Corrigé du contrôle du 07/03/2009
Méthodes mathématiques

Partie I.

1) Calculons $[\hat{H}_x, \hat{H}_y]$:

$$[\hat{H}_x, \hat{H}_y] = \hat{H}_x \hat{H}_y - \hat{H}_y \hat{H}_x = (-\partial_{xx} + x^2)(-\partial_{yy} + y^2)$$
$$- (-\partial_{yy} + y^2)(-\partial_{xx} + x^2) = 0,$$

car $[\partial_x, \partial_y] = [\partial_x, y] = [\partial_y, x] = [x, y] = 0$

De même, $[\hat{H}_x, \hat{H}_z] = [\hat{H}_y, \hat{H}_z] = 0$

Notons maintenant que $\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$. Alors

$$[\hat{H}, \hat{H}_x] = [\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z, \hat{H}_x] = \underset{0}{\underbrace{[\hat{H}_x, \hat{H}_x]}} + \underbrace{\underset{0}{[\hat{H}_y, \hat{H}_x]} + \underset{0}{[\hat{H}_z, \hat{H}_x]}}_{\text{d'après ce qui précède}} = 0$$

De même, $[\hat{H}, \hat{H}_y] = [\hat{H}, \hat{H}_z] = 0$

2) Introduisons

$$\varphi_n(x) = \frac{H_n(x)\, e^{-x^2/2}}{2^{n/2}\, \pi^{1/4} \sqrt{n!}}, \qquad n = 0, 1, \ldots$$

où $H_n(x)$ est le polynôme d'Hermite de degré n.
C'est une fonction propre de $\hat{H}_x$, avec $\lambda_n = 1 + 2n$ la valeur propre associée. C'est-à-dire :

$$\hat{H}_x\, \varphi_n(x) = (1+2n)\, \varphi_n(x)$$

De façon analogue :

$$\hat{H}_y\, \varphi_m(y) = (1+2m)\, \varphi_m(y)$$

$$\hat{H}_z\, \varphi_\ell(y) = (1+2\ell)\, \varphi_\ell(y)$$

Supposons maintenant qu'on veut trouver les fonctions propres communes de $\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z$. On a donc :

$$\hat{H}_x\, \psi(x,y,z) = \lambda\, \psi(x,y,z) \Rightarrow \psi(x,y,z) = C(y,z)\, \varphi_n(x)$$

(il existe n tel que $\psi(x,y,z) = C(y,z)\, \varphi_n(x)$, où $C(y,z)$ est une fonction quelconque de y, z).

Comme $\psi(x,y,z)$ est une fonction propre de $\hat{H}_y$, on obtient

$$\hat{H}_y\, C(y,z) = \tilde{\lambda}\, C(y,z) \Longrightarrow \exists\, m :\ C(y,z) = D(z)\, \varphi_m(y)$$

De la même manière, on montre que $\exists \ell$:

$$D(z) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{indépendant de } x,y,z}}{\text{const}} \cdot \varphi_\ell(z)$$

Donc les vecteurs propres communes de $\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z$ sont caractérisés par 3 nombres $n, m, \ell = 0, 1, \ldots$ et ont la forme

$$\Psi_{n,m,\ell}(x,y,z) = \text{const} \cdot \varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_\ell(z)$$

Si on pose const $= 1$, ces fonctions propres sont orthonormées:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \; \overline{\Psi_{n,m,\ell}(x,y,z)} \; \Psi_{n',m',\ell'}(x,y,z) = \delta_{nn'}\delta_{mm'}\delta_{\ell\ell'}$$

Comme $\hat{H}, \hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z$ commutent entre eux, $\Psi_{n,m,\ell}(x,y,z)$ sont automatiquement les fonctions propres de $\hat{H}$:

$$\hat{H}\,\Psi_{n,m,\ell}(x,y,z) = \left(\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z\right)\varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_\ell(z) =$$

$$= \underbrace{(1+2n)}_{\lambda_n}\varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_\ell(z) + \underbrace{(1+2m)}_{\lambda_m}\varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_\ell(z) +$$

$$+ \underbrace{(1+2\ell)}_{\lambda_\ell}\varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_\ell(z) = (3+2n+2m+2\ell)\varphi_n(x)\varphi_m(y)\varphi_\ell(z) =$$

$$= \underbrace{(3+2n+2m+2\ell)}_{\text{notons } \Lambda_{n,m,\ell}}\Psi_{n,m,\ell}(x,y,z) = \Lambda_{n,m,\ell}\,\Psi_{n,m,\ell}(x,y,z)$$

valeur propre correspondante de $\hat{H}$.

<u>Question-bonus:</u>

On voit que les niveaux d'énergie sont dégénérés.

Multiplicité de chaque valeur propre = nombre de triplets (n,m,ℓ) avec la même somme $n+m+\ell$.

<u>Exemples:</u>

$n+m+\ell = 0 \implies$ 1 triplet $(0,0,0)$, multiplicité 1

$n+m+\ell = 1 \implies$ 3 triplets $(0,0,1)$, $(0,1,0)$, $(1,0,0)$, multiplicité 3.

$n+m+\ell = 2 \implies$ 6 triplets $(0,0,2)$, $(0,2,0)$, $(2,0,0)$, $(1,1,0)$, $(1,0,1)$, $(0,1,1)$, multiplicité 6.

Cas général - niveau d'énergie $\Lambda_{n,m,\ell} = 3+2k$.

$$n+m+\ell = k \Rightarrow \quad n = 0,\dots,k$$
$$m = 0,\dots,k-n$$
$$\ell = k-n-m \quad (\text{fixé par } n,m)$$

Donc le nombre de triplets est

$$N_{\text{triplets}} = \sum_{n=0}^{k}\sum_{m=0}^{k-n} 1 = \sum_{n=0}^{k}(k-n+1) =$$
$$= (k+1)\underbrace{\sum_{n=0}^{k} 1}_{\substack{\shortparallel \\ k+1}} - \sum_{n=0}^{k} n =$$
$$= (k+1)^2 - (0+1+2+\dots+k) = (k+1)^2 - \frac{k(k+1)}{2},$$
$$= (k+1)\left(k+1-\frac{k}{2}\right) = \frac{(k+1)(k+2)}{2}$$

Vérifications:

$$k=1 \Rightarrow N_{\text{triplets}} = \frac{(1+1)(1+2)}{2} = 3$$
$$k=2 \Rightarrow N_{\text{triplets}} = \frac{(2+1)(2+2)}{2} = 6$$
$$k=0 \Rightarrow N_{\text{triplets}} = \frac{(0+1)(0+2)}{2} = 1, \text{ etc.}$$

3) Fonctions propres communes de $\hat{H}, \hat{L}, \hat{L}_z$ ont la forme

$$\Psi_{\ell m}(r,\theta,\varphi) = f_{\ell m}(r)\underbrace{Y_\ell^m(\theta,\varphi)}_{\text{harmoniques sphériques}}, \quad \begin{cases} \ell = 0,1,\dots\infty \\ m = -\ell,\dots,\ell \end{cases}$$

L'hamiltonien pour un potentiel $V(r)$ à symétrie sphérique s'écrit comme

$$\hat{H} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{r^2}$$

et donc les fonctions propres radiales vérifient une équation différentielle <u>ordinaire</u>:

$$\left\{-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + r^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\} f_{\ell m}(r) = E f_{\ell m}(r)$$

<u>Remarque</u>: l'équation ne dépend pas de $m \Rightarrow$ les niveaux d'énergie sont (au moins) $2\ell+1$ fois dégénérés.

4] On considère

(*) $$\left\{-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + r^2 - E\right\} g(r) = 0$$

1). Essayons d'abord $g(r) = r^{\nu} + o(r^{\nu})$

$(r \to \infty)$

$$g'(r) = \nu r^{\nu-1} + o(r^{\nu-1})$$
$$g''(r) = \nu(\nu-1) r^{\nu-2} + o(r^{\nu-2})$$

On obtient

$$\underbrace{\{-\nu(\nu-1)r^{\nu-2} + o(r^{\nu-2})\}}_{-g''} + \underbrace{\{-2\nu r^{\nu-2} + o(r^{\nu-2})\}}_{-\frac{2}{r}g'}$$

$$+\underbrace{\{\ell(\ell+1)r^{\nu-2} + o(r^{\nu-2})\}}_{\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}g} + \underbrace{\{r^{\nu+2} + o(r^{\nu+2})\}}_{r^2 g} - \underbrace{\{E r^{\nu} + o(r^{\nu})\}}_{Eg} = 0$$

La puissance de r la plus grande (le terme dominant) est $r^{\nu+2}$ et il n'y a rien qui peut la compenser $\Longrightarrow$ notre substitution n'est pas bonne.

2). Posons $g(r) = r^{\alpha} e^{P(r)}\left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right)$

Si on note $g(r) = e^{f(r)}$, alors

$$f(r \to \infty) = P(r) + \alpha \ln r + O\left(\frac{1}{r}\right)$$
$$f'(r \to \infty) = P'(r) + \frac{\alpha}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$
$$f''(r \to \infty) = P''(r) - \frac{\alpha}{r^2} + O\left(\frac{1}{r^3}\right)$$

Déterminons d'abord le degré de P. Posons

$$P(r) = A r^d + O(r^{d-1})$$
$$\Downarrow$$
$$f(r) = A r^d + O(r^{d-1})$$
$$f'(r) = Ad\, r^{d-1} + O(r^{d-2})$$
$$f''(r) = Ad(d-1)\, r^{d-2} + O(r^{d-3})$$

D'autre part l'équation pour f est:

(**) $$-f'' - (f')^2 - \frac{2}{r}f' + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + r^2 - E = 0$$

$$\Downarrow$$

$$d(d-1)A r^d + O(r^{d-1}) - A^2 d^2 r^{2d-2} + O(r^{2d-1}) - 2Ad\, r^{d-2} + O(r^{d-\ldots}$$
$$+ \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + r^2 - E = 0.$$

Candidats pour la puissance maximale : $2d-2$ et 2.
Comme il n'y a pas de termes qui peuvent compenser ces puissances, la seule possibilité est :

$$2d-2 = 2 \Rightarrow d = 2$$

$$A^2 d^2 = 1 \Rightarrow A = \pm \frac{1}{2}$$

Donc

$$P(r) = \pm \frac{r^2}{2} + Br$$

$$f(r) = \pm \frac{r^2}{2} + Br + \alpha \ln r + O\left(\frac{1}{r}\right)$$

$$f'(r) = \pm r + B + \frac{\alpha}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

$$f''(r) = \pm 1 - \frac{\alpha}{r^2} + O\left(\frac{1}{r^3}\right)$$

On substitue ces développements dans (**) et on ne garde que les puissances r^2, r^1, r^0 :

$$\underbrace{\mp 1}_{-f''} - \underbrace{\left(\cancel{r^2} \pm 2Br \pm 2\alpha + B^2\right)}_{(f')^2} \underbrace{\mp 2}_{\frac{2}{r}f'} + \cancel{r^2} - E + O\left(\frac{1}{r}\right) = 0$$

On voit alors que $B = 0$ et

$$\mp 3 \mp 2\alpha - E = 0 \Rightarrow \alpha = \frac{\mp E - 3}{2}$$

Donc les comportements asymptotiques possibles sont

$$\psi_I(r \to \infty) \sim r^{-\frac{E+3}{2}} e^{r^2/2} \left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right)$$

$$\psi_{II}(r \to \infty) \sim r^{\frac{E-3}{2}} e^{-r^2/2} \left(1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right)$$

Partie VI

1) $\hat{L}_- g_\ell^m$ est un vecteur propre de $\hat{L}^2$ avec la valeur propre associée $\ell(\ell+1)$, car $[\hat{L}^2, \hat{L}_-] = 0$. Aussi, $\hat{L}_- g_\ell^m$ est un vecteur propre de L_z avec la valeur propre $m-1$. Effectivement :

$$\hat{L}_z \hat{L}_- g_\ell^m = ([\hat{L}_z, \hat{L}_-] + L_- L_z) g_\ell^m = (-\hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_z) g_\ell^m =$$

$$= (m-1) L_- g_\ell^m.$$

Par conséquent $\hat{L}_- g_\ell^m = \alpha\, g_\ell^{m-1}$.

Pour déterminer α, agissons par $\hat{L}_+$ sur cette égalité :

$$\alpha \hat{L}_+ g_\ell^{m-1} = \alpha g_\ell^m =$$

$$= \hat{L}_+ \hat{L}_- g_\ell^m = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z) g_\ell^m =$$

$$= (\ell(\ell+1) - m^2 + m) g_\ell^m = (\ell+m)(\ell+1-m) g_\ell^m$$

et donc $\alpha = (\ell+m)(\ell+1-m)$

$$\Downarrow$$

$$\hat{L}_- g_\ell^m = (\ell+m)(\ell+1-m) g_\ell^{m-1}$$

D'autre part :

$$\begin{cases} \hat{L}_- = e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i \operatorname{ctg}\theta \, \partial_\varphi) \\ g_\ell^m = 2^\ell \ell! \, (-1)^m P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \end{cases}$$

$$\hat{L}_- g_\ell^m = 2^\ell \ell! \, (-1)^m e^{-i\varphi}(-\partial_\theta + i \operatorname{ctg}\theta \, \partial_\varphi) P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi} =$$

$$= 2^\ell \ell! \, (-1)^m e^{i(m-1)\varphi} (-\partial_\theta - m \operatorname{ctg}\theta) P_\ell^m(\cos\theta)$$

$$= (\ell+m)(\ell+1-m) \, 2^\ell \ell! \, (-1)^{m-1} P_\ell^{m-1}(\cos\theta) e^{i(m-1)\varphi}$$

en comparant on obtient

$$(*) \qquad (\partial_\theta + m \operatorname{ctg}\theta) P_\ell^m(\cos\theta) = (\ell+m)(\ell+1-m) P_\ell^{m-1}(\cos\theta)$$

Comme $\partial_\theta = -\sin\theta \dfrac{\partial}{\partial(\cos\theta)}$, après la substitution

$$z = \cos\theta, \quad \sqrt{1-z^2} = \sin\theta$$

on peut réécrire $(*)$ comme

$$\left(\frac{d}{dz} - \frac{mz}{1-z^2}\right) P_\ell^m(z) = -\frac{(\ell+m)(\ell+1-m)}{\sqrt{1-z^2}} P_\ell^{m-1}(z)$$

2/ Induction sur m :

- affirmation est vraie pour $m=0$.
- supposons que $P_\ell^{-m}(z) = (-1)^m \dfrac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(z)$

D'après Ex. 1 nous avons

$$-\frac{(\ell-m)(\ell+1+m)}{\sqrt{1-z^2}} P_\ell^{-m-1}(z) = \left(\frac{d}{dz} + \frac{mz}{1-z^2}\right) P_\ell^{-m}(z) =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \text{d'après} \\ \text{l'hypothèse} \end{array} \right| = \left(\frac{d}{dz} + \frac{mz}{1-z^2} \right) (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(z) =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \text{d'après la} \\ \text{formule (5.38)} \\ \text{du cours} \end{array} \right| = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} P_\ell^{m+1}(z)$$

Donc

$$-(\ell-m)(\ell+1+m) P_\ell^{-m-1}(z) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^{m+1}(z)$$

$$\Updownarrow$$

$$P_\ell^{-m-1}(z) = (-1)^{m+1} \frac{(\ell-m-1)!}{(\ell+m+1)!} P_\ell^{m+1}(z)$$

et la démonstration est terminée.

3/ On sait que d'après la définition

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = C_\ell^m P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

$$C_\ell^m = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}$$

Donc :

$$Y_\ell^{-m}(\theta,\varphi) = C_\ell^{-m} P_\ell^{-m}(\cos\theta) e^{-im\varphi} =$$

$$= \underbrace{\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}}}_{= C_\ell^{-m}} \underbrace{(-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(\cos\theta)}_{= P_\ell^{-m}(\cos\theta) \text{ d'après Ex. 2}} e^{-im\varphi} =$$

$$= (-1)^m \underbrace{\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}}_{= C_\ell^m} P_\ell^m(\cos\theta) e^{-im\varphi} = (-1)^m \overline{Y_\ell^m(\theta,\varphi)}$$

CQFD.

4/ $$Y_2^2(\theta,\varphi) = C_2^2 P_2^2(\cos\theta) e^{2i\varphi} =$$

$$= \sqrt{\frac{2\cdot 2+1}{4\pi} \frac{(2-2)!}{(2+2)!}} \cdot \frac{(\sin\theta)^2}{2^2 \cdot 2!} \left[\frac{d^4}{dz^4} (z^2-1)^2 \right]_{z=\cos\theta} e^{2i\varphi} =$$

$$= \sqrt{\frac{5}{96\pi}} \cdot \frac{\sin^2\theta}{\cancel{8}} \cdot \cancel{4} \cdot 3 \cdot \cancel{2} \cdot e^{2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta \, e^{2i\varphi}$$