point donnée l'hamiltonien du système s'écrit

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r), \quad (3.1)$$

En mécanique classique, la solution de ce problème repose sur le fait que le moment cinétique est conservé

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad (3.2)$$

donc $\frac{d\vec{L}}{dt} = \frac{d}{dt}(\vec{r} \wedge \vec{p}) = \frac{d\vec{r}}{dt} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \frac{d\vec{p}}{dt} = \underbrace{\frac{\vec{p}}{m} \wedge \vec{p}}_{=0} + \vec{r} \wedge \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{r} \wedge \vec{F} = 0$ puisque

\vec{r} et \vec{F} sont dans le même sens.

En mécanique quantique, il en va de même mais le moment cinétique dans ce cas est

un opérateur ayant les propriétés suivantes

$$[IL_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k \quad (3.3)$$

$$[IL_i, P_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} P_k \quad (3.4)$$

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{dans une permutation paire} \\ -1 & \text{dans une permutation impaire} \\ 0 & \text{dans les autres cas} \end{cases} \quad (3.5)$$

IL_x, IL_y, IL_z et IL^2 commutent avec H c'est-à-dire avec $V(r)$ et P

L'opérateur Hamiltonien H se met sous la forme

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} IL^2 + V(r) \quad (3.6)$$

Démonstration

$$IL^2 = IL_x^2 + IL_y^2 + IL_z^2 \text{ ou } :IL = r\Lambda P = \begin{pmatrix} yP_z - zP_y \\ zP_x - xP_z \\ xP_y - yP_x \end{pmatrix}$$

$$\text{Calculons : } IL^2 = IL_x^2 + IL_y^2 + IL_z^2$$

$$IL_x^2 = (yP_z - zP_y)^2 = y^2P_z^2 + z^2P_y^2 - yP_zzP_y - zP_yyP_z \quad (3.7)$$

ou le commutateur $[x, p] = xp - px = i\hbar$

$$IL_x^2 = y^2P_z^2 + z^2P_y^2 - y_zP_zP_y + i\hbar yP_z - zyP_yP_z + i\hbar zP_y \quad (3.8)$$

donc on trouve :

$$IL_x^2 = y^2P_z^2 + z^2P_y^2 + i\hbar yP_y + i\hbar zP_z - 2zyP_yP_z \quad (3.9)$$

De la meme manière en retrouve IL_y^2 et IL_z^2 d'où

$$\begin{aligned}
IL^2 &= y^2 P_y^2 + z^2 P_y^2 + i\hbar y P_y + i\hbar z P_z - 2yz P_y P_z \\
&\quad + z^2 P_x^2 + x^2 P_z^2 + i\hbar z P_z + i\hbar x P_x - 2zx P_z P_x \\
&\quad + x^2 P_y^2 + y^2 P_x^2 + i\hbar x P_x + i\hbar y P_y - 2xy P_x P_y
\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
IL^2 &= (y^2 + x^2) P_z^2 + (z^2 + x^2) P_y^2 + (z^2 + y^2) P_x^2 \\
&\quad + 2i\hbar (y P_y + z P_z + x P_x) - 2yz P_y P_z - 2zx P_z P_x - 2xy P_x P_y
\end{aligned} \tag{3.11}$$

On remarque que

$$r^2 P^2 = (x^2 + y^2 + z^2) (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \tag{3.12}$$

donc IL^2 se réduit à

$$IL^2 = 2i\hbar \vec{r} \cdot \vec{P} + r^2 P^2 - x^2 P_x^2 - y^2 P_y^2 - z^2 P_z^2 - 2yz P_y P_z - 2zx P_z P_x - 2xy P_x P_y \tag{3.13}$$

qui s'écrit

$$IL^2 = 2i\hbar \vec{r} \cdot \vec{P} + r^2 P^2 + (\vec{r} \cdot P)^2 \tag{3.14}$$

et finalement nous obtenons pour P^2

$$P^2 = \frac{IL^2}{r^2} + \frac{(\vec{r} \cdot \vec{p})^2}{r^2} - 2i\hbar \frac{\vec{r} \cdot \vec{p}}{r^2} \tag{3.15}$$

d'où l'operateur Hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{p^2}{2m} + v(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2mr^2} IL^2 + v(r) \tag{3.16}$$

Les fonctions propres de H doivent aussi être fonctions propres de IL^2 et de IL_z et qui sont représentées par les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \varphi)$ au niveau de la partie angulaire des fonctions propres de H , où le spectre de IL^2 est donné par

$$IL^2 |\Psi\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\Psi\rangle \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (3.17)$$

$$IL_z |\Psi\rangle = \hbar m |\Psi\rangle \quad m = -l \quad (3.18)$$

$$IL_{\pm} |\Psi_{lm}\rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} |\Psi_{lm \pm 1}\rangle \quad (3.19)$$

3.1.1 Moment cinétique

$$x = r \cos(\theta) \sin(\varphi) \quad (3.20)$$

$$y = r \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (3.21)$$

$$z = r \cos(\theta) \quad (3.22)$$

$$P_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \left(\sin(\theta) \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{r} \cos(\theta) \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin(\varphi)}{r \cos(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.23)$$

$$P_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\hbar}{i} \left(\sin(\theta) \sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos(\theta) \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1 \cos(\varphi)}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.24)$$

$$P_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hbar}{i} \left(\cos(\theta) \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (3.25)$$

Nous trouvons donc, à partir de (2.2), (2.3) et (2.4) l'expression des composantes du

moment cinétique

$$IL_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\cos(\varphi)}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.26)$$

$$IL_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin(\varphi)}{\tan(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.27)$$

$$IL_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.28)$$

et :

$$IL_{\pm} = IL_x \pm iIL_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.29)$$

3.1.2 Les harmonique sphériaue

Consèderons la fonction $\Psi(r, \theta, \varphi)$, fonction propre de IL_z

$$IL_z \Psi(r, \theta, \varphi) = m\hbar \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.30)$$

$\Psi(r, \theta, \varphi)$ peut se mettre sous la forme suivante

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \chi(r, \theta) e^{im\varphi} \quad (3.31)$$

Donc on peut calculer les fonctions propres communes à IL^2 et IL_z de valeurs propres respective $\hbar^2 l(l+1)$ et $m\hbar$ sous la forme

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) e^{im\varphi} \quad (3.32)$$

où la fonction $Y_l^l(\theta, \varphi)$ doit satisfaire : $Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \Rightarrow$

$$\hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \quad (3.33)$$

càd : $(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot(\theta)) F_l^l(\theta) = 0$, elle a pour solution : $F(\theta) = (\sin(\theta))^l$, d'où : $Y_l^l(\theta, \varphi) \propto (\sin(\theta))^l e^{il\varphi}$

donc elle s'écrit

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = C_1 (\sin(\theta))^l e^{il\varphi} \quad (3.34)$$

ou $C_1 = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \text{on} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$

On peut considérer la relation de récurrence

$$Y_l^{m-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}} IL_- y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3.35)$$

Si : $Y_l^m(\theta, \varphi) = C_1 (\sin(\theta))^l e^{im\varphi}$ donc

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} (\sin(\theta))^l e^{im\varphi} \quad (3.36)$$

pour $l = 0 \Rightarrow m = 0$ càd : $Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi}$

pour $l = 1 \Rightarrow m = \pm 1, 0$

pour $l = 1$ et $m = 1 \Rightarrow Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{i\varphi}$

On appliquant IL_- sur $Y_1^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{-3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{i\varphi}$

On appliquant IL_- sur $Y_1^1(\theta, \varphi)$ on peut avoir Y_1^0 et Y_1^{-1}

pour : $l = 2 \Rightarrow m = 0; \pm 1; \pm 2$

en remplaçant par $l = 2$ et $m = 2$ on trouve

$$Y_2^2(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32}} \pi \quad (3.37)$$

De même l'application de IL_- sur $Y_2^2(\theta, \varphi)$ donne les fonctions Y_2^1, Y_2^0, Y_2^{-1} et Y_2^{-2} .

Caractéristique des harmoniques sphériques

- Orthogonalité

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) (Y_m^l)^+ Y_{L'}^{m'} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.38)$$

- On peut établir l'expression suivante

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-1)!}} e^{im\varphi} (\sin(\theta))^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos(\theta))^{l-1}} (\sin(\theta))^{2l} \quad (3.39)$$

- En particulier

$$Y_0^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \varphi)]^* \quad (3.40)$$

3.2 Mouvement dans un potentiel coulombien

Pour une valeur donnée de l on peut chercher les état stationnaire de l'équation de Shrodinger d'une particule dans un potentiel central sous la forme : $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$

L'équation de shrodinger stationnaire pour $v(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{\alpha}{r}$

$$H\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.41)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} IL^2 + v(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.42)$$

qui s'écrit en coordonnées spherique (voir (3.16))

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} IL^2 + v(r) \right] R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = ER(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3.43)$$

qui donne

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{r^2} l(l+1) + v(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (3.44)$$

on pose, comme premier changement de variable : $R(r) = \frac{1}{r}U(r)$

$$\frac{dR(r)}{dr} = -\frac{1}{r^2}U(r) + \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \quad (3.45)$$

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} = \frac{2}{r^3}U(r) - \frac{2}{r^2} \frac{dU(r)}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2U(r)}{dr^2} \quad (3.46)$$

on remplace les deux équations(3.45) et (3.46) dans (3.44), on trouve

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{l(l+1)}{r^2} + v(r) \right] U(r) = EU(r) \quad (3.47)$$

Remarques :

1- l'équation (3.47) est une équation semblable à l'équation de schrödinger stationnaire à 1D, dans un potentiel effectif $V_{eff}(r) = \frac{1}{2m} \hbar^2 \frac{l(l+1)}{r^2} + v(r)$ sauf que $r \in [0; +\infty[$.

2- Pour chaque valeur de l , correspond une équation différentielle à 1D; mais le nombre quantique magnétique m n'apparaît pas dans cette équation, et comme pour chaque valeur de l il y a $(2l+1)$ valeur de m donc il y a $(2l+1)$ équation propre $Y_l^m(\theta, \varphi)$ d'où on E_{lk} est $(2l+1)$ fois dégénérer, c'est une dégénérescence dite "essentielle".

3- Quand $r \rightarrow 0$, on considère le comportement à l'origine des solutions $U(r)$.

4- Le terme $(-\frac{\alpha}{r})$ est négligeable devant le terme $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ avec la condition $U(0) = 0$

• Pour $l \neq 0$; soit $U(r) = r^s$ (comme second changement de variable)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] r^s = 0 \quad (3.48)$$

au voisinage de l'origine, il reste à désigner les valeurs de s

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} r^s = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} r^s \quad (3.49)$$

ceci donne immédiatement

$$s(s+1)r^{s-2} = l(l+1)r^{s-2} \rightarrow s(s+1) = l(l+1) \quad (3.50)$$

$$\text{d'où } \left\{ \begin{array}{l} s = l, \text{ solution rejeté} \\ s = l(l+1), \text{ solution accepté} \end{array} \right\}$$

La condition de normalisation sur $R(r)$ impose que $\int_0^{\infty} r^2 R(r)^2 dr$ soit convergé càd $\int_{-\infty}^{+\infty} [U(r)]^2 dr \neq \infty$; pour ce cas : s doit être égale à $l(l+1)$ donc $s = l(l+1)$ est une solution acceptée et $s = -l$ est une solution refusée d'où ; pour $l \neq 0$ la solution $U(r)$ se met sous la forme $U(r) = r^{l+1}$.

• et pour $l = 0$ l'équation (3.47) devient

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr^2} - \frac{\alpha}{r} \right] U(r) = 0 \quad (3.51)$$

au voisinage de l'origine d'où

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} U(r) = \alpha \frac{U(r)}{r} \quad (3.52)$$

la solution de cette équation nous impose de choisir $U(r)$ sous forme d'une série de puissance de r

$$U(r) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 \dots \quad (3.53)$$

et $\frac{d^2}{dr^2} U(r) = 2a_2 + \dots$, nous obtenons immédiatement

$$\alpha \frac{a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \dots}{r^2} \dots = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} U(r) \quad (3.54)$$

où nous trouvons que $a_0 = 0$

$$U(r) = a_1 r + a_2 r^2 + \dots = \sum r^{\beta+1}; \beta = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (3.55)$$

Ceci dit que dans tous les cas nous avons $U(r) \propto r^{l+1}$ d'où

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{r^{l+1}}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (3.56)$$

3.3 Application à l'atome d'hydrogène

L'Equation différentielle (3.47) s'écrit pour le potentiel de l'atome H $v(r) = -\frac{e^2}{r}$ et on effectue quelques changements de variables, on pose

$$\rho = \frac{r}{\alpha} \quad , \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \quad , \quad \alpha = \frac{\hbar^2}{ma_0} \quad , \quad E_I = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad , \quad \lambda = \sqrt{-\frac{E}{E_i}} \quad , \quad \text{on obtient donc}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \hbar \frac{l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \right) U(\rho) = EU(\rho) \quad (3.57)$$

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} = \frac{d^2U(a_0\rho)}{d(a_0\rho)^2} = \frac{d}{d(a_0\rho)} \left(\frac{dU(a_0\rho)}{d(a_0\rho)} \right) = \frac{1}{a^2} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{dU}{d\rho} \right) \quad (3.58)$$

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = \hbar^2 \frac{l(l+1)}{2ma_0^2 \rho^2} \quad \text{et} \quad E = -\lambda^2 E_i \quad (3.59)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m a_0^2} \frac{d^2U}{d\rho^2} + \hbar^2 \frac{l(l+1)}{2ma_0^2 \rho^2} - \frac{e^2}{\rho a_0} \right) U(\rho) = -\lambda^2 E_i(\rho) \quad (3.60)$$

On multiplie les deux membres par $(-\frac{2ma_0}{\hbar^2})$ l'équation prend la forme

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2 \right) U(\rho) = 0 \quad (3.61)$$

3.3.1 solution de l'équation radiale

qd : $r \rightarrow \infty$, $\rho \rightarrow \infty$, le terme $\frac{l(l+1)}{\rho^2}$ et $\frac{2}{\rho}$ sont négligeables devant les autres termes . l'équation (3.61) se réduit à

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda^2 \right) U(\rho) = 0 \quad (3.62)$$

qui admet une solution de forme exponentielle c'est-à-dire

$$U(\rho) = e^{\pm\lambda\rho} = \begin{cases} e^{-\lambda\rho} & \text{accepté} \\ e^{+\lambda\rho} & \text{rejeté} \end{cases} \quad (3.63)$$

car la condition de la normalisation de $U(\rho)$ impose le choix de $U(\rho) \propto e^{-\lambda\rho}$ ceci dit qu'en considérant les termes $+\frac{l(l+1)}{\rho^2}$ et $\frac{2}{\rho}$, la solution de (3.61) est toujours de la forme : $U(\rho) = e^{-\lambda\rho}y(\rho)$ donc

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda^2\right) e^{-\lambda\rho}y(\rho) = 0 \quad (3.64)$$

et

$$\frac{d^2}{d\rho^2} (e^{-\lambda\rho}y(\rho)) = (y'' - 2\lambda y' + \lambda^2 y) e^{-\lambda\rho} \quad (3.65)$$

donc on remplace dans l'équation différentielle (3.62)

$$\left[y'' - 2\lambda y' + \lambda^2 y - \lambda^2 y\right] e^{-\lambda\rho} = 0 \quad (3.66)$$

revenant à l'équation (3.61) qui devient en considérant (3.65)

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda\frac{d}{d\rho} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] y(\rho) = 0 \quad (3.67)$$

On cherche la solution sous la forme d'une série on pose donc : $y(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q$ avec $C_0 \neq 0$ nous obtenons pour le premier et le second dérivé en ρ

$$\frac{d}{d\rho} y(\rho) = \frac{d}{d\rho} \left(\sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^{q+l+1} \right) = \sum (q+l+1) C_q \rho^{q+l} \quad (3.68)$$

et

$$\frac{d^2}{d\rho^2} y(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} C_q (q+l+1)(q+l) \rho^{q+l-1} \quad (3.69)$$

l'équation (3.67) devient

$$\sum_{q=0}^{\infty} \left[C_q (q+l+1)(q+l) \rho^{q+l-1} - 2\lambda (q+l+1) \rho^{q+l} + 2C_q \rho^{q+l} - l(l+1) \rho^{q+l-1} \right] \quad (3.70)$$

pour $q = 0$

$$C_0 [l(l+1)\rho^{l-1} - 2\lambda(l+1)\rho^l + 2\rho^l - l(l+1)] = 0 \quad (3.71)$$

comme ($C_0 \neq 0$) on trouve

$$2[1 - \lambda(l+1)]\rho^l = 0 \quad (3.72)$$

pour : $q \neq 0$ où on a posé que $q = q' - 1$ dans deuxième et troisième terme, nous avons donc

$$C_q (q+l+1)(q+l)\rho^{q+l-1} - 2\lambda C_{q'-1} [(q'-1) + l + 1] \rho^{q'-1+l} + 2C_{q'-1} \rho^{q'-1+l} - l(l+1)\rho^{q+l-1} = 0 \quad (3.73)$$

revenant maintenant vers la variable muette $q \rightarrow q'$ on trouve

$$C_q (q+l+1)(q+1)\rho^{q+l-1} - 2\lambda C_{q-1} (q+l)\rho^{q-1+l} + 2C_{q-1}\rho^{q+l+1} - C_q l(l+1)\rho^{q+l+1} = 0 \quad (3.74)$$

pour $\rho \neq 0$

$$\begin{aligned} C_q &= C_{q-1} \frac{2[\lambda(q+l) - 1]}{q[q+2l+1]} \\ C_q &\propto C_{q-1} \frac{2\lambda}{q^2} \\ \text{càd } \frac{C_q}{C_{q-1}} &\propto \frac{2\lambda}{q} \end{aligned} \quad (3.75)$$

donc : $C_q = e^{2\lambda q}$, d'ou

$$y(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q \quad (3.76)$$

Quantification de l'énergie :

comme on a déjà imposé que la solution $e^{+\lambda\rho}$ est rejeté, il faut donc que le numérateur dans (l'équation de recurrence entre C_q et C_{q-1}) soit nulle c'ad

$$C_q = C_{q-1} \frac{2[\lambda(q+l) - 1]}{q(q+2l+1)} = 0 \quad (3.77)$$

ement

autrement dit; pour que la solution soit acceptable physiquement on imposera à la série infinie (3.77) de se ramener à un polynôme d'ordre fini et qui se traduit par

$\exists q = k$ tel que $\lambda(k+l) - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = \frac{1}{k+l}$, or le choix déjà effectué est

$$E_{kl} = -\frac{E_I}{(k+l)^2} \quad ((2.B))$$

la relation de récurrence sur les C_q donne la solution $y_{kl}(\rho)$

Exemple

• $k = 1 \quad l = 0 \quad U_{10}(\rho) = C_0 \rho e^{-\rho}$

$\lambda = 1 \quad C_1 = 0$

• $k = \frac{1}{2} \quad l = 0 \quad U_{11}(\rho) = C_0^2 \rho e^{-\frac{\rho}{2}}$

• $k = 2 \quad l = 0$

$\lambda = \frac{1}{2} \quad C_1 = -\frac{1}{2} \quad U_{20}(\rho) = C_0 \rho \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\frac{\rho}{2}}$

comme notation on pose $n = k + l$, n est appelé nombre quantique principal et pour obtenir la formule finale de la partie radiale on remplace ρ par $\frac{r}{a_0}$

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} = \frac{y(r)}{r} e^{-\lambda \frac{r}{a_0}} \quad (3.79)$$

Quelques solutions $R_{n,l}(r)$

$$\begin{aligned}
 R_{1,0}(r) &= 2(a_0)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\
 R_{2,0}(r) &= 2(2a_0)^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^{-\frac{r}{a_0}} \\
 R_{2,1}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}} (2a_0)^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}
 \end{aligned}$$

Dégénérescence de l'énergie : on sait déjà que pour chaque valeur de l , l'énergie $E_{k,l}$ est $(2L + 1)$ fois dégénérer, c'est ce qu'on a appelé la dégénérescence essentielle .

$$E_{k,l} = -\frac{E_I}{(k+l)^2} = E_{k+L} \text{ donnée par l'équation (3.79)}$$

$$\text{on peut alors avoir } \begin{cases} (k; l) \neq (k', l') \rightarrow R_{k,l}(r) = R_{k',l'}(r) \\ (k+l) = (k'+l') \Rightarrow E_{k+l} = E_{k'+l'} \end{cases}$$

par convention , on introduit la notation $n = k + l \Rightarrow E_{k,l} = E_{n=} - \frac{E_I}{n^2}$

$$\text{a un niveau } n, \text{ le degré de dégénérescence } d = \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = n^2$$

Ordre de grandeur des parametres $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e^2} = 0.52 \text{ \AA}$ $E_I = 13.6 \text{ eV}$

$$E_{n,l} = -\frac{E_I}{n^2} = -\frac{E_I}{(k+l)^2} \quad k = 1, 2, \dots \quad n \leq l + 1$$

$$E_I \ll m_e c^2$$

L'électron est très peu relativiste, ceci justifier le faite de prendre l'équation de shro-dinger non relativiste

Rq : les autres cas sont étudier par la théorie des pérturbations.

La dégenérécence des niveaux d'énergie • L'énergie d'un niveaux ne depend que de $n = k + l$

• Si $n = k + l = k' + l' \Rightarrow$ une dégnerecence "accidentalle" le n constitue une couche électronique.

• Pour une valeur de n on peut avoir plusieurs valeurs de l ($n \leq l + 1$)
une valeur de n et une valeur de l definissent une (sous-couche)

- Dans une sous-couche càd : pour (n,l) donné on a $(2l + 1)$ états distincts qui correspondent aux différentes valeurs de m ici la dégénérescence est essentielle

Fonction d'onde

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

On les appelle orbitaux atomiques et ils constituent une base orthonormée

exemple :

$$\begin{array}{ll} \text{niveau } 1S & \Psi_{n,l,m} = \Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \\ \text{niveau } 2S & \Psi_{n,l,m} = \Psi_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ \text{niveau } 2P & \Psi_{n,l,m} \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{2,1,1} = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin(\theta) e^{i\varphi} \\ \Psi_{2,1,0} = \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos(\theta) \\ \Psi_{2,1,-1} = \frac{1}{8} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin(\theta) e^{-i\varphi} \end{array} \right. \end{array}$$

Chapitre 4

Méthodes d'approximations

4.1 Méthodes des Perturbations stationnaires :

4.1.1 Introduction

On considère par l'étude l'ensemble des systèmes dont l'opérateur Hamiltonien se décompose sous la forme

$$H = H_0 + W \quad (4.1)$$

où H_0 est l'Hamiltonien d'un système que l'on peut résoudre exactement (a titre d'exemple l'atome H , l'oscilateur harmonique...)

$$H_0 |\varphi_n^0\rangle = E_n^0 |\varphi_n^0\rangle \quad (4.2)$$

donc on connaît exactement les valeurs propres E_n^0 et les états propres supposé discrets $|\varphi_n^0\rangle$, et W est un terme additionnel qui représente une légère perturbation apporté au système principal, Cette situation se rencontre, soit lorsque W correspond à une interaction contrôlée et de force variable (par exemple application d'un champ extérieur (électrique ou magnétique) sur l'atome), soit lorsque W est associé à un effet interne à l'atome (interaction spin-orbite par exemple).

Nous avons donc

$$W = \lambda V, \text{ où } \lambda \ll 1 \quad (4.3)$$

λ est un paramètre sans dimension.

4.1.2 Principe de la méthode des perturbations stationnaires

La théorie des perturbations, en général et stationnaires dans notre chapitre, consiste à en déduire une expression approchée des valeurs propres et états propres de H à partir des états propres et valeurs propres de H_0 .

Nous souhaitons résoudre l'équation

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (4.4)$$

Pour cela, nous admettons que la solution (états propres de H) s'écrit sous forme d'un développement en puissance de λ

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n^0\rangle + \lambda |\varphi_n^1\rangle + \lambda^2 |\varphi_n^2\rangle + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k |\varphi_n^k\rangle \quad (4.5)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^k \quad (4.6)$$

en remplaçant dans l'équation aux valeurs propres (4), nous obtiendrons donc pour les termes d'ordre 0, 1, 2 et q en λ

$$H_0 |\varphi_n^0\rangle = E_n^0 |\varphi_n^0\rangle \quad (4.7)$$

$$H_0 |\varphi_n^1\rangle + V |\varphi_n^0\rangle = E_n^0 |\varphi_n^1\rangle + E_n^1 |\varphi_n^0\rangle \quad (4.8)$$

$$H_0 |\varphi_n^2\rangle + V |\varphi_n^1\rangle = E_n^0 |\varphi_n^2\rangle + E_n^1 |\varphi_n^1\rangle + E_n^2 |\varphi_n^0\rangle \quad (4.9)$$

$$H_0 |\varphi_n^q\rangle + V |\varphi_n^{q-1}\rangle = E_n^0 |\varphi_n^q\rangle + E_n^1 |\varphi_n^{q-1}\rangle + E_n^2 |\varphi_n^{q-2}\rangle + \dots + E_n^q |\varphi_n^0\rangle \quad (4.10)$$

Considérons l'ensemble des états propres de $H = H(\lambda)$, associés à des valeurs propres

$E(\lambda)$ qui tendent vers E_n^0 lorsque λ tend vers 0. Cet ensemble est nécessairement un sous-espace vectoriel de dimension égale à g_n , degré de dégénérescence de E_n^0 . En particulier, si E_n^0 est non dégénérée, celle-ci ne peut donner lieu qu'à une seule valeur propre $E(\lambda)$.

4.1.3 Perturbation d'un niveau non dégénéré

Considérons un niveau d'énergie non dégénéré de H_0 , d'énergie E_n^0 et état propre $|\varphi_n^0\rangle$.

Correction de l'énergie au 1^{er} ordre

a partie de l'équation au lier ordre ()

$$H_0 |\varphi_n^1\rangle + V |\varphi_n^0\rangle = E_n^0 |\varphi_n^1\rangle + E_n^1 |\varphi_n^0\rangle$$

et en projetant cette dernière sur l'état $\langle\varphi_n^0|$

$$E_n^1 = \langle\varphi_n^0| V |\varphi_n^0\rangle$$

c'est-à-dire qu'a l'ordre 1

$$E_n = E_n^0 + \langle\varphi_n^0| W |\varphi_n^0\rangle$$

Correction de l'état propre au 1^{er} ordre

en projetant maintenant l'équation () sur l'état $\langle\varphi_m^0|$

$$|\varphi_n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle\varphi_m^0| V |\varphi_n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\varphi_m^0\rangle$$

autrement dit, à l'ordre 1

$$|\varphi_n\rangle = |\varphi_n^0\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \varphi_m^0 | W | \varphi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |\varphi_m^0\rangle$$

Correction de l'énergie a l'ordre $q \geq 2$

a partir de l'équation a l'ordre q ()

$$H_0 |\varphi_n^q\rangle + V |\varphi_n^{q-1}\rangle = E_n^0 |\varphi_n^q\rangle + E_n^1 |\varphi_n^{q-1}\rangle + E_n^2 |\varphi_n^{q-2}\rangle + \dots + E_n^q |\varphi_n^0\rangle$$

et en projetant cette dernière sur l'état $\langle \varphi_n^0 |$

$$E_n^q = \langle \varphi_n^0 | V | \varphi_n^{q-1} \rangle$$

en particulier pour $q = 2$

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \langle \varphi_n^0 | V | \varphi_n^1 \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n^0 | V | \varphi_m^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned}$$

ce qui donne

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n^0 | W | \varphi_n^0 \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n^0 | W | \varphi_m^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

4.1.4 Perturbation d'un niveau d'énergie dégénéré

La difficulté tient au fait que l'état $|\varphi_n^0\rangle$, état propre de H_0 , n'est plus déterminé de façon unique. Il peut être égal à l'un quelconque des états $|\varphi_n^q\rangle$ ou à une combinaison linéaire de ceux-ci. C'est à dire qu'il appartient au sous-espace propre associé à E_n^0 .

Le cas le plus simple c'est le cas où E_n^0 est 2 fois dégénérée, c'est-à-dire que a E_n^0 sont

associés 2 états propres qu'on note $|\varphi_{n,1}^0\rangle$ et $|\varphi_{n,2}^0\rangle$

$$|\varphi_n^0\rangle = \alpha_1 |\varphi_{n,1}^0\rangle + \alpha_2 |\varphi_{n,2}^0\rangle$$

$|\varphi_n^0\rangle$ est bien déterminé si et seulement si l'on connaît les coefficients α_1 et α_2 et qui sont calculés à partir d'un système de deux équations en α_1 et α_2 et qui n'admet pas de solution non nuls que si son déterminant est égal à 0

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

où

$$\begin{aligned} V_{11} &= \langle \varphi_{n,1}^0 | V | \varphi_{n,1}^0 \rangle \\ V_{12} &= \langle \varphi_{n,1}^0 | V | \varphi_{n,2}^0 \rangle \\ V_{21} &= \langle \varphi_{n,2}^0 | V | \varphi_{n,1}^0 \rangle \\ V_{22} &= \langle \varphi_{n,2}^0 | V | \varphi_{n,2}^0 \rangle \\ E &= E_n^1 \text{ au 1}^{\text{er}} \text{ ordre} \end{aligned}$$

et à partir de ce déterminant, on peut trouver une équation en $(E)^2$ qui admet en général deux racines qu'on note $E_{n,+}^1$ et $E_{n,-}^1$

4.2 Méthode variationnelle :

4.2.1 Introduction

les perturbations stationnaires, constituent un palliatif qui permettent dans certains cas, de résoudre l'équation aux valeurs propres. Toutefois, lorsque des corrections au second ordre sont exigées, la méthode des perturbations devient très coûteuse en calculs. Dans cette partie nous présentons une autre méthode d'approximation dite des variations,

alternative aux perturbations stationnaires, qui possède l'avantage de ne pas exiger une connaissance préalable des solutions exactes des systèmes étudiés. Cette méthode est utilisée le plus souvent pour calculer de façon approchée, l'énergie du niveau fondamental d'un système stationnaire.

4.2.2 Méthode variationnelle pour le niveau fondamental

Considérons un système quantique caractérisé par son hamiltonien H indépendant du temps (système dit stationnaire) dont le spectre est discret et non dégénéré. Soit $E_0, E_1, E_2, \dots, E_n$ les valeurs propres de H tel que

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_n$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

et $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$ les vecteurs propres de H

il vient que

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

- le vecteur $|\varphi\rangle \in \xi$ (ξ est l'espace des états du système) qui est décrit par les kets $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_n\rangle$

- tous vecteur $|\psi\rangle$ peut être développé sur la base des vecteurs propres de H sous la forme

$$|\varphi\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle$$

- les coefficients C_n sont des coefficients, complexes, du développement.

- L'avaleur moyenne de l'énergie a pour expression

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{\sum_n |C_n|^2 E_n}{\sum_n |C_n|^2} \geq E_0 \quad (4.11)$$

La formule précédente () est l'équation maitresse de la théorie des variations. Elle stipule que la valeur moyenne de H pour tout état $|\varphi\rangle$ constitue une valeur approchée par excès de l'énergie E_0 du niveau fondamental. Il y a égalité stricte lorsque l'état $|\varphi\rangle$ est vecteur propre de H associé à l'énergie E_0 .

Explicitons la méthode et choisissons une fonction d'essai de l'état fondamental qui dépend de un ou plusieurs paramètres variationnels α_i (non explicités pour l'instant)

Valeur approximative de E_0 et expression approximative de $|\varphi_0\rangle$

le système est décrit par son Hamiltonien H indépendant du temps, choisissons arbitrairement un vecteur $|\varphi(\alpha)\rangle$ normé et calculons

$$\langle\varphi(\alpha)|H|\varphi(\alpha)\rangle = \int \varphi^*(\alpha) H \varphi(\alpha) d\tau$$

$d\tau$: est un élément de volume

$|\varphi(\alpha)\rangle$: dépend des paramètres α

On agit sur ces paramètres de façon à rendre $\langle\varphi(\alpha)|H|\varphi(\alpha)\rangle$ minimale en résolvant l'équation

$$\left. \frac{dE}{d\alpha} \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0$$

dans ce cas, la valeur minimum obtenue est proche de E_0 et le ket $|\varphi(\alpha_0)\rangle$ obtenu est proche de $|\varphi_0\rangle$.

Les kets (fonctions) $|\varphi(\alpha)\rangle$ sont appelés kets où fonctions d'essai.

Valeur approximative de E_1 et expression approximative de $|\varphi_1\rangle$

On prend un nouveau ket d'essai $|\varphi(\alpha)\rangle$ normé et orthogonal à $|\varphi(\alpha_0)\rangle$ et on cherche à minimiser $\langle\varphi(\alpha)|H|\varphi(\alpha)\rangle$

La valeur moyenne de l'énergie dans l'état $|\varphi\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle$ est

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{\sum_n |C_n|^2 E_n}{\sum_n |C_n|^2} \geq E_1$$

et il y a égalité si $|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle$.

Chapitre 5

Diffusion d'une particule sans spin par un potentiel central

5.1 Introduction

La théorie de la diffusion est l'étude des collisions élastiques entre les particules, qui est réalisable par des expériences de collision. Dans ce chapitre nous considérons la diffusion d'une particule de masse M par un potentiel $V(r)$ ayant son origine en un point fixe O de l'espace, où $V(r)$ est un potentiel central local qui doit vérifier les conditions suivantes :

- Les conditions aux limites à l'origine $\varphi(r=0) = 0$ ($\varphi(r)$ est la solution de l'équation de diffusion radiale)

- $|V(r)| \leq \frac{c}{r}$ quand $r \rightarrow \infty$ (est un potentiel de courte portée)

- $|V(r)| \leq \frac{c}{r^{3/2}}$ quand $r \rightarrow 0$ (il est moins singulier que $r^{-3/2}$ exclut les potentiels nucléaire)

- $V(r)$ est continue pour $0 < r < \infty$

Le système initial est constitué d'un faisceau des particules incidentes ayant une masse M , une quantité de mouvement $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, une intensité I_0 (le nombre des particules qui traverse par unité de temps l'unité de surface normale à la direction du faisceau). En générale I_0 est suffisamment faible pour que le nombre d'interaction entre les particules

incidentes soit négligeable et d'une cible qui est caractérisé par la nature des atomes qui la constituent et le nombre d'atomes au centre de diffuseur contenue dans le volume de cible irradié par le faisceau.

Définition : La section efficace différentielle est le nombre de particules incidentes qui traverse le détecteur par unité de temps et par unité d'aire pour une particule cible

$$d\sigma = \frac{dn}{I_0 X} = \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (5.1)$$

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi \text{ est l'angle solide} \quad (5.2)$$

sa dimension est celle d'une surface qui s'exprime par le barus où

$$1 \text{ barus} = 10^{-24} \text{ cm}^2 = 10^2 \text{ Fermi}^2 \quad (5.3)$$

5.2 Principe de calcul de la section efficace

Le calcul d'une section efficace de collision se fait par l'intermédiaire de la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ ($\varphi(\vec{r})$ est la fonction d'onde de l'état stationnaire de collision)

$$H |\Psi(\vec{r}, t)\rangle = i\hbar |\dot{\Psi}(\vec{r}, t)\rangle \quad (5.4)$$

$$|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \varphi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) \quad (5.5)$$

$$H |\varphi(\vec{r})\rangle = E |\varphi(\vec{r})\rangle \quad (5.6)$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \quad (5.7)$$

Pour calculer $\varphi(\vec{r})$ il faut résoudre l'équation de Schrödinger aux valeurs propres. On s'intéresse aux limites, comme $V(r)$ est de court porté donc $H \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$ qui représente l'hamiltonien d'une particule libre, donc en coordonnées sphérique (r, θ, φ) la forme asymptotique de $\varphi(\vec{r})$ est

$$\varphi^{(\infty)}(\vec{r}) = A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} + B(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (5.8)$$

où

- $A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$ décrit les particules qui s'éloignent de l'origine O (les ondes sortantes ou divergentes)

- $B(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr}}{r}$ décrit les particules qui s'approche de l'origine O (les ondes entrantes ou convergentes)

Les particule diffusées sont décrites par les ondes sortantes

La partie asymptotique en ondes entrantes de $\varphi^{(\infty)}(\vec{r})$ est nécessairement associé aux particules incidentes, autrement dit $\varphi(\vec{r}) = \underset{\varphi_{inc}}{ce^{ikr}} + \varphi_{dif}(\vec{r})$, il en résulte que :

$$\varphi(\vec{r}) - \varphi_{inc}(\vec{r}) = \varphi_{dif}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} cf(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (5.9)$$

Le flux Φ des particules par unité de temps à travers un élément de surface S situé au point \vec{r} est définie par :

$$\Phi = \frac{1}{2M} [\varphi^*(\vec{r})(P_{\perp}\varphi(\vec{r})) + (P_{\perp}\varphi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r})] ds \quad (5.10)$$

$\varphi(\vec{r})$ est la fonction d'onde des particules de masse M

P_{\perp} est l'opérateur associé à la projection de quantité de mouvement sur la normale à l'élément de surface S

Si on prend $\vec{Oz} // \vec{k} \Rightarrow P_{\perp} = P_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ et $\varphi_{inc}(\vec{r}) = ce^{i\vec{k}\vec{r}} = ce^{ikz}$

$$I_0 = \frac{|c^2| \hbar k}{M} ds \quad (5.11)$$

donc

$$dn = \frac{|c^2| \hbar k}{M} |f(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (5.12)$$

$$d\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (5.13)$$

5.3 Méthode des ondes partielles

C'est une méthode mathématique qui consiste à trouver la fonction d'onde d'état stationnaire de collision élastique $\varphi(\vec{r})$, qui est une solution de l'équation de Schrödinger

$$[\Delta + k^2 - \bar{V}(r)] \varphi(\vec{r}) = 0, \quad (5.14)$$

$$\bar{V}(r) = \frac{2M}{\hbar} V(r), k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} \quad (5.15)$$

tel que la condition aux limite (a l'infini $\varphi(\vec{r})$ se comporte comme une onde sortante)

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (\varphi(\vec{r}) - e^{-ikr}) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \quad (5.16)$$

La méthode des ondes partielles est particulièrement adoptée au cas où le potentiel $V(r)$ est centra, c.-à-d. il existe des solutions particulières pour l'équation de Schrödinger aux valeurs propres, des fonctions propres simultanées de L^2 et L_z de la forme $\frac{\varphi_\ell(\vec{r})}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$, avec ℓ est un entier ≥ 0 et $-\ell \leq m \leq \ell$

$\varphi_\ell(\vec{r})$ étant solution de l'équation différentielle

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \varphi_\ell(\vec{r}) = 0 \quad (5.17)$$

La solution de l'équation (*) et une combinaison linéaire des fonction (5.16)

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell,m} \frac{\varphi_\ell(\vec{r})}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (5.18)$$

- Comportement à l'origine des solutions de l'équation radiale

Comme $|V(r)| < cr^{-3/2}$ quand $r \rightarrow 0$, donc il est négligeable devant $\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ dans

l'équation (5.18) dans ce cas $\varphi_\ell(\vec{r}) = \lim_{r \rightarrow 0} \varphi_\ell(\vec{r})$ est une solution pour l'équation

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \varphi_\ell(\vec{r}) = 0 \quad (5.19)$$

pour résoudre cette équation nous utilisons la méthode d'Euler $\left(\varphi_\ell(\vec{r}) = cr^\alpha \right)$, donc l'équation au voisinage de zéro admet deux solutions, $\varphi_\ell(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} cr^{\ell+1}$ régulière à l'origine et $\varphi_\ell(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow 0} cr^{-\ell}$ irrégulière à l'origine.

Seul la solution régulière est acceptable physiquement.

- Comportement à l'infinie de la solution régulière et définition de déphasage δ_ℓ

Lorsque $r \rightarrow \infty$ $\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \rightarrow 0$ et $|V(r)| < cr^{-1} \rightarrow 0$, alors l'équation radiale se réduit à :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] \varphi_\ell(\vec{r}) = 0 \quad (5.20)$$

dont la solution générale est $\varphi_\ell(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} c \sin(kr - \beta_\ell)$, on pose $\beta_\ell = \frac{\ell\pi}{2} - \delta_\ell$

$$\varphi_\ell(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} c \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) \quad (5.21)$$

δ_ℓ dépend de ℓ, k et de potentiel $V(r)$, est appelé le déphasage de $\ell^{\text{ième}}$ onde partielle, sa valeur traduit l'influence du potentiel sur une particule incidente d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$.

5.4 Expression de $\varphi(r)$, $f(\theta)$ et $\sigma(\theta)$ en fonction du déphasage δ_ℓ :

Comme

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell,m} \frac{\varphi_\ell(\vec{r})}{r} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad \text{et} \quad (5.22)$$

$$\varphi_\ell(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} c \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) \quad (5.23)$$

Puisque les coefficients $a_{\ell,m}$ sont déterminés, on impose la normalisation de $\varphi_\ell(\vec{r}) \Rightarrow$

$$C = \frac{i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} \quad (5.24)$$

Nous allons déterminer en exploitant la condition aux limites

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (\varphi(\vec{r}) - e^{-ikr}) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi)$$

pour $\vec{Oz} // \vec{k}$ la direction de faisceau incident

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{\ell,m} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \delta_{m,0} \quad (5.25)$$

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{\ell} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} j_\ell(kr) Y_\ell^0(\theta, \varphi) \quad (5.26)$$

où $\delta_{m,0}$ est le symbole de Kronecker, d'autre part on sait que le polynôme de Bessel sphérique $j_\ell(kr)$

$$j_\ell(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} \frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} \quad (5.27)$$

on obtient

$$a_{\ell,m} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell\right) - \delta_{m,0} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \quad (5.28)$$

avec $2i \sin x = e^{ix} - e^{-x}$ donc

$$\frac{i^{-\ell-1}}{2} e^{ikr} (a_{\ell,m} e^{i\delta_\ell} - \delta_{m,0}) - \frac{i^{\ell-1}}{2} e^{-ikr} (a_{\ell,m} e^{-i\delta_\ell} - \delta_{m,0}) = \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \quad (5.29)$$

il faut que

$$\frac{i^{\ell-1}}{2} e^{-ikr} (a_{\ell,m} e^{-i\delta_\ell} - \delta_{m,0}) = 0 \rightarrow a_{\ell,m} e^{-i\delta_\ell} - \delta_{m,0} \rightarrow a_{\ell,m} = \delta_{m,0} \text{ et} \quad (5.30)$$

$$\frac{i^{-\ell-1}}{2} e^{ikr} (a_{\ell,m} e^{i\delta_\ell} - \delta_{m,0}) \rightarrow \frac{i^{-\ell-1}}{2} e^{ikr} (e^{2i\delta_\ell} - 1) \delta_{m,0} \quad (5.31)$$

finalement n peut arrivé facilement a

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (\varphi(\vec{r}) - e^{-ikr}) \rightarrow \sum_{\ell,m} \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{2ik} \frac{e^{ikr}}{r} (e^{2i\delta_\ell} - 1) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \delta_{m,0} \quad (5.32)$$

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{2ik} (e^{2i\delta_\ell} - 1) Y_\ell^0(\theta, \varphi) \quad (5.33)$$

$$Y_\ell^0(\theta, \varphi) = P_\ell(\cos \theta) \text{ polynôme de Legendre} \quad (5.34)$$

la section efficace différentielle de diffusion est donnée par

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell'=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{(2\ell'+1)} \sqrt{(2\ell+1)} (e^{2i\delta_{\ell'}} - 1) (e^{-2i\delta_\ell} - 1) Y_{\ell'}^0 Y_\ell^0 \quad (5.35)$$

donc la section efficace intégrale est

$$\sigma = \int \sigma(\theta) \sin \theta d\theta d\varphi \text{ avec } \int Y_\ell^m Y_{\ell'}^{m'} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'} \quad (5.36)$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \quad (5.37)$$

5.5 Théorème optique :

L'amplitude de diffusion est

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{2ik} (e^{2i\delta_\ell} - 1) Y_\ell^0(\theta, \varphi) \quad (5.38)$$

Remarquons que

$$\frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2i} = e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell \text{ et } Y_\ell^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta) \quad (5.39)$$

d'autre part on a lorsque $\theta = 0$:

$$P_\ell(\cos \theta)_{\theta=0} = 1 \text{ et } e^{i\delta_\ell} = \cos \delta_\ell + i \sin \delta_\ell \quad (5.40)$$

donc

$$\text{Im } f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \quad (5.41)$$

et la section intégrée est de la forme

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \Rightarrow \sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(\theta) \quad (5.42)$$

cette relation est connue sur le nom de théorème optique, par analogue avec la relation obtenue pour la diffusion élastique des ondes électromagnétique

5.6 Application (potentiel de porté fini)

Soit le potentiel de porté fini défini par :

$$V(r) = \begin{cases} V \text{ pour } r < R & \text{région 1} \\ 0 \text{ ailleurs} & \text{région 2} \end{cases} \quad (5.43)$$

On doit résoudre l'équation de Schrödinger suivante

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \bar{V}(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \varphi_\ell(r) = 0 \quad (5.44)$$

avec

$$\bar{V}(r) = \begin{cases} \frac{2M}{\hbar^2} V & \text{pour } r < R & \text{région 1} \\ 0 & \text{ailleurs} & \text{région 2} \end{cases} \quad (5.45)$$

$$k^2 = \frac{2M}{\hbar^2} E \quad (5.46)$$

Région 1

L'équation différentielle admet une solution régulière à l'origine. Notons que cette solution est de la forme

$$\frac{\varphi_\ell(r)}{r} = cF_\ell(r) \quad (5.47)$$

Région 2

L'équation différentielle se réduit à :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \varphi_\ell(r) = 0 \quad (5.48)$$

qui représente l'équation de diffusion radiale d'une particule libre, sa solution s'écrit en fonction des polynôme de Bessel et Newman sphérique, sous la forme :

$$\frac{\varphi_\ell(r)}{r} = \alpha j_\ell(kr) + \beta \eta_\ell(kr) \quad (5.49)$$

où

$$j_\ell(\rho) = \frac{\sin\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{\rho} \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad (5.50)$$

$$\eta_\ell(\rho) = \frac{\cos\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{\rho} \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{(2\ell+1)!!}{(2\ell+1)\rho^{\ell+1}} \quad (5.51)$$

$$\text{avec } (2\ell+1)!! = 1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2\ell+1)$$

et α, β sont deux constantes

Les conditions de continuité aux point $r = R$ s'écrivent

$$cF_\ell(R) = \alpha j_\ell(kR) + \beta \eta_\ell(kR) \quad (5.52)$$

$$cF'_\ell(R) = \alpha k j'_\ell(kR) + \beta k \eta'_\ell(kR) \quad (5.53)$$

avec

$$j'_\ell(kR) = \frac{d[j_\ell(kR)]}{d(kr)}; \quad \eta'_\ell(kR) = \frac{d[\eta_\ell(kR)]}{d(kr)} \quad (5.54)$$

donc

$$\frac{F'_\ell(R)}{F_\ell(R)} = k \frac{j'_\ell(kR) + \frac{\beta}{\alpha} \eta'_\ell(kR)}{j_\ell(kR) + \frac{\beta}{\alpha} \eta_\ell(kR)} \quad (5.55)$$

si on pose

$$\gamma_\ell = R \frac{F'_\ell(R)}{F_\ell(R)} \Rightarrow \frac{\beta}{\alpha} = - \frac{(kR) j'_\ell(kR) - \gamma_\ell j_\ell(kR)}{(kR) \eta'_\ell(kR) - \gamma_\ell \eta_\ell(kR)} \quad (5.56)$$

d'autre part :

$$\frac{\varphi_\ell(r)}{r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \alpha \left[\frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} + \frac{\beta}{\alpha} \frac{\cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} \right] \quad (5.57)$$

on pose $\frac{\beta}{\alpha} = \tan \lambda$

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_\ell(r)}{r} &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \alpha \left[\frac{\sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} + \frac{\sin \lambda \cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{\cos \lambda} \frac{1}{kr} \right] \\ \frac{\varphi_\ell(r)}{r} &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{kR \cos \lambda} \left[\cos \lambda \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \sin \lambda \frac{\cos\left(kr - \frac{\ell\pi}{2}\right)}{kr} \right] \\ \frac{\varphi_\ell(r)}{r} &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{kR \cos \lambda} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \lambda\right) \\ \varphi_\ell(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} C \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \arctan\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)\right) \end{aligned} \quad (5.58)$$

et si on compare avec la forme de la fonction d'onde qui s'écrit en fonction de déphasage

δ_ℓ on remarque que :

$$\varphi_\ell(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} C \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_\ell \right) \rightarrow \tan \delta_\ell = \frac{\beta}{\alpha} \quad (5.59)$$

Finalement

$$\tan \delta_\ell = -\frac{(kR) j'_\ell(kR) - \gamma_\ell j_\ell(kR)}{(kR) \eta'_\ell(kR) - \gamma_\ell \eta_\ell(kR)}; \gamma_\ell = R \frac{F'_\ell(R)}{F_\ell(R)} \quad (5.60)$$

Chapitre 6

Exercices d'applications

6.1 Exercices du chapitre 1

Exercice 1 : représentations $\{|X \rangle\}$ et $\{|P \rangle\}$

Soit l'opérateur H représentant l'hamiltonien classique

$$H = \frac{P^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m} K^2 + V(x)$$

- Écrire l'équation de Schrödinger dans les représentations $\{|X \rangle\}$ et $\{|P \rangle\}$,

- Comparer les deux résultats et commenter.

Exercice 2 : Oscillateur harmonique

On considère un oscillateur harmonique à une dimension défini par l'Hamiltonien

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Les opérateurs a et a^+ sont définis par les relations

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \quad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}$$

et les vecteurs propres de H sont notés $|\varphi\rangle$.

On définit la variance de l'opérateur A dans l'état $|\varphi\rangle$ par :

$$\Delta A_{|\varphi\rangle} = \sqrt{\langle\varphi|A^2|\varphi\rangle - \langle\varphi|A|\varphi\rangle^2}$$

Etablir la forme des opérateurs \hat{x}^2 , \hat{p}^2 en fonction de a et a^+ . Déterminer $\Delta\hat{x}$, $\Delta\hat{p}$

dans un état propre du Hamiltonien.

Etablir la forme de l'opérateur \hat{x}^3 . En déduire ses éléments de matrices diagonaux $\langle \varphi_n | \hat{x}^3 | \varphi_n \rangle$.

Calculer les éléments de matrices non diagonaux $\langle \varphi_m | \hat{x}^3 | \varphi_n \rangle$.

Exercice 3

Nous nous proposons dans cet exercice de retrouver les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique en utilisant les propriétés des vecteurs propres de l'opérateur position définis comme : $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$.

En utilisant la définition de l'opérateur position pour le cas de l'oscillateur harmonique, calculer son action sur un état propre $|\varphi_n\rangle$ de H .

En déduire le produit scalaire $\langle x | \hat{x} | \varphi_n \rangle$.

Sachant que $|x\rangle$ sont les vecteurs propres de \hat{x} , déduire une relation de récurrence sur les coefficients $\langle x | \varphi_n \rangle$ (on posera $n + 1 = m$).

En faisant le changement de variables $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ ainsi que le changement de fonction $f_n(y) = \sqrt{2^n n!} \frac{\langle x | \varphi_n \rangle}{\langle x | \varphi_0 \rangle}$, réexprimer la relation de récurrence. Conclure sur la nature des fonctions propres de l'oscillateur harmonique.

Exercice 4 :

On considère un oscillateur harmonique isotrope à deux dimensions $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{r}$.

En introduisant les opérateurs de créations et d'annihilations

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p}_x \right) \\ a_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{y} + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p}_y \right) \\ a_x^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p}_x \right) \\ a_y^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{y} - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p}_y \right), \end{aligned}$$

calculer les commutateurs $[a_x, a_x^+]$, $[a_y, a_y^+]$. Vérifier que $[a_x, a_y] = [a_x^+, a_y^+] = 0$.

Exprimer le Hamiltonien en fonction de (a_x, a_x^+) et (a_y, a_y^+) .

En utilisant les résultats obtenus en cours pour l'oscillateur harmonique à une dimension, en déduire les trois premiers états d'énergie de ce système et leurs dégénérescence ; écrire les kets associés à ces valeurs propres en utilisant les nombres quantiques n_x et n_y .

On introduit l'opérateur moment cinétique, et plus particulièrement sa composante sur l'axe z : $\widehat{L}_z = \widehat{x}\widehat{p}_y - \widehat{y}\widehat{p}_x$. Ecrire \widehat{L}_z en fonction (a_x, a_x^+) et (a_y, a_y^+) .

Montrer que \widehat{L}_z commute avec H .

On introduit les opérateurs

$$a_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y), \quad a_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y).$$

Donner les expressions de a_d^+ et a_g^+ , et vérifier que les relations de commutations ont la même forme que pour les opérateurs de création et d'annihilation usuels.

On pose $\widehat{N}_d = a_d^+ a_d$ et $\widehat{N}_g = a_g^+ a_g$. Réécrire le Hamiltonien et le moment cinétique \widehat{L}_z en fonction de \widehat{N}_d et \widehat{N}_g .

En déduire les valeurs propres du Hamiltonien et de \widehat{L}_z , puis classer les trois premiers états en fonction des nombres quantiques $n = n_d + n_g$ et $m = n_d - n_g$. Quelle est la signification de n_d et n_g .

Exercice 5 :

Dans un espace vectoriel à deux dimensions, on considère l'opérateur dont la matrice, dans une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, s'écrit : $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

1. a- σ_y est-il hermitique?. Calculer ses valeurs propres et ses vecteurs propres.

b- calculer les matrices représentant les projecteurs sur ces vecteurs propres. Vérifier que ceux-ci satisfont à des relations d'orthogonalité et de fermeture.

- Mêmes questions pour les matrices : $M = \begin{pmatrix} 2 & i\sqrt{2} \\ -i\sqrt{2} & 3 \end{pmatrix}$,

et dans un espace à trois dimensions $L_z = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$

Exercice 6 :

On considère un système physique dont l'espace des états ξ est rapporté à la base orthonormée formée par les 4 kets $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, |u_4\rangle\}$. Dans cette base l'hamiltonien est représenté par la matrice :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}$$

a)- Quelles sont les valeurs propres et les vecteurs propres de H

b)- soit un opérateur σ agissant dans le sous espace $\xi' = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$ et défini par :

$\sigma = |u_1\rangle \langle u_2| + |u_2\rangle \langle u_1|$. Etablir la matrice (2×2) qui représente σ dans le sous espace ξ'

c)- S est une matrice (2×2) exprimée dans $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$ et définie par :

$$S = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Donner les valeurs et vecteurs propres de cette matrice dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$.

d)- Soit A une observable agissant dans ξ' et défini par :

$$A|u_1\rangle = a|u_2\rangle, \quad A|u_2\rangle = a|u_1\rangle, \quad A|u_3\rangle = a|u_4\rangle, \quad A|u_4\rangle = a|u_3\rangle$$

a est une constant réelle et positive

d1/ Donner la forme matricielle de A dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, |u_4\rangle\}$

d2/ En utilisant les résultats de la question c), Donner les valeurs propres de A et exprimer dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, |u_4\rangle\}$ ses vecteurs propres.

d3/ H et A peuvent ils avoir un ensemble de vecteurs propres communs? Que doivent vérifier les constantes α, β, γ , et δ pour que A soit une constante du mouvement?

Exercice 7 :

Deux operateurs A et B ont pour matrice representative sur une base canonique $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ de

$$\text{l'espace vectoriel } \xi, \quad A = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{bmatrix} \quad \text{où } a \text{ et } b \text{ sont des}$$

constantes réelles.

1/ calculer les commutateurs $[A, B]$, les opérateurs A et B sont ils hermitiens?

2/ Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de A et B .

Exercice 8 :

Dans une base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$, un opérateur est représenté par la matrice

$$A = \begin{bmatrix} -1 & i \\ -i & 1 \end{bmatrix}$$

a- Est-ce que A est hermitique ?

b- Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de A ?

c- vérifier que les vecteurs propres forme une base orthonormée complète.

Exercice 9 :

Un opérateur K est un opérateur hermitique tel-que $K^2 = K$, On définit les kets $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$ par $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{i}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$, $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}|u_2\rangle$ où $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ est une base orthonormée dans ξ .

a- Ces kets sont-ils normés ?

b- Calculer les matrices K_0 et K_1 des projecteurs sur l'états $|\psi_0\rangle$ et sur l'état $|\psi_1\rangle$.

6.2 Exercices du chapitre 2

On considère trois opérateurs hermitiques J_x, J_y et J_z tels que :

$$[J_x, J_y] = iJ_z \text{ ou } \hbar = 1$$

et des expressions similaires pour les permutations cycliques des indices. On définit l'opérateur hermitique :

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

et les opérateurs non-hermitiques

$$J_+ = J_x + iJ_y ; J_- = J_x - iJ_y$$

Exercice 1 : Propriétés des opérateurs J^2 et J_{\pm} :

1- Montrer que : J^2 commute avec les opérateurs J_x, J_y, J_z et avec J_{\pm} .

2- Montrer que :

a/ $[J_z, J_{\pm}] = \pm J_{\pm}$

b/ $[J_+, J_-] = 2J_z$

c/ $J^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2$

d/ $J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - J_z$

e/ $J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + J_z$

Exercice 2 :

1- Montrer que les valeurs possible de m sont tel que $-j \leq m \leq +j$ (voir le cour)

2- Montrer que $J_z J_- |\alpha, j, m\rangle = \hbar (m - 1) J_- |\alpha, j, m\rangle$

3- Montrer que $J_z J_+ |\alpha, j, m\rangle = \hbar (m + 1) J_+ |\alpha, j, m\rangle$

4- Montrer que $J^2 J_+ |\alpha, j, m\rangle = \hbar^2 j (j + 1) J_+ |\alpha, j, m\rangle$

Exercice 3 :

Calculer les matrices représentant les opérateurs J^2, J_x, J_y, J_z et J_{\pm} dans la base des vecteurs $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ dans les cas suivants : $j = \frac{1}{2}; j = 1$.

Exercice 4 :

On étudie un spin $S = 1$ (le problème peut concerner d'ailleurs un moment orbital $l = 1$, c'est à dire des états p); \vec{u} est un vecteur unitaire réel.

1- Chercher l'état $|\varphi(\vec{u})\rangle$ état propre de $\vec{S} \cdot \vec{u}$ pour la valeur propre 0, c'est à dire $\vec{S} \cdot \vec{u} |\varphi(\vec{u})\rangle = 0$, on exprime cet état à l'aide des $|1, m\rangle$, vecteurs propres de S_z par la valeur propre m

2- On peut écrire $|\varphi(\vec{u})\rangle = u_x |x\rangle + u_y |y\rangle + u_z |z\rangle$; $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$ étant trois combinaisons linéaires normées des $|1, m\rangle$; montrer que ces trois vecteurs sont orthogonaux.

3- Former les matrices des composantes de \vec{S} en prenant pour base $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$

4- Le spin est soumis à des forces qui se traduisent par un hamiltonien $H = AS_x^2 + BS_y^2 + CS_z^2$; Trouver les niveaux du système.

Exercice 5 :

On considère deux moments cinétique $j_1 = 1$ et $j_2 = \frac{1}{2}$, les états propres communs à

$(\vec{J}_1^2, J_{1z}, \vec{J}_2^2, J_{2z})$ sont notés $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$

1- Quelle est la dimension de l'espace des états? Quels sont les valeurs possible du moment cinétique totale $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$? Quelle est la dimension de l'espace des états de \vec{J} ?

2- Déterminer quelques composants $|J, M, j_1, j_2\rangle$ des états propres de (J^2, J_z) sous la forme de combinaison linéaire des états propres $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$.

3- trouver toutes les composantes dans le cas particulier où $j_1 = j_2 = 1$.

Exercice 6 :

On sachant que $[J_{\pm}, \vec{J}^2] = 0$, et j et m sont les valeurs propres de J et J_z respectivement, et en utilisant les relations $J_{\pm} |j, m\rangle = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} |j, m \pm 1\rangle$ ou $J = L + S$ et $S = \frac{1}{2}$

1- Quelles sont les valeurs possible de J dans ce cas?

2- En appliquant J_- sur l'état correspondant a $j = l + \frac{1}{2}$, montrer que $|l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\rangle = \left(\frac{2l}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} |l, l - 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \left(\frac{l}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} |l, l, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$

3- donner l'état correspondant a $j = l - \frac{1}{2}$ en fonction des états $|l, m_l, s, m_s\rangle$.

Exercice7 :

On considère un système de deux particules de spin $\frac{1}{2}$.

1- Quelles sont les différentes valeurs propres possibles associées au carré du spin totale S^2 ? 2- Donner la décomposition des états propres communs a S^2 et S_z en fonction des états de la base produit tensoriel.

Exercice8 :

On considère un système de deux particules de moments cinétiques orbitaux $l_1 = l_2 = 1$.

On note $|l, M\rangle$ les états propres associés au cinétique orbital totale du système.

1- Quelles sont les valeurs possibles de L ? Pour une valeur de L donnée, quelles sont les valeurs possibles de M ? Dénombrer les états $|l, M\rangle$. Comparer ces résultats avec la dimension des espaces des états de chaque particule.

2- Donner l'expression de l'état $|2, 2\rangle$, en déduire l'expression des autres états de moment cinétique $|l, M\rangle$ sur la base des états $|l_1, l_2, m_1, m_2\rangle$.

Exercice 9 :

Nous considérons deux moments cinétiques \vec{j}_1 et \vec{j}_2 avec $j_1 = 1$ et $j_2 = \frac{3}{2}$. On définit la base Produit tensoriel $\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\} \equiv \{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$ et la base du moment cinétique total $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ est tel que $\{|J, M\rangle\}$

1. Quelle est la dimension de l'espace pour ce système ?
2. Quelles sont les valeurs J du moment cinétique total, que nous obtenons en faisant l'addition de \vec{j}_1 et \vec{j}_2 ?
- 3- A partir de $|\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\rangle$, exprimer $|\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\rangle$ dans la base produit tensoriel puis calculer $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$

6.3 Exercices du chapitre 3

Exercice 01 : Oscillateur harmonique à 3 dimensions

Il s'agit de trouver, pour l'oscillateur harmonique isotrope (μ, ω) , les fonctions propres communes à (H, L^2, L_z) . on pose $\psi(r, \theta, \varphi) = r^{-1}U(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$.

- a- Ecrire l'équation satisfaite par $U(r)$
- b- trouver la constante α en suposant que $U(r) \sim e^{-\alpha r^2/2}$ quand $r \rightarrow \infty$.
- c- on pose $U(r) = e^{-\alpha r^2/2} V(r)$, trouver l'équation différentielle pour la nouvelle fonction inconnue $V(r)$.

d- chercher $V(r)$ sous forme d'une serie entière $V(r) = r^s \sum_{m=0}^{\infty} C_m r^m, C_0 \neq 0$, et trouver la relation de récurrence entre les coefficients C_m . En examinant les deux premières équations pour C_0 et C_1 , montrer que $V(r)$ est de la forme $V(r) = r^{l+1} \sum_{p=0}^{\infty} C_{2p} r^{2p}$.

En trouvant une série de comparaison, montrer que la série apparaissant dans l'équation précédente se comporte comme $e^{+\alpha r^2}$ pour $\alpha r^2 \gg 1$. n deduire qu'il doit exister un entier $p_0 \geq 0$ tel que $k^2 - \alpha(4p_0 + 2l + 3) = 0$

- On pose $n = 2p_0 + l$, Trouver les valeurs de l'énergie E_n et preciser la dégénérecence des niveaux.

Exercice 02

Considérons la fonction d'onde

$$\Psi(r, \theta) = \frac{1}{81} \sqrt{\frac{2}{\pi}} Z^{\frac{3}{2}} (6 - Zr) Zr e^{-\frac{Zr}{3}} \cos(\theta)$$

- Trouver la valeur correspondante aux nombre quantique n, l et m .
- Construire à partir de $\Psi(r, \theta)$ une autre fonction d'onde qui dépende même n et l et d'un nombre quantique magnétique égale à $m + 1$.
- Calculer la valeur de r la plus probable pour un électron qui se trouve dans l'état correspondant à Ψ et $Z = 1$.

Exercice 3 :

Une particule de masse μ est confinée dans un puit sphérique infiniment profond

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > a \\ \infty & \text{si } r < a \end{cases}$$

et on pose $\psi(r, \theta, \varphi) = r^{-1}U(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$.

- a- Ecrire l'équation donnant l'équation radiale $U(r)$
- b- on pose $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, $\rho = kr$, $U(r) = \rho^{\frac{1}{2}}v(\rho)$, Ecrire l'équation satisfaite par $v(\rho)$.
- c- En déduire que $v(\rho)$ est une combinaison linéaire des deux fonctions de Bessel, expliquer pourquoi il faut rejeter la solution singulière à l'origine.
- d- Exprimer la fonction radiale $R(r)$ en fonction des fonctions de Bessel

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} j_{l+\frac{1}{2}}(x)$$

6.4 Exercices du chapitre 4

6.4.1 partie 1 : les perturbations stationnaires

Exercice 1 : Perturbation linéaire d'un oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique subit une perturbation $V = kax$, où $a \ll 1$

1. Calculer les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique perturbé en résolvant directement l'équation de Schrödinger de l'oscillateur perturbé.

2. Calculer les niveaux d'énergie de l'oscillateur perturbé par la méthode des perturbations pour le niveau fondamental $n = 0$.

Exercice 2 : Perturbation en X^2 d'un oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique est soumis à une perturbation dont l'hamiltonien est :

1. Écrire le potentiel de perturbation en fonction des opérateurs d'annihilation a et de création a^\dagger de l'oscillateur

2. Calculer, par la méthode des perturbations, les énergies de perturbation au premier et deuxième ordre.

3. Calculer directement les niveaux d'énergie exacts et comparer aux résultats précédents.

Exercice 3 :

On se propose d'étudier, par la théorie des perturbations stationnaires, les niveaux d'énergies d'un système de deux particules de spins $\frac{1}{2}$ plongées dans un champs statique \vec{B}_0 et couplées par une interaction dipole-dipole magnétique. le Hamiltonien du système est $H = H_0 + W$, Si on suppose que le champ statique \vec{B}_0 parallèle à l'axe (oz) , le hamiltonien Zeeman H_0 qui décrit l'interaction des deux moments magnetiques de spin avec \vec{B}_0 s'écrit $H_0 = \omega_1 s_{1z} + \omega_2 s_{2z}$ où $\omega_1 = -\gamma_1 B_0$ et $\omega_2 = -\gamma_2 B_0$, (γ_1 et γ_2 étant les rapports gyromagnetiques des particules).

L'interaction dipole W entre les spin \vec{s}_1 et \vec{s}_2 s'écrit :

$$W = \frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_1 \gamma_2 \frac{1}{r^3} [\vec{s}_1 \vec{s}_2 - (\vec{s}_1 \vec{n})(\vec{s}_2 \vec{n})] \quad \text{avec } \vec{r} = r\vec{n}$$

Nous supposons le champ B_0 suffisamment grand pour que l'on puisse traiter W comme une perturbation .

On peut montrer que l'expression de W peut s'écrire en coordonnées polaires comme :

$$W = \frac{-\mu_0 \gamma_1 \gamma_2}{4\pi r^3} \left[\begin{aligned} &(3 \cos^2 \theta - 1)S_{1z}S_{2z} - \frac{1}{4}(3 \cos^2 \theta - 1)(S_{1+}S_{2-} - S_{1-}S_{2+}) \\ &\quad + \frac{3}{2} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}(S_{1z}S_{2+} + S_{1+}S_{2z}) \\ &+ \frac{3}{2} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}(S_{1z}S_{2-} + S_{1-}S_{2z}) + \frac{3}{4} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi} S_{1+}S_{2+} \\ &\quad + \frac{3}{4} \sin^2 \theta e^{2i\varphi} S_{1-}S_{2-} \end{aligned} \right]$$

1- On suppose $\omega_1 \neq \omega_2$. Quels sont les valeurs propres de H_0 et les états propres correspondants. Evaluer le déplacement des niveaux d'énergie au premier ordre en W .

2- On suppose maintenant $\omega_1 = \omega_2$. Déterminer les valeurs propres de H_0 et leur degré de dégénérescence, ainsi que les états propres correspondants. Quels sont les déplacements des niveaux d'énergie à l'ordre 1 en W et les états propres à l'ordre 0.

Exercice 4 :

On considère une perturbation linéaire à un Oscillateur harmonique à une dimension, ce cas intervient lorsque l'oscillateur harmonique de charge q est placé dans un champ électrique ξ où il prend l'énergie supplémentaire $(-q\xi x)$, le Hamiltonien est $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\xi x$ où $q\xi \ll \omega (m\omega\hbar)^{\frac{1}{2}}$

-Trouver les valeurs propres approchées de H ainsi que les états propres approchés au premier ordre

Rappel : $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^+)$ où a et a^+ sont les opérateurs d'annihilations et de créations.

Le développement au quatrième ordre de l'énergie potentielle d'interaction des atomes d'une molécule diatomique est de la forme $V(x) = V_0 + \alpha X^2 + \beta X^3 + \gamma X^4$. où le terme γX^4 est petit par rapport à αX^2 .

1. Exprimer l'opérateur X^4 en fonction des opérateurs d'annihilation et de création, a et a^+ .

2. Calculer la correction E_n^1 au premier ordre dû à γX^4 de l'oscillateur harmonique.

Exercice 5 :

Dans certaines conditions un ion paramagnétique situé dans réseau cristallin peut être

décrit par l'hamiltonien $H = H_0 + AJ_z^2$, $A = cte$, les vecteurs propres normalisés communs à H_0 , J^2 et J_z sont $|E_0, J, M\rangle$ où E_0 dépend seulement de J .

On s'intéresse uniquement aux états du système pour lesquels $E_0 = \alpha$, $J = 1$.

- 1- Indiquer à quelle énergie ils correspondent et quelle est leur dégénérescence.
- 2- On ajoute à H une petite perturbation $H' = B (J_x^2 - J_y^2)$ où B est une constante.
 - Ecrire H' en fonction de J_+ et J_- où $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$.
 - Calculer les déplacements des niveaux d'énergies au premier ordre de H'
 - Déterminer les vecteurs d'états correspondants à ces niveaux d'énergies.

Exercice 6 :

On applique à l'atome d'hydrogène un champ électrique uniforme statique $\vec{\xi}$ dont le sens est suivant l'axe (OZ)

- 1- Ecrire le Hamiltonien du système
- 2- Etude du niveau fondamental : $n = 1$
 - Montrer que la première correction non nulle étant ξ^2 est elle est négative.
- 3- Etude du premier niveau excité : $n = 2$
 - Montrer qu'au premier ordre le niveau $n = 2$ se scind en trois niveaux équidistants et donner l'ordre de dégénérescence de chacun deux.

6.4.2 partie 2 : La Méthode des Variations

Exercice 1

on veut calculer l'énergie de l'état fondamentale de l'atome d'hydrogène par la méthode des variations, en prenant pour fonction d'essai les fonctions $\varphi_{\alpha}(\vec{r})$ à symétrie sphérique, dont la dépendance en r est donnée par :

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha}(r) &= c \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) \text{ pour } r \leq \alpha \\ \varphi_{\alpha}(r) &= 0 \text{ pour } r \geq \alpha \end{aligned}$$

c est une constante de normalisation et α le paramètre variationnel.

1- Calculer la valeur moyenne des énergie cinétique et potentielle de l'électron dans l'état $|\varphi_\alpha\rangle$

2- En déduire la valeur optimale α_0 de α et comparer la au rayon de Bhor a_0 .

3- Comparer la valeur approchée obtenue pour l'énergie de l'état fondamental à la valeur exacte E_I .

Exercice 2 :

Appliquer la méthode des variations à l'oscilateur harmonique à une dimension pour déterminer approximativement l'énergie et fonction d'onde de l'état fondamental et le premier excité. on suggère de choisir des fonction d'essai a un parrametre,

-d'abord de la forme exponentielle $\alpha \geq 0$

$$\varphi_0(x, \alpha) = A \exp(-\alpha x^2) \quad \text{état fondamental}$$

$$\varphi_1(x, \alpha) = A' x \exp(-\alpha x^2) \quad \text{lier excité}$$

-En suite de la forme

$$\varphi_0(x, \alpha) = \frac{\beta}{1 + \alpha x^2} \quad \text{état fondamental}$$

ou $\alpha \geq 0$

6.5 Exercices du chapitre 5

Exercice 1 :

On considère le potentiel $V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } r \leq R \\ 0 & \text{pour } r > R \end{cases}$, V_0 et R sont respectivement la profondeur et la largeur du puit de potentiel. Sachant que l'énergie des particules incidentes $E > 0$, ($kR \ll 1$), déterminer la section efficace intégrée de diffusion.

Exercice 2 :

On considère une particule de masse m qui diffuse sur le potentiel central $V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{pour } r < a \\ 0 & \text{pour } r \geq a \end{cases}$, où $V_0 > 0$, on posera $U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$, et $U_0 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$.

1- Partant de l'équation de Schrödinger stationnaire $H\psi = E\psi$, l'écrire en coordonnées sphériques avec $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ et obtenir l'équation radiale que doit satisfaire $R(r)$ sous la forme d'une équation de Bessel.

2- On cherche maintenant à résoudre l'équation de Schrödinger radiale de la question (1) : $R(r)$ est combinaison linéaire des fonctions de Bessel j_l et n_l . Utiliser la condition que $R(r)$ doit être fini en $r = 0$. Poser $K^2 = k^2 + U_0$. Ecrire le raccordement en $r = a$ pour la fonction $R(r)$ et sa dérivée et déduire que l'équation de Schrödinger est équivalente à

$$\frac{K j'_l(Ka)}{j_l(Ka)} = \frac{k (B j'_l(ka) + C n'_l(ka))}{B j_l(ka) + C n_l(ka)}$$

où n'_l, j'_l sont les dérivées, $B, C \in \mathbf{C}$ des coefficients inconnus.

3- Montrer que pour $r \rightarrow \infty$, $R(r)$ peut s'écrire :

$$R(r) = A \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)$$

Pourquoi appelle-t-on δ_l "le déphasage"? Montrer que l'on peut aussi écrire

$$R(r) = -\frac{1}{2ik} A e^{-i\delta_l} \left(\frac{e^{-ikr}}{r} - S_l \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

et donner l'expression de S_l à partir de δ_l . Donner l'interprétation de S_l .

4- A partir de la question (2), donner l'expression de $\tan \delta_l$.

5- Donner quantitativement la liste des ondes partielles l qui participent à la diffusion, en fonction de k et a .

6- on étudie maintenant le secteur d'ondes partielles $l = 0$, qui est important à basse énergie $k \rightarrow 0$. Donner l'expression de $\tan \delta_0$ en fonction de k, a et K .

Bibliographie

- [1] J. Hladik, M. Chrysos, P.E. Hladik, L.U. Ancarani, Mécanique quantique (Atomes et noyaux, Applications technologiques), Edition Dunod, Paris, 2009.
- [2] A. Messiah, Mécanique Quantique, Edition Dunod, Paris, 1964.
- [3] L. Landau et E. Lifchitz, Mécanique Quantique, Edition Mir, Moscou, 1967.
- [4] Y.Peleg, R.Pnini et E.Zaarour, Theory and problems of Quantum mechanics, Serie Schaum, McGraw-Hill, 1998.
- [5] M. Le Bellac, Physique Quantique, CNRS Edition, Paris, 2003.
- [6] C.Aslangul, Application de la Mécanique quantique de l'atome au solide, Ecole normale supérieure, université Pierre et Marie Curie, Paris, 2006
- [7] F.Mila, Physique Quantique I et II, Ecole polytechnique Fédérale de Lausanne, 2010.
- [8] C.C;Tannoudji, B.Diu et F.Laloe, Mécanique Quantique I, II et III, CNRS Edition, 2018.