

Les fonctions propres de l'opérateur de moment cinétique en coordonnées sphériques

Mécanique Quantique

Hossein Rahimzadeh

8/19/2008

Les fonctions propres de l'opérateur de moment cinétique en coordonnées sphériques

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

Où l est un nombre entier $0 \leq l \leq n+1$ et $m = \{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l\}$ et n est le nombre quantique principale.

Alors :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi_{l,m}(\theta, \phi) = \hbar m \psi_{l,m}(\theta, \phi)$$

Soit $\psi'(\theta, \phi)$ une solution particulière de cette équation, par la méthode de séparation des variables on pose :

$$\psi'(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

On substitue dans l'équation :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} [\Theta(\theta) \Phi(\phi)] = \hbar m \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

$$\Theta(\theta) \frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} = im \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

$$\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi} = im \Phi(\phi)$$

$$\frac{d\Phi(\phi)}{\Phi(\phi)} = im d\phi$$

$$\ln \Phi(\phi) = im$$

$$\Phi_m(\phi) = C_m e^{im\phi}$$

On trouve C_m :

$$\int_0^{2\pi} d\phi \Phi_m^*(\phi) \Phi_{m'}(\phi) = \delta_{mm'}$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi (C_m e^{im\phi})^* C_{m'} e^{im'\phi} = \delta_{mm'}$$

$$C_m C_{m'} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-im\phi} e^{im'\phi} = \delta_{mm'}$$

Pour $m = m'$

$$C_m^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

$$C_m^2 2\pi = 1$$

$$C_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Donc,

$$\boxed{\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}}$$

La solution particulière devient :

$$\psi'(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

On substitue dans l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\hat{L}^2 |l \ m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l \ m\rangle$$

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Theta(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} = \hbar^2 l(l+1) \Theta(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} e^{im\phi} + \cot \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} e^{im\phi} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 e^{im\phi}}{d\phi^2} \Theta(\theta) = -l(l+1) \Theta(\theta) e^{im\phi}$$

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta(\theta) = -l(l+1) \Theta(\theta)$$

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} + \cot \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta(\theta) = -l(l+1) \Theta(\theta)$$

$$\frac{d^2}{d\theta^2} \Theta(\theta) + \cos \theta \frac{d}{\sin \theta d\theta} \Theta(\theta) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta(\theta) + l(l+1) \Theta(\theta) = 0$$

Avec un changement de variable $\mu = \cos \theta$ on arrive à :

$$\mu = \cos \theta \Rightarrow \frac{d\mu}{d\theta} = -\sin \theta \Rightarrow \frac{d^2 \mu}{d\theta^2} = -\cos \theta$$

Alors,

$$\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} = \frac{d\Theta(\theta)}{d\mu} \frac{d\mu}{d\theta} = -\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\mu}$$

Et,

$$\frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\theta^2} = \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\mu^2} \frac{d\mu}{d\theta} \frac{d\mu}{d\theta} + \frac{d\Theta(\theta)}{d\mu} \frac{d^2 \mu}{d\theta^2} = \sin^2 \theta \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\mu^2} - \cos \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\mu}$$

Alors :

$$\underbrace{\sin^2 \theta}_{1-\mu^2} \frac{d^2 \Theta(\theta)}{d\mu^2} - \underbrace{\cos \theta}_{\mu} \frac{d\Theta(\theta)}{d\mu} + \underbrace{\cos \theta}_{\mu} \underbrace{\frac{d}{\sin \theta d\theta}}_{-d\mu} \Theta(\theta) - \frac{m^2}{\underbrace{\sin^2 \theta}_{1-\mu^2}} \Theta(\theta) + l(l+1) \Theta(\theta) = 0$$

$$(1-\mu^2) \frac{d^2}{d\mu^2} \Theta(\theta) - 2\mu \frac{d}{d\mu} \Theta(\theta) - \frac{m^2}{1-\mu^2} \Theta(\theta) + l(l+1) \Theta(\theta) = 0$$

$$\frac{d}{d\mu} \left[(1-\mu^2) \frac{d}{d\mu} \Theta(\theta) \right] - \frac{m^2}{1-\mu^2} \Theta(\theta) + l(l+1) \Theta(\theta) = 0$$

C'est l'équation de *Legendre associée*. $\Theta(\theta)$ obéit à la même équation que $P_l^m(\mu)$ alors :

$$\Theta_{l,m}(\theta) = C_{l,m} P_l^m(\mu) = C_{l,m} P_l^m(\cos \theta), \text{ Pour tout les constantes } C_{l,m}.$$

On trouve $C_{l,m}$:

La solution particulière est :

$$\Phi'_{l,m}(\theta, \phi) = \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi) = C_{l,m} P_l^m(\cos \theta) \Phi_m(\phi)$$

$$\int d\Omega \Phi_{l,m}^*(\theta, \phi) \Phi'_{l,m}(\theta, \phi) = 1$$

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \left[C_{l,m} P_l^m(\cos \theta) \right]^2 \int_0^{2\pi} d\phi \Phi_m^*(\phi) \Phi_m(\phi) = 1$$

$$C_{l,m}^2 \underbrace{\int_0^\pi \sin \theta d\theta \left[P_l^m(\cos \theta) \right]^2}_{\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{2}{2l+1}} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \Phi_m^*(\phi) \Phi_m(\phi)}_1 = 1$$

Alors,

$$C_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

Donc,

$$\boxed{\Theta_{l,m}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta)}$$

Alors,

$$\psi'_{l,m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

$$= \underbrace{\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}}_{Y_{l,m}(\theta, \phi)}$$

Et :

$$\boxed{\psi'_{l,m}(\theta, \phi) = Y_{l,m}(\theta, \phi)}$$

En résumé :

Équation aux valeurs propres	Les fonctions propres	Les valeurs propres
$\hat{L}_z l \ m\rangle = \hbar m l \ m\rangle$	$Y_{l,m}(\theta, \phi)$	$\hbar m$
$\hat{\mathbf{L}}^2 l \ m\rangle = \hbar^2 l(l+1) l \ m\rangle$	$Y_{l,m}(\theta, \phi)$	$\hbar^2 l(l+1)$