Méthodes mathématiques pour la physique
Partie III: Fonctions spéciales

(UE 604 P — 10h CM/10h TD/4h TP)

Oleg Lisovyi

Table des matières

1. Algèbre linéaire — rappels

Une matrice $A \in Mat_{n\times n}$ est dite

- symétrique si $A^T = A \iff \forall i,j\ A_{ij} = A_{ji}$,
- hermitienne si $A^\dagger = A \iff \forall i,j\ A_{ij} = \bar{A}_{ji}$ (rappelons que $A^\dagger \overset{def}{=} \overline{(A^T)}$),
- orthogonale si $AA^T = \mathbf{1}$,
- unitaire si $AA^\dagger = \mathbf{1}$.

Exercice 1. Soient $A, B \in Mat_{n\times n}$. Montrer que

(a) $(AB)^T = B^T A^T$,
(b) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$,
(c) $(AB)^{-1} = B^{-1} A^{-1}$.

Exercice 2. Montrer que toute matrice symétrique réelle est hermitienne.

Exercice 3. Définissons sur $\mathbb{C}^n$ le produit scalaire standard:

$$(x, y) = x^\dagger y = \sum_{j=1}^{n} \bar{x}_j y_j \qquad \forall x, y \in \mathbb{C}^n.$$

(Ici, x, y sont vus comme des colonnes $n \times 1$). Montrer qu'une matrice $A \in Mat_{n\times n}$ est hermitienne ssi pour tout $x, y \in \mathbb{C}^n$ on a $(x, Ay) = (Ax, y)$.

Proposition 4. *Matrices orthogonales forment un groupe, noté $O(n)$. C'est-à-dire, nous avons les propriétés suivantes:*

(1) *si $A, B \in O(n)$ alors $AB \in O(n)$,*
(2) *si $A \in O(n)$ alors A est inversible et $A^{-1} \in O(n)$.*

■ Démontrons d'abord (1). Pour $A, B \in O(n)$ on a

$$(AB)^T(AB) = B^T A^T AB = B^T \cdot \mathbf{1} \cdot B = B^T B = \mathbf{1}.$$

Pour montrer (2), notons que si $A \in O(n)$ alors $AA^T = A^T A = \mathbf{1}$ implique

$$\det(AA^T) = \det A \det A^T = (\det A)^2 = 1.$$

Comme $\det A \neq 0$, la matrice A est inversible. De plus

$$\left(A^{-1}\right)^T A^{-1} = (AA^T)^{-1} = \mathbf{1},$$

donc $A^{-1} \in O(n)$. □

Exercice 5. Montrer que les matrices unitaires forment un groupe (celui-ci est noté $U(n)$).

Exercice 6. Montrer que l'ensemble de toutes les matrices symétriques n'est pas un groupe.

Proposition 7. *Soit A une matrice hermitienne. Alors*

(1) *toutes les valeurs propres de A sont réelles,*
(2) *les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres distinctes sont orthogonaux.*

■ Effectivement si λ est une valeur propre de A et x est le vecteur propre correspondant (une colonne), alors

$$x^\dagger Ax = \lambda x^\dagger x.$$

D'autre part, nous avons $A = A^\dagger$ et par conséquent

$$x^\dagger Ax = x^\dagger A^\dagger x = (Ax)^\dagger x = (\lambda x)^\dagger x = \bar{\lambda} x^\dagger x.$$

Comme $x^\dagger x = \sum_{k=1}^n |x_k|^2 \neq 0$, on obtient $\lambda = \bar{\lambda}$.

De façon analogue, si x, y sont 2 vecteurs propres de A et λ, μ sont les valeurs propres associées, alors on a

$$x^\dagger Ay = \mu x^\dagger y,$$

et d'autre part

$$x^\dagger Ay = x^\dagger A^\dagger y = (Ax)^\dagger y = (\lambda x)^\dagger y = \bar{\lambda} x^\dagger y = \lambda x^\dagger y.$$

Ceci implique soit $\lambda = \mu$, soit $x^\dagger y = 0$. □

Une matrice $A \in Mat_{n\times n}$ est dite diagonalisable s'il existe une matrice inversible S et une matrice diagonale A_d telles que $SA_dS^{-1} = A$. Notons que la diagonale principale de A_d est composée des valeurs propres de A.

Exercice 8. Démontrer que la matrice $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ n'est pas diagonalisable.

Théorèmes de diagonalisation:

- une matrice $A \in Mat_{n\times n}$ avec n valeurs propres distinctes est diagonalisable,
- toute matrice symétrique réelle A est diagonalisable par une transformation orthogonale réelle $P \in O(n)$: $A = PA_dP^T$,
- toute matrice hermitienne est diagonalisable par une transformation unitaire $P \in U(n)$: $A = PA_dP^\dagger$.

Exercice 9. Soit A une matrice hermitienne avec les valeurs propres toutes distinctes. Comment peut-on construire une transformation unitaire diagonalisant A à partir des vecteurs propres de A? Qu'est-ce qu'on peut faire s'il y a des valeurs propres multiples?

Exercice 10 (mini-théorème spectral). Soit A une matrice hermitienne $n\times n$ avec les valeurs propres $\{\lambda_j\}$ et les vecteurs propres (colonnes) associés $\{v_j\}$, $j = 1,\dots,n$. Montrer que

$$A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \, v_j^\dagger \otimes v_j.$$

Rappel: si u est une colonne $l\times 1$ et w est une ligne $1\times m$, alors $u\otimes w$ et par définition une matrice $l\times m$ avec $(u\otimes w)_{ij} = u_iw_j$ $(i = 1,\dots,l,\ j = 1,\dots,m)$.

Proposition 11. *Soient $A, B \in Mat_{n\times n}$ deux matrices diagonalisables vérifiant*

$$[A, B] \overset{def}{=} AB - BA = 0.$$

Alors

1. *A et B peuvent être diagonalisées simultanément (c'est-à-dire, par la même transformation),*
2. *on peut choisir l'ensemble des vecteurs propres de A de telle manière qu'ils soient simultanément les vecteurs propres de B.*

■ (1) Nous allons démontrer ce résultat dans le cas où les valeurs propres de A sont distinctes. Soient S une matrice inversible et A_d une matrice diagonale telles que $A = SA_dS^{-1}$. Notons $\tilde{B} = S^{-1}BS \iff B = S\tilde{B}S^{-1}$. Les matrices A_d et $\tilde{B}$ commutent car

$$[A_d, \tilde{B}] = [S^{-1}AS, S^{-1}BS] = S^{-1}[A, B]S = 0.$$

D'autre part, comme $(A_d)_{ij} = \lambda_i\delta_{ij}$, explicitement on a

$$[A_d, \tilde{B}]_{ik} = (A_d\tilde{B} - \tilde{B}A_d)_{ik} = \sum_{j=1}^{n} \Big(\lambda_i\delta_{ij}\tilde{B}_{jk} - \tilde{B}_{ij}\lambda_j\delta_{jk}\Big) = (\lambda_i - \lambda_k)\tilde{B}_{ik}\,.$$

Par conséquent pour tout i et k tels que $i \neq k$ nous avons $\tilde{B}_{ik} = 0$. Mais cela signifie que la matrice $\tilde{B}$ est diagonale.

(2) Soient S une matrice inversible et A_d, B_d deux matrices diagonales telles que $A = SA_dS^{-1}$, $B = SB_dS^{-1}$. Notons

$$A_d = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \vdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \vdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdot & \cdots \\ 0 & 0 & \vdots & \lambda_n \end{pmatrix}, \qquad B_d = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & \vdots & 0 \\ 0 & \mu_2 & \vdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdot & \cdots \\ 0 & 0 & \vdots & \mu_n \end{pmatrix}$$

Ces 2 matrices ont les mêmes vecteurs propres

$$x_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad x_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \ldots, \qquad x_n = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Il est facile de vérifier que les vecteurs $v_j = Sx_j$ ($j = 1, \ldots, n$) sont les vecteurs propres de A et B. On a par exemple:

$$Av_j = SA_dS^{-1}v_j = SA_dS^{-1} \cdot Sx_j = SA_dx_j = \lambda_j\, Sx_j = \lambda_j v_j,$$

et, de façon analogue, $Bv_j = \mu_j v_j$. □

L'application de la même idée (diagonalisation simultanée) à la résolution des équations aux dérivées partielles s'appelle la procédure de *séparation des variables*. Aussi, on l'utilise très souvent (quoique implicitement) en mécanique quantique, où les matrices hermitiennes sont remplacées par des opérateurs symétriques/autoadjoints (grosso modo ça correspond à la limite $n \to \infty$). Un exemple de telles applications sera considéré dans le section suivante.

2. Mécanique quantique, séparation des variables et équation de Bessel

On s'intéresse à l'équation suivante pour une fonction ψ de 2 variables réelles x, y:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \lambda\right)\psi(x,y) = 0. \tag{2.1}$$

Nous allons imposer des conditions au bord sur $\psi(x,y)$ un peu plus tard.

Si l'on note

$$\hat{H} = -\Delta_2 = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right), \quad E = \lambda,$$

l'équation (2.1) peut être vu comme l'équation de Schroedinger stationnaire $\hat{H}\psi = E\psi$ décrivant une particule libre en dimension 2 ($\hat{H}$ est l'hamiltonien de la particule, E est son énergie). Quelques obervations:

- L'opérateur $\hat{H}$ est formellement symétrique par rapport au produit scalaire

$$(\varphi, \psi) = \iint_{\mathbb{R}^2} \overline{\varphi(x,y)}\,\psi(x,y)\,dx\,dy, \tag{2.2}$$

  c'est-à-dire $(\varphi, \hat{H}\psi) = (\hat{H}\varphi, \psi)$ pour tout φ, ψ qui s'annulent quand $x, y \to \pm\infty$. En effet, tous les opérateurs "physiques" (opérateurs de position, d'impulsion, moment angulaire, ...) ont cette propriété.

  Exercice 12. Vérifiez l'affirmation sur $\hat{H}$ en intégrant par parties.

  Vu l'Exercice 3, on peut donc s'attendre à ce que les propriétés de $\hat{H}$ ressemblent celles des matrices hermitiennes (valeurs propres réelles, vecteurs propres associés aux valeurs propres distinctes sont orthogonaux, etc).

- L'opérateur $\hat{H}$ commute avec les opérateurs $\hat{p}_x = -i\partial_x$, $\hat{p}_y = -i\partial_y$, et en plus $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ commutent entre eux. Autrement dit, pour tout $\psi(x, y)$ on a

$$[\hat{H}, \hat{p}_x]\psi(x, y) = 0,$$
$$[\hat{H}, \hat{p}_y]\psi(x, y) = 0,$$
$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y]\psi(x, y) = 0.$$

Par exemple:

$$[\hat{H}, \hat{p}_x]\psi = (\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H})\psi = i(\partial_{xx} + \partial_{yy})\partial_x\psi - i\partial_x(\partial_{xx}\psi + \partial_{yy}\psi) = 0.$$

Par conséquent on peut essayer de diagonaliser $\hat{H}$, $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ simultanément — c'est-à-dire, de trouver leurs fonctions propres communes.

Remarque 13. $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ sont les opérateurs d'impulsion de la particule (projections de l'impulsion sur les axes x, y). Notons que $\hat{H} = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2$. Du point de vue général, le fait que $[\hat{H}, \hat{p}_x] = [\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$ est lié à l'invariance du système par rapport aux translations suivant x et y.

Exercice 14. Les opérateurs de position $\hat{x}$, $\hat{y}$ sont définis par

$$(\hat{x}\psi)(x, y) = x\psi(x, y), \qquad (\hat{y}\psi)(x, y) = y\psi(x, y).$$

Montrer que $[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = i$ et $[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$.

- En ecrivant le laplacien en coordonnées polaires ρ, φ (rappel: $x = \rho\cos\varphi$, $y = \rho\sin\varphi$)

$$\Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2},$$

on peut constater que $\hat{H}$ commute avec l'opérateur $\hat{L}_z = -i\partial_\varphi$. Ceci est lié à l'invariance du système par rapport aux rotations dans le plan xy: en effet, $\hat{L}_z$ est l'opérateur de la projection du moment angulaire sur l'axe z. Nous allons donc essayer de diagonaliser simultanément $\hat{H}$ et $\hat{L}_z$.

Exercice 15. Démontrer que les opérateurs $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ et $\hat{L}_z$ sont symétriques par rapport au produit scalaire (2.2).

2.1. **Diagonalisation simultanée de $\hat{H}$, $\hat{p}_x$ et $\hat{p}_y$.** Soit $\psi(x, y)$ une fonction propre de $\hat{p}_x$. Nous allons noter k_x la valeur propre correspondante. L'équation $\hat{p}_x\psi = k_x\psi$ s'écrit explicitement comme:

$$-i\frac{\partial\psi}{\partial x}(x, y) = k_x\psi(x, y),$$

et a pour solution

$$\psi(x, y) = g(y)e^{ik_x x},$$

où $g(y)$ est une fonction arbitraire. Si ψ vérifie en plus $\hat{p}_y\psi = k_y\psi$, alors

$$-ig'(y) = k_y g(y)$$

ce qui donne $g(y) = Ce^{ik_y y}$. Donc le seul vecteur propre commun $\psi_{k_x,k_y}(x, y)$ de $\hat{p}_x$ et $\hat{p}_y$, associé aux valeurs propres k_x, k_y est:

$$\psi_{k_x,k_y}(x, y) = e^{ik_x x + ik_y y}.$$

Exercice 16. Vérifiez que ψ_{k_x,k_y} est une fonction propre de $\hat{H}$, et que la valeur propre associée est $\lambda = k_x^2 + k_y^2$.

La solution $\psi_{k_x,k_y}(x,y)$ est souvent interprétée comme une onde plane monochromatique. Comme toute combinaison linéaire des solutions d'une équation différentielle linéaire est encore une solution, la solution générale de $\hat{H}\psi = \lambda\psi$ s'écrit sous la forme d'une superposition des ondes planes:

$$\psi(x,y) = \iint dk_x\, dk_y\; c(k_x,k_y)\; \psi_{k_x,k_y}(x,y)\; \delta\left(\lambda - k_x^2 - k_y^2\right),$$

où $c(k_x,k_y)$ est une fonction arbitraire. La fonction δ est nécessaire pour "choisir" parmi les fonctions ψ_{k_x,k_y} celles qui correspondent à la même valeur propre λ de $\hat{H}$.

Notons aussi que les fonctions $\psi_{k_x,k_y}(x,y)$ sont orthogonales par rapport au produit scalaire (2.2), comme on aurait pu attendre:

$$\begin{aligned}
(\psi_{k'_x,k'_y}, \psi_{k_x,k_y}) &= \iint_{\mathbb{R}^2} \overline{\psi_{k'_x,k'_y}(x,y)}\, \psi_{k_x,k_y}(x,y)\; dx\, dy = \\
&= \iint_{\mathbb{R}^2} e^{i(k_x-k'_x)x + i(k_y-k'_y)y}\; dx\, dy = \\
&= 4\pi^2\, \delta(k_x - k'_x)\, \delta(k_y - k'_y).
\end{aligned}$$

2.2. **Diagonalisation simultanée de $\hat{H}$ et $\hat{L}_z$.** Ici il est très commode de passer en coordonnées polaires et poser $\lambda = k^2$. Supposons que $\psi(\rho,\varphi)$ est une fonction propre de $\hat{L}_z$, avec la valeur propre associée égale à ν. Alors on a $-i\partial_\varphi \psi(\rho,\varphi) = \nu\psi(\rho,\varphi)$, et donc

$$\psi(\rho,\varphi) = g_\nu(\rho)\, e^{i\nu\varphi}, \tag{2.3}$$

où g_ν est une fonction arbitraire de ρ. Comme φ est l'angle polaire, la fonction ψ doit être périodique en φ:

$$\psi(\rho,\varphi + 2\pi) = \psi(\rho,\varphi),$$

mais ceci implique $e^{2i\nu\pi} = 1$, et par conséquent <u>ν est un nombre entier</u> ($\nu \in \mathbb{Z}$). En substituant par la suite (2.3) dans l'équation $\hat{H}\psi = k^2\psi$, on obtient une équation différentielle <u>ordinaire</u>:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \left(k^2 - \frac{\nu^2}{\rho^2}\right)\right] g_\nu(\rho) = 0.$$

Exercice 17. Introduisons à la place de ρ une nouvelle variable $r = k\rho$ et définissons $h_\nu(r) = g_\nu(r/k) \Longleftrightarrow g_\nu(\rho) = h_\nu(k\rho)$. Montrer que cette nouvelle fonction $h_\nu(r)$ vérifie l'équation

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + \left(1 - \frac{\nu^2}{r^2}\right)\right] h_\nu(r) = 0. \tag{2.4}$$

L'équation (2.4) s'appelle *l'équation de Bessel*. Comme toute équation différentielle de 2ème ordre, elle a deux solutions indépendantes $h_{\nu,1}(r)$, $h_{\nu,2}(r)$. Il y a plusieurs façons de choisir ces deux solutions, car toute combinaison linéaire $\alpha h_{\nu,1} + \beta h_{\nu,2}$ est encore une solution. Un certain choix canonique que nous allons considérer dans la section suivante donne ce qu'on appelle les *fonctions de Bessel d'ordre ν de 1ère et 2ème espèce*. C'est le premier exemple des fonctions spéciales que nous allons étudier.

Les fonctions $\psi_\nu(\rho,\varphi) = h_\nu\big(k\rho\big)e^{i\nu\varphi}$, $\nu \in \mathbb{Z}$ sont appelées les *ondes cylindriques*. De façon analogue à la précédente:

- La solution générale de $\hat{H}\psi = k^2\psi$ s'écrit sous la forme d'une superposition de ces ondes:

$$\psi(\rho,\varphi) = \sum_{\nu\in\mathbb{Z}} \big(\alpha_\nu h_{\nu,1}(k\rho) + \beta_\nu h_{\nu,2}(k\rho)\big)\, e^{i\nu\varphi}. \tag{2.5}$$

- Soient h_ν une solution quelconque de l'équation de Bessel (2.4) avec $\nu \in \mathbb{Z}$ et $\tilde{h}_{\nu'}$ une solution quelconque de la même équation avec ν remplacé par $\nu' \in \mathbb{Z}$. Si $\nu \neq \nu'$, les fonctions $\psi_\nu(\rho,\varphi) = h_\nu(k\rho)e^{i\nu\varphi}$ et $\psi_{\nu'}(\rho,\varphi) = \tilde{h}_{\nu'}(k\rho)e^{i\nu'\varphi}$ sont associées aux valeurs propres différentes de $\hat{L}_z$ et par conséquent sont orthogonales:

$$\begin{aligned} (\psi_{\nu'},\psi_\nu) &= \int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi\; \rho\, \overline{\tilde{h}_{\nu'}(k\rho)}\, h_\nu(k\rho)\; e^{i(\nu-\nu')\varphi} \\ &= 2\pi\;\delta_{\nu\nu'} \int_0^\infty \rho\, \overline{\tilde{h}_{\nu'}(k\rho)}\, h_\nu(k\rho)\; d\rho. \end{aligned}$$

Remarque 18. Les fonctions $\psi_\nu(\rho,\varphi) = h_\nu(k\rho)e^{i\nu\varphi}$ et $\tilde{\psi}_\nu(\rho,\varphi) = \tilde{h}_\nu(k'\rho)e^{i\nu\varphi}$ sont associées à la même valeur propre ν de $\hat{L}_z$, mais aux valeurs propres différentes k^2 et k'^2 de $\hat{H}$. Alors ces fonctions sont orthogonales et on peut s'attendre à ce que

$$\int_0^\infty \rho\, \overline{\tilde{h}_\nu(k'\rho)}\, h_\nu(k\rho)\; d\rho \;\sim\; \delta\left(k^2 - k'^2\right). \tag{2.6}$$

L'onde plane $\psi_{k,0} = e^{ikx} = e^{ik\rho\cos\varphi}$, comme toute autre solution de $\hat{H}\psi = k^2\psi$, peut être décomposée en ondes cylindriques:

$$e^{ik\rho\cos\varphi} = \sum_{\nu'\in\mathbb{Z}} h_{\nu'}(k\rho)e^{i\nu'\varphi}.$$

En multipliant cette équation par $e^{-i\nu\varphi}$ avec $\nu \in \mathbb{Z}$ et en intégrant ensuite par rapport à φ entre 0 et 2π, on obtient

$$h_\nu(r) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{ir\cos\varphi - i\nu\varphi} d\varphi. \tag{2.7}$$

On sait que par construction $h_\nu(r)$ vérifie l'équation de Bessel (2.4), alors l'intégrale à droite de (2.7) la vérifie également.

Exercice 19. Montrer que l'intégrale (2.7) vérifie l'équation de Bessel en la substituant directement dans (2.4).

2.3. **Un peu plus d'algèbre.**

Exercice 20. Montrer qu'on peut écrire l'opérateur $\hat{L}_z = -i\partial_\varphi$ défini précédemment sous la forme $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$. Comparer avec l'expression classique de la projection du moment angulaire d'une particule sur l'axe z.

Exercice 21. Montrer que les opérateurs $\hat{L}_z$, $\hat{p}_x$ et $\hat{p}_y$ vérifient les relations de commutation:

$$[\hat{L}_z,\hat{p}_x] = i\hat{p}_y, \qquad [\hat{L}_z,\hat{p}_y] = -i\hat{p}_x, \tag{2.8}$$

■ Pour la démonstration, il suffit d'utiliser l'expression $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ trouvée dans l'exercice précédent et les relations de commutation de l'Exercice 14. Par exemple:

$$\begin{aligned}[\hat{L}_z, \hat{p}_x] &= (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\hat{p}_x - \hat{p}_x(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \\ &= \left|\text{puisque } [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0\right| = \hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_y = \\ &= \left|\text{puisque } [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0\right| = [\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_y = i\hat{p}_y.\end{aligned}$$

Deuxième relation s'obtient par le même raisonnement. □

Introduisons à la place des opérateurs $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ leurs combinaisons linéaires

$$\hat{p}_+ = \hat{p}_x + i\hat{p}_y, \qquad \hat{p}_- = \hat{p}_x - i\hat{p}_y.$$

Exercice 22. Montrer que $\hat{p}_\pm$ vérifient les relations de commutation

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_+] = \hat{p}_+\,, \qquad [\hat{L}_z, \hat{p}_-] = -\hat{p}_-\,. \tag{2.9}$$

Les expressions (2.9) se révèlent extrêmement utiles. Supposons par exemple qu'une fonction ψ est une fonction propre commune de $\hat{H}$ et $\hat{L}_z$, avec les valeurs propres associées $\lambda = k^2$ et ν. Alors la fonction $\psi_+ = \hat{p}_+\psi$ est aussi une fonction propre commune, avec la même valeur propre de $\hat{H}$, et la valeur propre de $\hat{L}_z$ égale à $\nu + 1$. Effectivement, comme $[\hat{H}, \hat{p}_+] = [\hat{H}, \hat{p}_x] + i[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$, on a

$$\hat{H}\psi_+ = \hat{H}\hat{p}_+\psi = \hat{p}_+\hat{H}\psi = \lambda\hat{p}_+\psi = \lambda\psi_+.$$

De façon analogue, en utilisant la première des relations (2.9), on en déduit:

$$\hat{L}\psi_+ = \hat{L}\hat{p}_+\psi = (\hat{p}_+\hat{L} + \hat{p}_+)\psi = (\nu + 1)\hat{p}_+\psi = (\nu + 1)\psi_+.$$

D'autre part on a nécéssairement $\psi(\rho, \varphi) = h_\nu(k\rho)e^{i\nu\varphi}$ et $\psi_+(\rho, \varphi) = \tilde{h}_{\nu+1}(k\rho)e^{i(\nu+1)\varphi}$, où h_ν est une solution de l'équation de Bessel (2.4) et $\tilde{h}_{\nu+1}$ est une solution de la même équation avec ν remplacée par $\nu + 1$.

Exercice 23. Montrer que

$$\hat{p}_\pm = \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y = e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\rho} \pm \frac{i}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Proposition 24. *Soit $h_\nu(r)$ une solution de l'équation de Bessel (2.4). Alors la fonction*

$$g_{\nu+1}(r) = \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right)h_\nu(r) \tag{2.10}$$

vérifie la même équation avec ν remplacée par $\nu + 1$.

■ Considérons la fonction $\psi(\rho, \varphi) = h_\nu(k\rho)e^{i\nu\varphi}$. En appliquant $\hat{p}_+$ à cette fonction on trouve

$$\psi_+(\rho, \varphi) = \hat{p}_+\psi(\rho, \varphi) = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{i}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)h_\nu(k\rho)e^{i\nu\varphi} = e^{i(\nu+1)\varphi}\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{\nu}{\rho}\right)h_\nu(k\rho),$$

d'où le résultat. □

Exercice 25. Soit $h_\nu(r)$ une solution de l'équation de Bessel (2.4). Montrer que la fonction

$$g_{\nu-1}(r) = \left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r}\right)h_\nu(r) \tag{2.11}$$

vérifie la même équation avec ν remplacée par $\nu - 1$.

2.4. **Résumé.**

(1) Equation de Bessel (2.4) apparaît lorsqu'on sépare les variables ρ et φ dans l'équation $(\hat{H}-\lambda)\psi = 0$ avec $\hat{H} = -\Delta_2$, qui s'interprète comme équation de Schroedinger stationnaire pour une particule libre en dimension 2.

(2) Solutions de l'équation de Bessel doivent vérifier des relations d'orthogonalité de la forme (2.6) qui découlent de la symétrie de $\hat{H}$.

(3) Solutions de l'équation de Bessel admettent des représentations intégrales de type (2.7) qui correspondent, en langage physique, à la décomposition des ondes cylindriques en ondes planes.

(4) Différentes possibilités de séparation des variables (x et y, ρ et φ) dans l'équation $(\hat{H} - \lambda)\psi = 0$ sont liées à l'existence des opérateurs $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{L}_z$ qui commutent avec $\hat{H}$. De tels opérateurs expriment les invariances du système considéré (ici translations et rotations du plan).

(5) Relations de commutation entre $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ et $\hat{L}_z$ permettent d'obtenir, par une méthode purement algébrique, certaines relations de récurrence satisfaites par les solutions de l'équation de Bessel. A partir d'une solution de (2.4) on peut construire un nombre infini de solutions de la même équation avec ν remplacé par $\nu \pm 1$, $\nu \pm 2$, $\nu \pm 3$, ...

3. Fonctions de Bessel et leurs propriétés

3.1. **Motivation et définition.** Nous allons maintenant étudier l'équation de Bessel

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + \left(1 - \frac{\nu^2}{r^2}\right)\right] h(r) = 0 \tag{3.1}$$

de façon plus systématique. On suppose ici que ν est un paramètre réel quelconque (dans l'équation de Bessel considérée précédemment $\nu \in \mathbb{Z}$) et $r \in \mathbb{R}^+$.

Faisons une hypothèse sur le comportement de la fonction $h(r)$ quand $r \to 0$:

$$\begin{aligned} h(r \to 0) &= r^\alpha + o\left(r^\alpha\right), \\ h'(r \to 0) &= \alpha r^{\alpha-1} + o\left(r^{\alpha-1}\right), \\ h''(r \to 0) &= \alpha(\alpha-1) r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right). \end{aligned}$$

En substituant dans l'équation (3.1), on trouve

$$\underbrace{\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right)}_{h''(r)} + \underbrace{\alpha r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right)}_{h'(r)/r} - \underbrace{\nu^2 r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right)}_{(1-\nu^2/r^2)h(r)} = 0$$

d'où $(\alpha^2 - \nu^2)r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right) = 0$ et donc les valeurs possibles de α sont $\alpha = \pm\nu$. Posons maintenant $\alpha = \nu$, $\nu > 0$ et essayons de trouver une solution de l'équation de Bessel sous la forme d'une série

$$h(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^{\nu+j}.$$

Substituons cette série dans l'équation (3.1). Ca donne

$$\underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} b_j(\nu+j)(\nu+j-1)r^{\nu+j-2}}_{h''(r)} + \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} b_j(\nu+j)r^{\nu+j-2}}_{h'(r)/r} + \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} b_j r^{\nu+j}}_{h(r)} - \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} b_j \nu^2 r^{\nu+j-2}}_{\nu^2 h(r)/r^2} = 0,$$

ce qui peut être réécrit, en calculant le coefficient de chaque puissance $r^{\nu+j}$, sous la forme

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left[b_{j-2}+b_j\left((\nu+j)^2-\nu^2\right)\right]r^{\nu+j-2}=0.$$

Par conséquent on obtient une relation de récurrence pour les coefficients b_j:

$$b_j=(-1)\,\frac{b_{j-2}}{j(2\nu+j)}\,. \tag{3.2}$$

Exercice 26. Montrer que cette relation implique $b_{2k+1}=0$ pour $k=0,1,\ldots\infty$. Pour ceci, on pourra considérer (3.2) avec $j=1,3,5\ldots$ et utiliser le fait que $b_{-1}=0$.

En posant par la suite $b_{2k}=a_k$, $k=0,1,\ldots\infty$, on réécrit la relation (3.2) comme

$$a_k=\frac{(-1)}{2^2}\,\frac{a_{k-1}}{k(\nu+k)},\qquad k=1,2,\ldots,\infty. \tag{3.3}$$

Exercice 27. Montrer (e.g. par induction) que la solution de (3.3) a la forme suivante:

$$a_k=a_0\,\frac{(-1)^k}{2^{2k}}\,\frac{\Gamma(\nu+1)}{k!\,\Gamma(\nu+k+1)}\,, \tag{3.4}$$

où $\Gamma(z)$ note la fonction gamma d'Euler (en particulier, elle vérifie $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$).

La valeur de a_0 n'est pas fixe, ce qui est tout à fait naturel: si $h(r)$ vérifie (3.1), alors $c\cdot h(r)$ la vérifie également pour tout $c\in\mathbb{C}$. Si on pose $a_0=2^{-\nu}/\Gamma(\nu+1)$, la formule (3.4) se simplifie:

$$a_k=\frac{(-1)^k\,2^{-\nu-2k}}{k!\,\Gamma(\nu+k+1)}\,,\qquad k=0,1,\ldots,\infty. \tag{3.5}$$

La solution de l'équation de Bessel qui correspond à ce choix des coefficients a un nom: c'est la *fonction de Bessel d'ordre ν de 1ère espèce*:

$$J_\nu(r)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(r/2)^{2k+\nu}}{k!\,\Gamma(\nu+k+1)}\,. \tag{3.6}$$

Quelques propriétés de $J_\nu(r)$:

- La série (3.6) est définie et converge pour tout $\nu\in\mathbb{C}$. Rappelons que les points $z=-1,-2,\ldots$ sont des pôles simples de $\Gamma(z)$, ce qui signifie que pour $\nu=-k$, $k\in\mathbb{N}$ les k premiers termes dans le développement (3.6) sont nuls.
- Comportement asymptotique quand $r\to 0$: si $\nu\in\mathbb{R}\backslash\{-1,-2,\ldots\}$, alors

$$J_\nu(r\to 0)=\frac{2^{-\nu}}{\Gamma(\nu+1)}\cdot r^\nu+O\left(r^{\nu+1}\right).$$

De même, si $\nu=-k$, $k\in\mathbb{N}$, alors

$$J_{-k}(r\to 0)=\frac{2^{-k}}{\Gamma(k+1)}\cdot r^k+O\left(r^{k+1}\right).$$

Exercice 28. Montrer que pour $\nu\in\mathbb{Z}$ nous avons $J_\nu(r)=(-1)^\nu J_{-\nu}(r)$.

3.2. **Solutions canoniques.** Comme l'équation de Bessel est invariante par rapport au changement $\nu \leftrightarrow -\nu$ et est vérifiée par $J_\nu(r)$, la fonction $J_{-\nu}(r)$ vérifie (3.1) également. Comportement de $J_{\pm\nu}(r)$ quand $r \to 0$ montre que *pour $\nu \notin \mathbb{Z}$ ces deux solutions sont linéairement indépendantes* et donc engendrent toutes les solutions (par contre pour $\nu \in \mathbb{Z}$ il y a une relation linéaire entre $J_{\pm\nu}(r)$, voir Exercice 28).

Une autre façon d'obtenir le même résultat est de calculer le wronskien $W(J_\nu, J_{-\nu})$. Rappelons que le wronskien de deux solutions y_1, y_2 de l'équation $y'' + py' + qy = 0$ est défini comme

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_1' y_2.$$

Exercice 29. Montrer que $W(y_1, y_2)$ vérifie l'équation $(\ln W)' = -p$.

Exercice 30. Montrer que y_1 et y_2 ne sont pas indépendantes si et seulement si leur wronskien $W(y_1, y_2)$ est nul.

Dans le cas de l'équation de Bessel $p = 1/r$ et donc

$$W(J_\nu(r), J_{-\nu}(r)) = \frac{C}{r},$$

où la constante C peut être déterminée à partir du comportement de $J_{\pm\nu}(r)$ quand $r \to 0$. En supposant $\nu \notin \mathbb{Z}$, on obtient

$$\begin{aligned} W(J_\nu, J_{-\nu})\Big|_{r\to 0} &= \underbrace{\left(\frac{2^{-\nu}}{\Gamma(\nu+1)} \cdot r^\nu + O\left(r^{\nu+1}\right)\right)}_{J_\nu(r)} \underbrace{\left(\frac{2^{\nu}}{\Gamma(-\nu)} \cdot r^{-\nu-1} + O\left(r^{-\nu}\right)\right)}_{J'_{-\nu}(r)} \\ &\quad - \underbrace{\left(\frac{2^{-\nu}}{\Gamma(\nu)} \cdot r^{\nu-1} + O\left(r^{\nu}\right)\right)}_{J'_\nu(r)} \underbrace{\left(\frac{2^{\nu}}{\Gamma(-\nu+1)} \cdot r^{-\nu} + O\left(r^{-\nu+1}\right)\right)}_{J_{-\nu}(r)} = \\ &= \left(\frac{1}{\Gamma(\nu+1)\Gamma(-\nu)} - \frac{1}{\Gamma(\nu)\Gamma(-\nu+1)}\right)\frac{1}{r} + O(1) = \\ &= -\frac{2\sin\pi\nu}{\pi r} + O(1), \end{aligned}$$

et donc $C = -\dfrac{2\sin\pi\nu}{\pi}$ (pour passer de la troisième à la quatrième ligne, on a utilisé la relation $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \dfrac{\pi}{\sin\pi z}$). On voit alors que $W(J_\nu, J_{-\nu}) = 0$ si et seulement si $\nu \in \mathbb{Z}$.

La *fonction de Bessel d'ordre ν de 2ème espèce $Y_\nu(r)$*, dite aussi la *fonction de Neumann*, est définie pour $\nu \notin \mathbb{Z}$ comme une combinaison linéaire de $J_{\pm\nu}(r)$:

$$Y_\nu(r) = \frac{J_\nu(r)\cos\pi\nu - J_{-\nu}(r)}{\sin\pi\nu}, \tag{3.7}$$

et pour $\nu \in \mathbb{Z}$ comme la limite de cette expression. Notons que

$$W(J_\nu(r), Y_\nu(r)) = -\frac{W(J_\nu(r), J_{-\nu}(r))}{\sin\pi\nu} = \frac{2}{\pi r},$$

et par conséquent $J_\nu(r)$ et $Y_\nu(r)$ représentent deux solutions de (3.1) qui sont linéairement indépendantes pour tout ν (non seulement pour $\nu \notin \mathbb{Z}$, comme c'était dans le cas de $J_{\pm\nu}(r)$).

3.3. **Relations de récurrence.** Nous avons vu précédemment qu'à partir d'une solution donnée $h(r)$ de l'équation de Bessel on peut construire — à l'aide des formules (2.10), (2.11) — de nouvelles solutions correspondant à d'autres valeurs de ν. Quels sont les résultats de cette procédure si $h(r) = J_\nu(r)$?

Exercice 31. Montrer que la fonction de Bessel $J_\nu(r)$, définie par (3.6), vérifie les relations de récurrence:

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r}\right) J_\nu(r) = -J_{\nu+1}(r), \tag{3.8}$$

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r}\right) J_\nu(r) = J_{\nu-1}(r). \tag{3.9}$$

Remarque 32. En considérant la différence de (3.8) et (3.9), on obtient une relation de récurrence à trois termes:

$$J_{\nu+1}(r) + J_{\nu-1}(r) = \frac{2\nu}{r}\, J_\nu(r).$$

Nous avons construit une solution de l'équation de Bessel avec $\nu \in \mathbb{Z}$ sous la forme d'une intégrale (2.7). Comment s'exprime-t-elle en fonction de $J_\nu(r)$, $Y_\nu(r)$?

Exercice 33. Montrer que pour $\nu \in \mathbb{Z}$ nous avons

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{ir\cos\varphi - i\nu\varphi} d\varphi = i^\nu J_\nu(r). \tag{3.10}$$

Indication: Pour calculer l'intégrale, on pourra par exemple développer $e^{ir\cos\varphi}$ en série de Taylor en r et par la suite développer $\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right)^k$ en utilisant la formule du binôme de Newton.

3.4. **Analyse asymptotique quand $r \to +\infty$.** D'abord on peut essayer la même astuce que pour $r \to 0$. Supposons que

$$\begin{aligned}
h(r \to \infty) &= r^\alpha + o\left(r^\alpha\right), \\
h'(r \to \infty) &= \alpha r^{\alpha-1} + o\left(r^{\alpha-1}\right), \\
h''(r \to \infty) &= \alpha(\alpha-1) r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right).
\end{aligned}$$

En substituant dans l'équation (3.1), on trouve

$$\underbrace{\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right)}_{h''(r)} + \underbrace{\alpha r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right)}_{h'(r)/r} + \underbrace{r^\alpha + o\left(r^\alpha\right)}_{h(r)} - \underbrace{\nu^2 r^{\alpha-2} + o\left(r^{\alpha-2}\right)}_{\nu^2 h(r)/r^2} = 0.$$

Le coefficient de r^α est égal à 1, alors cette relation ne peut pas être satisfaite — et donc on trouve une contradiction signifiant que notre hypothèse sur le comportement de $h(r)$ n'était pas bonne. Dans de tels cas, on cherche $h(r)$ sous la forme

$$h(r \to \infty) = r^\alpha e^{P(r)} \left(1 + \frac{c_1}{r} + \frac{c_2}{r^2} + \dots\right),$$

où $P(r)$ est un polynôme. Le plus pratique est d'introduire la notation $h(r) = e^{f(r)}$ et de réécrire l'équation pour $h(r)$ comme une équation différentielle (en général nonlinéaire) pour $f(r)$. Le développement de $f(r)$ a la forme suivante:

$$f(r \to \infty) = P(r) + \alpha \ln r + \frac{a_1}{r} + \frac{a_2}{r^2} + \dots, \tag{3.11}$$

où $a_1 = c_1$, $a_2 = c_2 - c_1^2/2$, etc.

Exercice 34. Montrer que dans le cas de l'équation de Bessel $f(r)$ vérifie

$$f''(r) + \left(f'(r)\right)^2 + \frac{f'(r)}{r} + 1 - \frac{\nu^2}{r^2} = 0.$$

Supposons que dans notre cas $\deg P = d$, c'est-à-dire,

$$\begin{aligned} f(r \to \infty) &= Ar^d + o\left(r^d\right), \\ f'(r \to \infty) &= Adr^{d-1} + o\left(r^{d-1}\right), \\ f''(r \to \infty) &= Ad(d-1)r^{d-2} + o\left(r^{d-2}\right). \end{aligned}$$

En substituant ces développements dans l'équation pour $f(r)$, on obtient

$$\underbrace{Ad(d-1)r^{d-2} + o\left(r^{d-2}\right)}_{f''(r)} + \underbrace{A^2d^2r^{2d-2} + o\left(r^{2d-2}\right)}_{(f'(r))^2} + \underbrace{Ad\,r^{d-2} + o\left(r^{d-2}\right)}_{f'(r)/r} + 1 - \frac{\nu^2}{r^2} = 0.$$

La plus grande puissance de r est $2d - 2$, avec le coefficient A^2d^2. Pour que l'équation puisse être vérifiée, on doit avoir $d = 1$, $A^2 = -1$, puisque le seul terme qui peut annuler $A^2d^2r^{2d-2}$ est donné par 1. Maintenant on peut écrire

$$\begin{aligned} f(r \to \infty) &= \pm ir + \alpha \ln r + O\left(r^{-1}\right), \\ f'(r \to \infty) &= \pm i + \frac{\alpha}{r} + O\left(r^{-2}\right), \\ f''(r \to \infty) &= -\frac{\alpha}{r^2} + O\left(r^{-3}\right), \end{aligned}$$

et répéter la même procédure pour déterminer le paramètre inconnu α. Notamment, en substituant ces développements dans l'équation pour $f(r)$, on trouve

$$\underbrace{-\frac{\alpha}{r^2} + O\left(r^{-3}\right)}_{f''(r)} \underbrace{-\cancel{1} \pm \frac{2i\alpha}{r} + O\left(r^{-2}\right)}_{(f'(r))^2} \underbrace{\pm \frac{i}{r} + O\left(r^{-2}\right)}_{f'(r)/r} + \cancel{1} - \frac{\nu^2}{r^2} = 0.$$

En égalant à zéro le coefficient de r^{-1}, nous obtenons $\alpha = -\frac{1}{2}$. Alors on peut conjecturer qu'il existe deux solutions $h_\pm(r)$ de l'équation de Bessel avec le comportement

$$h_{\nu,+}(r) = \frac{e^{ir}}{\sqrt{r}}\left(1 + O\left(r^{-1}\right)\right), \qquad h_{\nu,-}(r) = \frac{e^{-ir}}{\sqrt{r}}\left(1 + O\left(r^{-1}\right)\right).$$

En langage de l'équation de Schroedinger (2.1), $h_{\nu,+}(r)$ et $h_{\nu,-}(r)$ correspondent aux ondes cylindriques divergentes (resp. convergentes) de moment angulaire ν.

Les fonctions de Bessel $J_\nu(r)$ et $Y_\nu(r)$ sont nécessairement données par des combinaisons linéaires de $h_{\nu,+}(r)$ et $h_{\nu,-}(r)$. Ecrivons par exemple

$$J_\nu(r) = a\,h_{\nu,+}(r) + b\,h_{\nu,-}(r).$$

Remarque 35. En effet, pour une équation différentielle ordinaire quelconque, il est relativement simple d'étudier — de façon analogue à la précédente — les comportements possibles de solutions en tout point "intéressant" (ici $r = 0$ et ∞). Le problème difficile et impossible à résoudre en général est de relier les comportements en deux points différents (ici trouver a et b). Il est appelé le *problème de connexion*.

On arrive à résoudre le problème de connexion pour l'équation de Bessel grâce à l'existence des représentations intégrales de type (3.10) (pour $\nu \notin \mathbb{Z}$ leur forme est un peu plus compliquée). En analysant l'asymptotique des intégrales quand $r \to \infty$ il est possible de montrer que

$$a = \frac{e^{-i\pi\nu/2 - i\pi/4}}{\sqrt{2\pi}}, \qquad b = \frac{e^{i\pi\nu/2 + i\pi/4}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Exercice 36 (difficile). Démontrer ces formules dans le cas $\nu \in \mathbb{Z}$ à l'aide de (3.10).

4. Oscillateur harmonique

Dans ce chapitre, on étudie l'équation différentielle ordinaire suivante:

$$\hat{H}\psi = \lambda\psi, \qquad \hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2,$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$ est un paramètre constant. En mécanique quantique, l'opérateur $\hat{H} = \hat{p}_x^2 + \hat{x}^2$ représente l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique. Il nous sera commode d'introduire la notation $\lambda = 2\varepsilon + 1$ et de réécrire l'équation comme

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2 + 1 + 2\varepsilon\right)\psi(x) = 0. \tag{4.1}$$

Exercice 37. Montrer que $\hat{H}$ est formellement symétrique par rapport au produit scalaire

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)}\, \psi(x)\, dx. \tag{4.2}$$

4.1. **Analyse asymptotique.**

Considérons d'abord le comportement asymptotique des solutions de (4.1) lorsque $x \to \pm\infty$. De façon analogue à la précédente, introduisons la notation $\psi(x) = e^{f(x)}$ et supposons que

$$f(x \to +\infty) = P(x) + \alpha \ln x + \frac{a_1}{x} + \frac{a_2}{x^2} + \dots, \tag{4.3}$$

où $P(x)$ est un polynôme de degré d: $P(x) = Ax^d + O\left(x^{d-1}\right)$. L'équation pour $f(x)$ qu'on obtient à partir de (4.1) s'écrit sous la forme

$$f''(x) + \left(f'(x)\right)^2 - x^2 + 1 + 2\varepsilon = 0.$$

En substituant dans cette équation le développement de $f(x)$,

$$\begin{aligned}
f(x \to +\infty) &= Ax^d + o\left(x^d\right), \\
f'(x \to +\infty) &= Ad\, x^{d-1} + O\left(x^{d-2}\right), \\
f''(x \to +\infty) &= Ad(d-1)x^{d-2} + O\left(x^{d-3}\right),
\end{aligned}$$

on trouve

$$\underbrace{Ad(d-1)x^{d-2} + O\left(x^{d-3}\right)}_{f''(x)} + \underbrace{A^2 d^2 x^{2d-2} + O\left(x^{2d-3}\right)}_{(f'(x))^2} - x^2 + 1 + 2\varepsilon = 0.$$

Si $d = 1$, la plus grande puissance de x est égale à 2, mais dans ce cas le coefficient de x^2 est égal à -1, et on ne peut pas l'annuler (contradiction). D'autre part si $d \geq 2$, la plus grande puissance de x est égale à $2d - 2$, avec le coefficient $A^2 d^2$. Le seul terme qui peut annuler $A^2d^2x^{2d-2}$ est $-x^2$, d'où $d=2$, $A=\pm\dfrac{1}{2}$. On peut donc écrire le développement de $f(x)$ plus explicitement:

$$\begin{aligned}
f(x\to+\infty) &= \pm\,\frac{x^2}{2}+Bx+\alpha\ln x+O\left(x^{-1}\right),\\
f'(x\to+\infty) &= \pm\,x+B+\frac{\alpha}{x}+O\left(x^{-2}\right),\\
f''(x\to+\infty) &= \pm\,1+O\left(x^{-2}\right),
\end{aligned}$$

et répéter la même procédure. L'équation pour $f(x)$ implique

$$\underbrace{\pm1+O\left(x^{-2}\right)}_{f''(x)}+\underbrace{\cancel{x^2}\pm2Bx+B^2\pm2\alpha+O\left(x^{-1}\right)}_{(f'(x))^2}-\cancel{x^2}+1+2\varepsilon=0.$$

En égalant à zéro les coefficients de x et 1, on obtient $B=0$ et

$$\pm(1+2\alpha)+1+2\varepsilon=0\implies\alpha=\mp\left(\varepsilon+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2}.$$

On peut donc supposer qu'il existe deux solutions $\psi_{I,II}(x)$ de l'équation (4.1) avec l'asymptotique

$$\begin{aligned}
\psi_I(x\to+\infty) &= \frac{e^{x^2/2}}{x^{\varepsilon+1}}\Big(1+O\left(x^{-1}\right)\Big),\\
\psi_{II}(x\to+\infty) &= x^{\varepsilon}e^{-x^2/2}\Big(1+O\left(x^{-1}\right)\Big).
\end{aligned}$$

Le même raisonnement pour $x\to-\infty$ montre qu'il existe deux solutions $\psi_{III,IV}(x)$ avec le comportement

$$\begin{aligned}
\psi_{III}(x\to-\infty) &= \frac{e^{x^2/2}}{(-x)^{\varepsilon+1}}\Big(1+O\left(x^{-1}\right)\Big),\\
\psi_{IV}(x\to-\infty) &= (-x)^{\varepsilon}e^{-x^2/2}\Big(1+O\left(x^{-1}\right)\Big).
\end{aligned}$$

En mécanique quantique, on s'intéresse aux solutions qui décroissent lorsque $x\to\pm\infty$. Ceci signifie que $\psi(x)$ doit être proportionnelle à $\psi_{II}(x)$ et à $\psi_{IV}(x)$ simultanément. Par contre ce n'est presque jamais possible car $\psi_{II}(x)$ est une combinaison linéaire de $\psi_{III}(x)$ et $\psi_{IV}(x)$:

$$\psi_{II}(x)=a(\varepsilon)\psi_{III}(x)+b(\varepsilon)\psi_{IV}(x),$$

avec $a(\varepsilon)$ différent de 0 en général.

L'ensemble des valeurs de λ (équiv. ε) vérifiant $a(\varepsilon)=0$ est appelé le *spectre* de $\hat{H}$. Pour pouvoir déterminer le spectre directement, on doit donc d'abord résoudre le problème de connexion entre les points $x=\pm\infty$, ce qui est difficile même pour une équation aussi simple que (4.1). Heureusement dans le cas de l'oscillateur harmonique, on peut trouver le spectre par une méthode algébrique indirecte qui sera présentée ci-dessous.

4.2. **Analyse algébrique.** Introduisons 2 opérateurs différentiels:

$$a=\hat{x}+i\hat{p}_x=x+\frac{d}{dx}, \tag{4.4}$$

$$a^\dagger=\hat{x}-i\hat{p}_x=x-\frac{d}{dx}. \tag{4.5}$$

a et $a^\dagger$ s'appellent les *opérateurs de création et d'annihilation.*

Exercice 38. Démontrer les propriétés suivantes de a, $a^\dagger$:

(1) a, $a^\dagger$ vérifient les relations de commutation

$$\left[a, a^\dagger\right] = 2, \qquad [a, a] = \left[a^\dagger, a^\dagger\right] = 0. \tag{4.6}$$

(2) L'hamiltonien $\hat{H} = \hat{x}^2 + \hat{p}_x^2$ de l'oscillateur harmonique peut être écrit comme

$$\hat{H} = a^\dagger a + 1. \tag{4.7}$$

(3) a et $a^\dagger$ sont conjugués par rapport au produit scalaire (4.2), c'est-à-dire

$$\left(\varphi, a^\dagger\psi\right) = (a\varphi, \psi), \qquad (\varphi, a\psi) = \left(a^\dagger\varphi, \psi\right) \tag{4.8}$$

pour tout φ, ψ qui tendent vers 0 quand $x \to \pm\infty$.

Proposition 39. *Soient $\psi(x)$ une fonction propre de $\hat{H}$ et λ la valeur propre associée: $\hat{H}\psi = \lambda\psi$. Alors les fonctions $\psi_+ = a^\dagger\psi$ et $\psi_- = a\psi$ vérifient $\hat{H}\psi_\pm = (\lambda \pm 2)\psi_\pm$.*

■ Nous avons par exemple:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_+ &= \hat{H}a^\dagger\psi = a^\dagger\hat{H}\psi + \left[\hat{H}, a^\dagger\right]\psi = \lambda a^\dagger\psi + \left(a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a\right)\psi = \\ &= \lambda a^\dagger\psi + a^\dagger\left[a, a^\dagger\right]\psi = \lambda a^\dagger\psi + 2a^\dagger\psi = (\lambda+2)\psi_+\,.\end{aligned}$$

Cela signifie que ψ_+ (ou ψ_-) est une fonction propre de $\hat{H}$ associée à la valeur propre $\lambda+2$ (resp. $\lambda - 2$) ou $\psi_+ = 0$ (resp. $\psi_- = 0$). □

Exercice 40. Montrer que la solution de l'équation $a\psi_0 = 0$ est une fonction propre de $\hat{H}$.

■ Tout d'abord notons que $\hat{H}\psi_0 = \left(a^\dagger a + 1\right)\psi_0 = \psi_0$, et alors ψ_0 est une solution de $\hat{H}\psi_0 = \lambda\psi_0$ avec $\lambda = 1$ (i. e. $\varepsilon = 1$). Donc il nous reste à montrer que $\psi_0(x)$ s'annule quand $x \to \pm\infty$. Pour cela, nous allons résoudre l'équation $a\psi = 0$ explicitement:

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0 \implies \frac{\psi_0'}{\psi_0} = -x \implies \ln\psi_0 = -\frac{x^2}{2} + \text{const.}$$

On a donc $\psi_0(x) = \text{const} \cdot e^{-x^2/2}$. □

En combinant ce résultat avec la Proposition 39, on voit que $\psi_n(x) = \left(a^\dagger\right)^n\psi_0(x)$ (où $n = 0, 1, 2, \ldots$) est une fonction propre de $\hat{H}$ avec la valeur propre associée $\lambda_n = 1 + 2n$. D'autre part il est possible de montrer que le spectre de $\hat{H}$ est borné par $\lambda > 0$. On a:

$$\lambda = \frac{(\psi, \hat{H}\psi)}{(\psi, \psi)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\overline{\psi(x)}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right)\psi(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\left(|\psi'(x)|^2 + x^2|\psi(x)|^2\right)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx} > 0.$$

Ceci montre que $\hat{H}$ n'a pas de vecteurs propres autres que $\{\psi_n\}_{n=0,1,2,\ldots}$. Effectivement si un tel vecteur ψ existe et λ est la valeur propre correspondante, alors d'après la Proposition 39 la fonction $\psi_{k,-} = a^k\psi$ vérifie $\hat{H}\psi_{k,-} = (\lambda - 2k)\psi_{k,-}$. De plus $\psi_{k,-} \neq 0$ car si $\psi_{k,-} = 0$ et $\psi_{k-1,-} \neq 0$, alors $\psi_{k-1,-} = \text{const} \cdot \psi_0$ et $\psi = \text{const} \cdot \psi_{k-1}$. Donc $\psi_{k,-}$ est un vecteur propre nontrivial et la valeur propre associée est égale à $\lambda - 2k$. Par contre, si on choisit k suffisamment grand, cette valeur propre devient négative $\implies$ contradiction.

4.3. **Polynômes d'Hermite.** Nous avons montré que l'ensemble des fonctions propres et valeurs propres de $\hat{H}$ est donné par

$$\varphi_n = c_n \left(a^\dagger\right)^n g_0, \qquad \lambda_n = 1 + 2n, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{4.9}$$

où $g_0 = e^{-x^2/2}$ et $\{c_n\}_{n=0,1,2,\ldots}$ sont des constantes quelconques. Comme $\hat{H}$ est un opérateur symétrique à valeurs propres distinctes, les vecteurs $\{\varphi_n\}_{n=0,1,2,\ldots}$ sont orthogonaux: $(\varphi_i, \varphi_j) = 0$ pour tout i, j tels que $i \neq j$. Maintenant nous allons choisir $\{c_n\}$ de telle manière que $\{\varphi_n\}$ soient orthonormés.

Exercice 41. Montrer que si

$$c_n = 1 \Big/ \sqrt{\left((a^\dagger)^n g_0, (a^\dagger)^n g_0\right)}, \qquad n = 0, 1, \ldots, \tag{4.10}$$

alors $\{\varphi_n\}$ sont orthonormés.

Exercice 42. Montrer que

$$\left[a, \left(a^\dagger\right)^n\right] = 2n \left(a^\dagger\right)^{n-1}. \tag{4.11}$$

■ Induction en n. L'affirmation est vraie pour $n = 1$ d'après (4.6). Supposons qu'elle est vraie pour $n = k-1$, c'est-à-dire, $\left[a, (a^\dagger)^{k-1}\right] = 2(k-1)\left(a^\dagger\right)^{k-2}$. Alors pour $n = k$ on a:

$$\begin{aligned}
\left[a, \left(a^\dagger\right)^k\right] &= a \left(a^\dagger\right)^k - \left(a^\dagger\right)^k a = \\
&= a \left(a^\dagger\right)^{k-1} a^\dagger - \left(a^\dagger\right)^{k-1} a a^\dagger + \left(a^\dagger\right)^{k-1} a a^\dagger - \left(a^\dagger\right)^k a = \\
&= \left[a, \left(a^\dagger\right)^{k-1}\right] a^\dagger + \left(a^\dagger\right)^{k-1} \left[a, a^\dagger\right] = \\
&= 2(k-1)\left(a^\dagger\right)^{k-1} + 2\left(a^\dagger\right)^{k-1} = 2k \left(a^\dagger\right)^{k-1},
\end{aligned}$$

d'où le résultat. □

Proposition 43. *Les coefficients $\{c_n\}$ dans (4.10) sont donnés par*

$$c_n = \frac{2^{-n/2}}{\pi^{1/4}\sqrt{n!}}, \qquad n = 0, 1, \ldots \tag{4.12}$$

■ Tout d'abord on peut calculer directement

$$(g_0, g_0) = \int_{-\infty}^{\infty} |g_0(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi},$$

et donc $c_0 = 1/\sqrt{\pi}$. Par la suite calculons le produit scalaire

$$\begin{aligned}
\left(\left(a^\dagger\right)^n g_0, \left(a^\dagger\right)^n g_0\right) &= \left(\left(a^\dagger\right)^{n-1} g_0, a\left(a^\dagger\right)^n g_0\right) = \\
&= \left(\left(a^\dagger\right)^{n-1} g_0, \left[a, \left(a^\dagger\right)^n\right] g_0\right) + \left(\left(a^\dagger\right)^{n-1} g_0, \left(a^\dagger\right)^n a\, g_0\right) = \\
&= 2n \left(\left(a^\dagger\right)^{n-1} g_0, \left(a^\dagger\right)^{n-1} g_0\right).
\end{aligned}$$

Ici, dans la première ligne nous avons utilisé la propriété de symétrie (4.8). Le passage de la deuxième à la troisième ligne est justifié par la relation (4.11) et $ag_0 = 0$. En combinaison avec le premier résultat, ça donne

$$\left(\left(a^\dagger\right)^n g_0, \left(a^\dagger\right)^n g_0 \right) = 2^n n! \, (g_0, g_0) = 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi},$$

d'où la formule (4.12). □

Remarque 44. Dans toute la suite, on suppose que les coefficients c_n dans (4.9) sont donnés par (4.12). Cela signifie que les fonctions propres $\{\varphi_n\}$ sont orthonormées:

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}, \qquad i, j = 0, 1, 2, \ldots$$

Notons que

$$\left(a^\dagger\right)^n g_0 = \underbrace{\left(x - \frac{d}{dx}\right) \cdots \left(x - \frac{d}{dx}\right)}_{n \text{ fois}} e^{-x^2/2} = H_n(x) e^{-x^2/2},$$

où $H_n(x)$ est un polynôme de degré n. Nous avons par exemple

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, \\ H_1(x) &= 2x, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \\ &\cdots\cdots \end{aligned}$$

Ces polynômes s'appellent les *polynômes d'Hermite*. L'ensemble des fonctions propres orthonormées de l'oscillateur harmonique est donc donné par

$$\varphi_n(x) = \frac{H_n(x)\, e^{-x^2/2}}{2^{n/2}\pi^{1/4}\sqrt{n!}}, \qquad n = 0, 1, \ldots \tag{4.13}$$

Les polynômes d'Hermite vérifient quelques relations de récurrence. Nous avons en particulier

$$\begin{aligned} H_{n+1}(x)\, e^{-x^2/2} &= \left(a^\dagger\right)^{n+1} g_0 = a^\dagger \left(a^\dagger\right)^n g_0 = \left(x - \frac{d}{dx}\right) H_n(x)\, e^{-x^2/2} = \\ &= \left(2xH_n(x) - H_n'(x)\right) e^{-x^2/2}, \end{aligned}$$

et donc

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H_n'(x). \tag{4.14}$$

D'autre part en utilisant (4.11) et $ag_0 = 0$, on obtient

$$\begin{aligned} \left(x + \frac{d}{dx}\right) H_n(x)\, e^{-x^2/2} &= a \left(a^\dagger\right)^n g_0 = \left(\left[a, \left(a^\dagger\right)^n\right] + \left(a^\dagger\right)^n a \right) g_0 = \\ &= 2n \left(a^\dagger\right)^{n-1} g_0 = 2nH_{n-1}(x) e^{-x^2/2}, \end{aligned}$$

ce qui implique

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x). \tag{4.15}$$

En combinant (4.14) et (4.15), on peut aussi écrire

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \tag{4.16}$$

Exercice 45. Montrer que $H_n(x)$ vérifie l'équation différentielle

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right) H_n(x) = 0. \tag{4.17}$$

Indication: on pourra utiliser que $\varphi_n(x)$ vérifie $\hat{H}\varphi_n = (1+2n)\varphi_n$.

Enfin l'orthonormalité des fonctions $\{\varphi_n(x)\}$ implique les relations d'orthogonalité:

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2}dx = 2^n\sqrt{\pi}\, n!\,\delta_{mn}\,. \tag{4.18}$$

Résumé.

(1) Polynômes d'Hermite apparaissent lorsqu'on cherche les fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique.
(2) Nous avons trouvé et orthonormalisé ces fonctions propres (formule (4.13)) par une procédure purement algébrique, basée sur les relations de commutation (4.6) entre les opérateurs de création et annihilation.
(3) Mêmes relations de commutation permettent d'obtenir des relations de récurrence de type (4.14)–(4.16) vérifiées par $\{H_n(x)\}$.
(4) Relations d'orthogonalité (4.18) pour les polynômes d'Hermite découlent de l'orthogonalité des fonctions propres de $\hat{H}$ qui est, à son tour, une conséquence de la symétrie de l'hamiltonien (Exercice 37).

5. Séparation des variables en dimension 3 et harmoniques sphériques

5.1. **Introduction.** Ici nous allons étudier l'équation de Schroedinger stationnaire $\hat{H}\psi = \lambda\psi$ pour une particule dans un potentiel à symétrie sphérique (en 3D). L'hamiltonien s'écrit comme

$$\hat{H} = -\Delta + V(r), \tag{5.1}$$

où Δ note l'opérateur de Laplace en dimension 3 et $V(r)$ est une fonction quelconque. En coodonnées sphériques, l'expression du laplacien est

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,. \tag{5.2}$$

Quelques remarques:

- Comme l'hamiltonien contient les dérivées par rapport à φ mais ne dépend pas de φ explicitement, il commute avec l'opérateur $\hat{L}_z = -i\partial_\varphi$ de la troisième composante du moment angulaire.
- Aussi, $\hat{H}$ commute avec l'opérateur du carré du moment angulaire

$$\hat{L}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,, \tag{5.3}$$

puisque nous avons

$$\hat{H} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + V(r) + \frac{\hat{L}^2}{r^2}\,. \tag{5.4}$$

et $\hat{L}^2$ ne dépend pas de r. Notons que $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ commutent également.

Maintenant, puisque $[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$, nous allons essayer de diagonaliser les opérateurs $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ simultanément. On cherche donc les fonctions $\psi(r, \theta, \varphi)$ vérifiant

$$\hat{L}_z\psi = m\psi, \qquad \hat{L}^2\psi = M\psi, \qquad \hat{H}\psi = \lambda\psi. \tag{5.5}$$

où m, M et λ sont les valeurs propres de $\hat{L}_z$, $\hat{L}^2$ et $\hat{H}$ (inconnues pour l'instant).

La première des relations (5.5) donne

$$\psi(r, \theta, \varphi) = G(r, \theta)e^{im\varphi}, \tag{5.6}$$

où $G(r, \theta)$ est une fonction arbitraire. De plus, la condition de périodicité $\psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \psi(r, \theta, \varphi)$ implique $m \in \mathbb{Z}$, de façon analogue à ce qu'on a déjà vu en dimension 2. En substituant (5.6) dans la deuxième des relations (5.5), on obtient une équation pour $G(r, \theta)$:

$$\left(-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)G(r, \theta) = MG(r, \theta).$$

Cela signifie qu'on a nécessairement

$$G(r, \theta) = h_1(r)g_1(\theta) + h_2(r)g_2(\theta), \tag{5.7}$$

où $g_{1,2}(\theta)$ sont deux solutions indépendantes de l'équation

$$\left(-\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\sin\theta\frac{d}{d\theta} + \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)g(\theta) = Mg(\theta), \tag{5.8}$$

et $h_{1,2}(r)$ sont deux fonctions arbitraires. Enfin en substituant (5.7) dans la troisième des relations (5.5), on voit que $h_{1,2}(r)$ vérifient

$$\left(-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + V(r) + \frac{M}{r^2}\right)h(r) = \lambda h(r). \tag{5.9}$$

Par conséquent la résolution de l'équation aux dérivées partielles $\hat{H}\psi = \lambda\psi$ se réduit à la résolution des équations différentielles ordinaires (5.8), (5.9): grâce à l'existence des opérateurs $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ qui commutent avec l'hamiltonien et entre eux, nous avons pu séparer les variables r, θ et φ.

Remarque 46. Lorsqu'on cherche les spectres de $\hat{L}^2$ et $\hat{H}$, on s'intéresse aux fonctions d'onde ψ de norme finie:

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} \left|\psi(r, \theta, \varphi)\right|^2 dV < \infty.$$

En particulier, on demande $\psi \to 0$ quand $r \to \infty$. Cela impose des conditions supplémentaires sur les solutions de (5.8), (5.9) qui ne peuvent être vérifiées que pour un ensemble discret de valeurs de M et λ.

5.2. **Algèbre du moment angulaire.** On a pu apprécier la puissance des méthodes algébriques lors de l'étude de l'oscillateur harmonique, où elles ont permis d'obtenir très facilement le spectre et les fonctions propres normalisées. Aussi, on les a utilisées dans l'obtention des relations de récurrence pour les fonctions de Bessel. Dans ce deuxième exemple, nous avons vu également qu'il est très utile de considérer l'algèbre de *tous* les opérateurs qui commutent avec l'hamiltonien (dans ce cas $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{L}_z$) et pas uniquement ceux qui commutent entre eux.

En général, les opérateurs qui commutent avec l'hamiltonien d'un système quantique sont associés aux *intégrales de mouvement* (on les appelle aussi *quantités conservées*) du système classique correspondant. L'existence de telles quantités conservées est directement liée aux symétries du système (translations, rotations, etc).

Dans le cas d'une particule dans un potentiel à symétrie sphérique nous avons l'invariance du lagrangien classique par rapport aux rotations, ce qui implique la conservation du moment angulaire $\vec{L}$. En mécanique quantique, on associe aux trois composantes de $\vec{L}$ les opérateurs

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \tag{5.10}$$

Nous verrons plus tard que, effectivement, ces opérateurs commutent avec l'hamiltonien (5.1). Il est toutefois préférable de commencer par l'étude de leurs propriétés algébriques.

Exercice 47. Montrer que $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ et $\hat{L}_z$ vérifient les relations de commutation

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hat{L}_y. \tag{5.11}$$

■ Dans la démonstration, il est instructif de ne pas utiliser la représentation explicite des opérateurs de position et d'impulsion (dérivées, multiplication par x, y ou z), mais uniquement les relations de commutation qu'ils vérifient.

Il n'y a que trois commutateurs nontriviaux:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i,$$

alors que tous les autres sont nuls:

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{y}, \hat{z}] = [\hat{z}, \hat{x}] = 0, \qquad [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0,$$

$$[\hat{p}_x, \hat{y}] = [\hat{p}_x, \hat{z}] = [\hat{p}_y, \hat{z}] = [\hat{p}_y, \hat{x}] = [\hat{p}_z, \hat{x}] = [\hat{p}_z, \hat{y}] = 0.$$

En utilisant ces relations, on peut écrire par exemple:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\,(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)\,(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \\
&= (\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \cancel{\hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z} - \cancel{\hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x} + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z) \\
&\quad - (\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z - \cancel{\hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z} - \cancel{\hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y} + \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y) = \\
&= \hat{x}\hat{p}_y[\hat{z}, \hat{p}_z] - \hat{y}\hat{p}_x[\hat{z}, \hat{p}_z] = i(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hat{L}_z.
\end{aligned}$$

Deux autres relations s'obtiennent par permutations cycliques des indices (x, y, z). □

Introduisons à la place de $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ les opérateurs

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y. \tag{5.12}$$

Quelles relations de commutation vérifient $\hat{L}_\pm$, $\hat{L}_z$?

Exercice 48. Montrer que

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hat{L}_\pm, \qquad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hat{L}_z. \tag{5.13}$$

Exercice 49. Montrer que l'opérateur du carré du moment angulaire

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{5.14}$$

commute avec $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ et $\hat{L}_z$.

■ Calculons par exemple

$$\begin{aligned}
[\hat{L}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = \left(\hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y^2\right) + \left(\hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z^2\right) = \\
&= \left(\hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_x\hat{L}_y^2\right) \\
&\quad + \left(\hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_x\hat{L}_z^2\right) = \\
&= \left(\hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y\right) + \left(\hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z\right) = \\
&= \left(-i\hat{L}_y\hat{L}_z - i\hat{L}_z\hat{L}_y\right) + \left(i\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hat{L}_y\hat{L}_z\right) = 0.
\end{aligned}$$

Deux autres commutateurs s'obtiennent de la même manière. □

Exercice 50. Montrer que

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z(\hat{L}_z - 1) = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z(\hat{L}_z + 1). \tag{5.15}$$

On s'intéresse par la suite à l'expression explicite des opérateurs différentiels $\hat{L}_{x,y,z}$, $\hat{L}_\pm$ et $\hat{L}^2$ en coordonnées sphériques

$$\begin{cases} x = r\cos\varphi\sin\theta, \\ y = r\sin\varphi\sin\theta, \\ z = r\cos\theta. \end{cases}$$

Proposition 51. *Opérateurs $\hat{L}_{x,y,z}$, $\hat{L}_\pm$ et $\hat{L}^2$, définis par (5.10), (5.12) et (5.14) peuvent s'écrire sous la forme*

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\sin\varphi\,\partial_\theta + i\cos\varphi\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi, \\ \hat{L}_y = -i\cos\varphi\,\partial_\theta + i\sin\varphi\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi, \\ \hat{L}_z = -i\partial_\varphi, \end{cases} \tag{5.16}$$

$$\begin{cases} \hat{L}_+ = e^{i\varphi}\left(\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right), \\ \hat{L}_- = e^{-i\varphi}\left(-\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right), \end{cases} \tag{5.17}$$

$$\hat{L}^2 = -\left(\partial_{\theta\theta} + \operatorname{ctg}\theta\,\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\partial_{\varphi\varphi}\right). \tag{5.18}$$

■ Notons tout d'abord que

$$\begin{pmatrix} \partial_r \\ \partial_\theta \\ \partial_\varphi \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix}.$$

Explicitement on a

$$A = \begin{pmatrix} \cos\varphi\sin\theta & \sin\varphi\sin\theta & \cos\theta \\ r\cos\varphi\cos\theta & r\sin\varphi\cos\theta & -r\sin\theta \\ -r\sin\varphi\sin\theta & r\cos\varphi\sin\theta & 0 \end{pmatrix}.$$

Afin d'exprimer ∂_x, ∂_y, ∂_z en fonction de ∂_r, ∂_θ, ∂_φ, on doit calculer la matrice inverse A^{-1}. Le déterminant de A coïncide avec la jacobienne de la transformation $(x, y, z) \to (r, \theta, \varphi)$, alors $\det A = r^2 \sin\theta$ (on pourra aussi vérifier cette relation directement) et A^{-1} s'écrit comme

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \cos\varphi\sin\theta & \frac{\cos\varphi\cos\theta}{r} & -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta} \\ \sin\varphi\sin\theta & \frac{\sin\varphi\cos\theta}{r} & \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta} \\ \cos\theta & -\frac{\sin\theta}{r} & 0 \end{pmatrix}.$$

Maintenant il est simple d'obtenir

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= ir\cos\theta\left(\sin\varphi\sin\theta\,\partial_r + \frac{\sin\varphi\cos\theta}{r}\,\partial_\theta + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\,\partial_\varphi\right) \\
&\quad - ir\sin\varphi\sin\theta\left(\cos\theta\,\partial_r - \frac{\sin\theta}{r}\,\partial_\theta\right) = i\sin\varphi\,\partial_\theta + i\cos\varphi\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi, \\
\hat{L}_y &= -\,ir\cos\theta\left(\cos\varphi\sin\theta\,\partial_r + \frac{\cos\varphi\cos\theta}{r}\,\partial_\theta - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\,\partial_\varphi\right) \\
&\quad + ir\cos\varphi\sin\theta\left(\cos\theta\,\partial_r - \frac{\sin\theta}{r}\,\partial_\theta\right) = -i\cos\varphi\,\partial_\theta + i\sin\varphi\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi, \\
\hat{L}_z &= -\,ir\cos\varphi\sin\theta\left(\sin\varphi\sin\theta\,\partial_r + \frac{\sin\varphi\cos\theta}{r}\,\partial_\theta + \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\,\partial_\varphi\right) \\
&\quad + ir\sin\varphi\sin\theta\left(\cos\varphi\sin\theta\,\partial_r + \frac{\cos\varphi\cos\theta}{r}\,\partial_\theta - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\,\partial_\varphi\right) = -i\partial_\varphi.
\end{aligned}$$

En substituant ces expressions dans (5.12), on trouve les représentations (5.17). De même, en substituant (5.17) et $\hat{L}_z = -i\partial_\varphi$ dans (5.15), on obtient

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 &= \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z(\hat{L}_z - 1) = \\
&= e^{i\varphi}\left(\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right)e^{-i\varphi}\left(-\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right) + i\partial_\varphi - \partial_{\varphi\varphi} = \\
&= \left(\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi + \operatorname{ctg}\theta\right)\left(-\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right) + i\partial_\varphi - \partial_{\varphi\varphi} = \\
&= -\,\partial_{\theta\theta} - \operatorname{ctg}\theta\,\partial_\theta - i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_{\theta\varphi} + \underbrace{i\partial_\theta\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi}_{i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_{\theta\varphi} - \frac{i}{\sin^2\theta}\,\partial_\varphi} - \operatorname{ctg}^2\theta\,\partial_{\varphi\varphi} + \\
&\quad + \underbrace{i\operatorname{ctg}^2\theta\,\partial_\varphi + i\partial_\varphi}_{\frac{i}{\sin^2\theta}\,\partial_\varphi} - \partial_{\varphi\varphi} = -\partial_{\theta\theta} - \operatorname{ctg}\theta\,\partial_\theta - \frac{1}{\sin^2\theta}\,\partial_{\varphi\varphi}.
\end{aligned}$$

Notons que la formule finale coïncide avec (5.3). Ceci explique les notations utilisées dans la section 5.1. □

Remarque 52. Opérateurs $\hat{L}_{x,y,z}$ et $\hat{L}_\pm$ ne dépendent pas de r et commutent avec $\hat{L}^2$. Alors, grâce à la formule (5.4), ils commutent aussi avec l'hamiltonien (5.1).

5.3. **Harmoniques sphériques et polynômes de Legendre.** Nos objectifs principaux dans cette section sont:

(1) obtenir les fonctions propres communes de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$,
(2) calculer les valeurs propres associées,
(3) orthonormaliser l'ensemble des fonctions propres.

Tous ces problèmes peuvent être résolus par des méthodes algébriques analogues à celles utilisées ci-dessus dans l'étude des fonctions de Bessel et de l'oscillateur harmonique.

Remarque 53. Les fonctions propres communes de $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ jouent en dimension 3 le même rôle que les fonctions propres $\{e^{i\nu\varphi}\}$, $\nu \in \mathbb{Z}$ de $\hat{L}_z$ en dimension 2.

Comme $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ ne contiennent pas de r ni de dérivées par rapport à r, on peut considérer r comme une constante. Nous allons donc "oublier" l'existence de cette coordonnée et restreindre l'action de $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ à l'espace $\mathfrak{U}$ des fonctions $f : S^2 \to \mathbb{C}$ sur la sphère. Ce sont des fonctions $f(\theta,\varphi)$ de deux variables $\theta \in [0,\pi]$ et $\varphi \in [0,2\pi]$, à valeurs complexes, vérifiant la condition $f(\theta,\varphi+2\pi) = f(\theta,\varphi)$. L'espace $\mathfrak{U}$ est muni d'un produit scalaire:

$$(f,g) = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \sin\theta\, \overline{f(\theta,\varphi)}\, g(\theta,\varphi), \qquad \forall f,g \in \mathfrak{U}. \tag{5.19}$$

Montrons quelques propriétés de $\hat{L}_{x,y,z}$, $\hat{L}_\pm$ et $\hat{L}^2$:

Proposition 54. *Opérateurs $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ et $\hat{L}_z^2$ sont symétriques par rapport au produit scalaire (5.19).*

■ Par exemple, pour $\hat{L}^2$ on obtient en utilisant (5.18):

$$\begin{aligned}
(f,\hat{L}^2 g) &= -\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \sin\theta\, \overline{f}\, \left(\frac{1}{\sin\theta}\,\partial_\theta \sin\theta\, \partial_\theta\, g + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\partial_{\varphi\varphi}\, g\right) = \\
&= -\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \overline{f}\, \left(\partial_\theta \sin\theta\, \partial_\theta\, g + \frac{1}{\sin\theta}\,\partial_{\varphi\varphi}\, g\right) = \\
&= \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \left(\sin\theta\, \overline{(\partial_\theta f)}\, (\partial_\theta g) + \frac{1}{\sin\theta}\, \overline{(\partial_\varphi f)}\, (\partial_\varphi g)\right) = \\
&= \overline{\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \left(\sin\theta\, (\partial_\theta f)\, \overline{(\partial_\theta g)} + \frac{1}{\sin\theta}\, (\partial_\varphi f)\, \overline{(\partial_\varphi g)}\right)} = \\
&= \overline{(g,\hat{L}^2 f)} = (\hat{L}^2 f, g).
\end{aligned}$$

Afin de passer de la deuxième à la troisième ligne, on a effectué une intégration par parties (par rapport à θ avec le premier terme et par rapport à φ avec le deuxième). □

Proposition 55. *Toutes les valeurs propres de $\hat{L}^2$ sont positives ($M \geq 0$).*

■ Soient $g(\theta,\varphi)$ une fonction propre de $\hat{L}^2$ et M la valeur propre associée. La symétrie de $\hat{L}^2$ implique $M \in \mathbb{R}$. De plus, en répétant le calcul qu'on a donné plus haut, on peut écrire

$$(g,\hat{L}^2 g) = M(g,g) = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \left(\sin\theta\, |\partial_\theta\, g|^2 + \frac{1}{\sin\theta}\, |\partial_\varphi\, g|^2\right) \geq 0,$$

d'où le résultat. □

En effet, il s'avère très commode d'écrire les valeurs propres de $\hat{L}^2$ comme

$$M = \ell(\ell+1), \tag{5.20}$$

où ℓ est un nouveau paramètre. Les résultats précédents montrent qu'on peut supposer que $\ell \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. Nous conserverons cette convention dans la suite.

Proposition 56. *Opérateurs $\hat{L}_+$ et $\hat{L}_-$ sont conjugués par rapport au produit scalaire (5.19), c'est-à-dire,*

$$\left(f,\hat{L}_+ g\right) = \left(\hat{L}_- f, g\right), \qquad \left(f,\hat{L}_- g\right) = \left(\hat{L}_+ f, g\right) \qquad \forall f,g \in \mathfrak{U}.$$

■ On a

$$\begin{aligned}\left(f, \hat{L}_+ g\right) &= \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\ \left[\sin\theta\, \overline{f}\, e^{i\varphi}\, \partial_\theta\, g + i\cos\theta\, \overline{f}\, e^{i\varphi}\, \partial_\varphi\, g\right] = \\ &= \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\ \left[-\left(\sin\theta\, \partial_\theta\, \overline{f} + \cancel{\cos\theta\, \overline{f}}\right) e^{i\varphi}\, g - \left(i\sin\theta\, \partial_\theta\, \overline{f} - \cancel{\cos\theta\, \overline{f}}\right) e^{i\varphi}\, g\right] = \\ &= \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \overline{e^{-i\varphi}\left(-\sin\theta\, \partial_\theta f + i\cos\theta\, \partial_\varphi f\right)}\, g = \left(\hat{L}_- f, g\right).\end{aligned}$$

Deuxième égalité s'obtient à partir de la précédente en utilisant la propriété $(f, g) = \overline{(g, f)}$ de tout produit scalaire. □

Proposition 57. *Soit $g(\theta, \varphi)$ une fonction propre commune de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$. Si on note $\ell(\ell+1)$ et m les valeurs propres correspondantes (rappelons que $m \in \mathbb{Z}$), alors $m \in [-\ell, \ell]$.*

■ On peut écrire

$$\begin{aligned}\left(g, \hat{L}^2 g\right) = \ell(\ell+1)(g, g) = \left|\begin{array}{c}\text{grâce à la première} \\ \text{relation dans (5.15)}\end{array}\right| &= \left(g, \left(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z\right) g\right) = \\ &= \left(g, \hat{L}_+\hat{L}_- g\right) + m(m-1)(g, g) = \\ &= \left|\begin{array}{c}\text{comme } \hat{L}_+ \text{ et } \hat{L}_- \\ \text{sont conjugués}\end{array}\right| = m(m-1)(g, g) + \left(\hat{L}_- g, \hat{L}_- g\right),\end{aligned}$$

donc

$$[\ell(\ell+1) - m(m-1)]\,(g, g) = (\ell + 1 - m)\,(\ell + m)\,(g, g) = \left(\hat{L}_- g, \hat{L}_- g\right) \geq 0, \tag{5.21}$$

et par conséquent $m \in [-\ell, \ell + 1]$. D'autre part, la deuxième relation dans (5.15) donne de façon analogue:

$$\begin{aligned}\left(g, \hat{L}^2 g\right) = \ell(\ell+1)(g, g) = &\left(g, \left(\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z\right) g\right) = \\ = &\left(g, \hat{L}_-\hat{L}_+ g\right) + m(m+1)(g, g) = \\ = &\, m(m+1)(g, g) + \left(\hat{L}_+ g, \hat{L}_+ g\right),\end{aligned}$$

d'où $(\ell - m)(\ell + 1 + m)(g, g) = \left(\hat{L}_+ g, \hat{L}_+ g\right) \geq 0$ et donc $m \in [-\ell - 1, \ell]$. En combinant les deux résultats, on obtient $m \in [-\ell, \ell]$. □

Proposition 58. *Soit $g(\theta, \varphi)$ une fonction propre commune de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ avec les valeurs propres associées $\ell(\ell+1)$ et m. Alors les fonctions $g_\pm(\theta, \varphi) = \hat{L}_\pm g(\theta, \varphi)$ vérifient les équations*

$$\hat{L}^2 g_\pm = \ell(\ell+1) g_\pm, \qquad \hat{L}_z g_\pm = (m \pm 1) g.$$

■ On a par exemple

$$\hat{L}^2 g_+ = \hat{L}^2 \hat{L}_+ g = \hat{L}_+ \hat{L}^2 g = \ell(\ell+1)\hat{L}_+ g = \ell(\ell+1) g_+.$$

De façon analogue:

$$\begin{aligned}\hat{L}_z g_+ &= \hat{L}_z \hat{L}_+ g = \left(\left[\hat{L}_z, \hat{L}_+\right] + \hat{L}_+\hat{L}_z\right) g = \left(\hat{L}_+ + \hat{L}_+\hat{L}_z\right) g = \\ &= \hat{L}_+(\hat{L}_z + 1) g = (m+1)\hat{L}_+ g = (m+1) g_+,\end{aligned}$$

d'où le résultat. □

Au premier regard, on peut penser qu'il y a une contradiction entre les Propositions 57 et 58. Effectivement, les fonctions $g_{k,\pm} = \left(\hat{L}_\pm\right)^k g$ vérifient

$$\hat{L}^2 g_{k,\pm} = \ell(\ell+1) g_{k,\pm}, \qquad \hat{L}_z g_{k,\pm} = (m \pm k) g_{k,\pm}.$$

On aurait pu supposer que $g_{\pm,k}$ sont des fonctions propres communes de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ qui correspondent aux valeurs propres $\ell(\ell+1)$ et $m \pm k$. D'autre part pour k suffisamment grand $m \pm k$ n'appartient plus à l'intervalle $[-\ell, \ell]$. La solution de ce paradoxe est que les fonctions $g_{\pm,k}$ peuvent aussi s'annuler identiquement. On voit donc que c'est nécessairement le cas pour $m \pm k \notin [-\ell, \ell]$.

Par conséquent, s'il existe une fonction propre commune g de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ avec les valeurs propres associées $\ell(\ell+1)$ et m, alors il existe aussi une fonction propre commune h avec le même ℓ, qui vérifie les équations:

$$\hat{L}_- h = 0, \qquad \hat{L}_z h = m' h. \tag{5.22}$$

Toute autre fonction propre de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ avec le même ℓ s'obtient à partir de h par l'action des opérateurs $\left(\hat{L}_+\right)^k$.

D'autre part, d'après (5.21) on a

$$\left(\ell + 1 - m'\right)\left(\ell + m'\right)(h, h) = \left(\hat{L}_- h, \hat{L}_- h\right) = 0,$$

et donc $\ell = -m' \in \mathbb{Z}$ (notons que $\ell + 1 - m' \neq 0$ car dans ce cas $m' \notin [-\ell, \ell]$). Ceci signifie que ℓ est un nombre entier supérieur ou égal à 0.

Résumé.

(1) Fonctions propres communes $g_\ell^m(\theta, \varphi)$ de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ sont caractérisées par deux nombres ℓ et m:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 g_\ell^m &= \ell(\ell+1)\, g_\ell^m, \\ \hat{L}_z g_\ell^m &= m g_\ell^m, \end{aligned}$$

avec $\ell = 0, 1, 2, \ldots, \infty$ et $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$. En mécanique quantique, ℓ et m sont appelés le nombre quantique orbital et magnétique.

(2) Pour tout ℓ les fonctions $g_\ell^{-\ell}$ et g_ℓ^{ℓ} vérifient

$$\hat{L}_- g_\ell^{-\ell} = 0, \qquad \hat{L}_+ g_\ell^{\ell} = 0. \tag{5.23}$$

Toute autre fonction g_ℓ^m s'obtient facilement à partir de $g_\ell^{-\ell}$:

$$g_\ell^{-\ell+k} = \left(\hat{L}_+\right)^k g_\ell^{-\ell}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, 2\ell. \tag{5.24}$$

Les fonctions $\{g_\ell^m\}$ sont orthogonales par rapport au produit scalaire (5.19), c'est-à-dire, $\left(g_\ell^m, g_{\ell'}^{m'}\right) \sim \delta_{\ell\ell'}\, \delta_{mm'}$.

Nous allons maintenant décrire l'ensemble $\{g_\ell^m\}$ plus explicitement. Tout d'abord notons que $\hat{L}_z g_\ell^{-\ell} = -\ell g_\ell^{-\ell}$ implique $g_\ell^{-\ell}(\theta, \varphi) = G(\theta) e^{-i\ell\varphi}$. En substituant cette expression dans (5.23), on obtient une équation différentielle <u>ordinaire</u> pour $G(\theta)$:

$$\left(-\frac{d}{d\theta} + \ell \operatorname{ctg}\theta\right) G(\theta) = 0.$$

La solution générale de cette équation est $G(\theta) = c\,(\sin\theta)^\ell$, alors on peut poser

(5.25) $$g_\ell^{-\ell}(\theta,\varphi) = (\sin\theta)^\ell\, e^{-i\ell\varphi}, \qquad \text{et donc}$$

(5.26) $$g_\ell^{-\ell+k}(\theta,\varphi) = \Big[e^{i\varphi}\,(\partial_\theta + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\;\partial_\varphi)\Big]^k (\sin\theta)^\ell\, e^{-i\ell\varphi}, \qquad k = 0,1,\ldots,2\ell.$$

Calculons les normes des fonctions $\{g_\ell^m\}$ ainsi definies — elles nous seront nécessaires pour l'orthonormalisation. Pour cela, introduisons les quantités

$$\alpha_k = \left\|g_\ell^{-\ell+k}\right\|^2 = \left(g_\ell^{-\ell+k}, g_\ell^{-\ell+k}\right).$$

Exercice 59. Démontrer la relation de récurrence

(5.27) $$\alpha_{k+1} = (2\ell-k)(k+1)\alpha_k.$$

■ Nous allons utiliser la relation $\hat L^2 = \hat L_-\hat L_+ + \hat L_z + \hat L_z^2$. Notamment, on peut écrire

$$\begin{aligned}
\ell(\ell+1)\alpha_k &= \left(g_\ell^{-\ell+k}, \hat L^2 g_\ell^{-\ell+k}\right) = \\
&= \left(g_\ell^{-\ell+k}, \hat L_-\hat L_+ g_\ell^{-\ell+k}\right) + \left(g_\ell^{-\ell+k}, \hat L_z(\hat L_z+1) g_\ell^{-\ell+k}\right) = \\
&= \underbrace{\left(\hat L_+ g_\ell^{-\ell+k}, \hat L_+ g_\ell^{-\ell+k}\right)}_{=\alpha_{k+1}} + (-\ell+k)(-\ell+k+1)\underbrace{\left(g_\ell^{-\ell+k}, g_\ell^{-\ell+k}\right)}_{=\alpha_k} = \\
&= \alpha_{k+1} + \Big[\ell(\ell+1) - (2\ell-k)(k+1)\Big]\alpha_k,
\end{aligned}$$

d'où le résultat. Notons que (5.27) implique $\alpha_{2\ell+1} = 0$, ce qui donne une démonstration alternative de la relation $\hat L_+ g_\ell^\ell = 0$. □

Exercice 60. Montrer que la solution de la relation de récurrence (5.27) est donnée par

(5.28) $$\alpha_k = \frac{k!\,(2\ell)!}{(2\ell-k)!}\,\alpha_0, \qquad k = 0,1,\ldots,2\ell.$$

Indication: une induction sur k.

Exercice 61. Montrer que

(5.29) $$\alpha_0 = 2\pi\cdot\frac{2^{\ell+1}\ell!}{(2\ell+1)!!}.$$

■ Avec la convention (5.25), on obtient

$$\alpha_0 = \left(g_\ell^{-\ell}, g_\ell^{-\ell}\right) = \int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi\;\sin\theta\;\left|g_\ell^{-\ell}(\theta,\varphi)\right|^2 = 2\pi\int_0^\pi d\theta\;(\sin\theta)^{2\ell+1}.$$

La dernière intégrale peut être calculée en utilisant la définition et quelques propriétés de la fonction bêta $B(p,q)$:

$$B(p,q) = \int_0^1 t^{p-1}(1-t)^{q-1}dt = 2\int_0^{\pi/2}(\sin\theta)^{2p-1}(\cos\theta)^{2q-1}d\theta = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}.$$

Dans notre cas $p = \ell+1$, $q = 1/2$, et donc

$$\alpha_0 = 2\pi\cdot\frac{\Gamma(\ell+1)\Gamma(1/2)}{\Gamma(\ell+1/2+1)} = 2\pi\cdot\frac{\ell!\,\cancel{\Gamma(1/2)}}{\underbrace{(\ell+1/2)(\ell-1/2)\ldots(1/2)}_{\ell+1\text{ facteurs}}\cancel{\Gamma(1/2)}} = 2\pi\cdot\frac{2^{\ell+1}\ell!}{(2\ell+1)!!},$$

où on a utilisé que $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ et que pour tout $n \in \mathbb{N}$ on a $\Gamma(n+1) = n!$. $\square$

En combinant (5.28) avec (5.29), on peut facilement montrer que

$$\alpha_k = 4\pi \cdot \frac{2^{2\ell}(\ell!)^2}{2\ell+1} \cdot \frac{k!}{(2\ell-k)!}\,, \qquad k = 0, 1, \ldots, 2\ell, \tag{5.30}$$

ce qui donne par la suite

$$\|g_\ell^m\|^2 = \alpha_{\ell+m} = 4\pi \cdot \frac{2^{2\ell}(\ell!)^2}{2\ell+1} \cdot \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}, \qquad m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell. \tag{5.31}$$

Définition 62. Soient $\{Y_\ell^m\}$ l'ensemble des fonctions suivantes:

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \frac{(-1)^m}{\|g_\ell^m\|}\, g_\ell^m(\theta,\varphi) = C_\ell^m\, \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} \left[e^{i\varphi}\left(\partial_\theta + i \operatorname{ctg}\theta\, \partial_\varphi\right)\right]^{\ell+m} (\sin\theta)^\ell\, e^{-i\ell\varphi}, \tag{5.32}$$

où $\ell = 0, 1, \ldots, \infty$ et $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$. Le coefficient C_ℓ^m est donné par

$$C_\ell^m = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\,. \tag{5.33}$$

Les fonctions $\{Y_\ell^m\}$ sont appelées les *harmoniques sphériques.*

En résumant les résultats précédents, on obtient

Théorème 63. *Les harmoniques sphériques (5.32) forment un ensemble complet et orthonormé des fonctions propres communes de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$, c'est-à-dire:*

$$\hat{L}^2 Y_\ell^m = \ell(\ell+1) Y_\ell^m, \qquad \hat{L}_z Y_\ell^m = m Y_\ell^m, \qquad \left(Y_\ell^m, Y_{\ell'}^{m'}\right) = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\,.$$

Remarque 64. Le facteur $(-1)^m$ dans la définition (5.32) ne change pas la norme de Y_ℓ^m. En effet, il a été introduit afin de respecter les conventions historiques.

Simplifions la représentation (5.32):

Exercice 65. Vérifier que pour tout $\nu \in \mathbb{C}$

$$e^{i\varphi}\Big[\partial_\theta + i \operatorname{ctg}\theta\, \partial_\varphi\Big] e^{-i\nu\varphi}\psi(\theta) = e^{-i(\nu-1)\varphi}\Big[\partial_\theta + \nu \operatorname{ctg}\theta\Big]\psi(\theta).$$

En utilisant ce résultat, montrer que

$$\begin{aligned} g_\ell^m(\theta,\varphi) = {} & e^{im\varphi}\left[\frac{d}{d\theta} + (-m+1)\operatorname{ctg}\theta\right]\left[\frac{d}{d\theta} + (-m+2)\operatorname{ctg}\theta\right] \times \ldots \\ & \ldots \times \left[\frac{d}{d\theta} + (\ell-1)\operatorname{ctg}\theta\right]\left[\frac{d}{d\theta} + \ell \operatorname{ctg}\theta\right](\sin\theta)^\ell\,. \end{aligned}$$

Exercice 66. Vérifier que pour tout $\nu \in \mathbb{C}$

$$\left[\frac{d}{d\theta} + \nu \operatorname{ctg}\theta\right]\psi(\theta) = (\sin\theta)^{-\nu}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta)^\nu\,\psi(\theta).$$

A l'aide de cette relation, montrer que

$$\begin{aligned} g_\ell^m(\theta,\varphi) &= e^{im\varphi}(\sin\theta)^m \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\right]^{\ell+m} (\sin\theta)^{2\ell} = \\ &= (-1)^m e^{im\varphi}(\sin\theta)^m \left[\frac{d^{\ell+m}}{dz^{\ell+m}}\left(z^2-1\right)^\ell\right]_{z=\cos\theta}. \end{aligned} \tag{5.34}$$

Définition 67. Les fonctions

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \frac{(\sin\theta)^m}{2^\ell \ell!}\left[\frac{d^{\,\ell+m}}{dz^{\,\ell+m}}\left(z^2-1\right)^\ell\right]_{z=\cos\theta}, \tag{5.35}$$

avec $\ell = 0,\ldots,\infty$ et $m = -\ell,\ldots,\ell$, s'appellent les *fonctions sphériques de Laplace* ou encore les *fonctions de Legendre*.

Quelques propriétés de ces fonctions:

(1) **Lien avec les harmoniques sphériques**. En comparant les formules (5.32), (5.34) et (5.35), on trouve

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = C_\ell^m\, P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}, \tag{5.36}$$

où le coefficient C_ℓ^m est donné par (5.33).

(2) **Relations d'orthogonalité**. Orthonormalité des harmoniques sphériques permet d'écrire

$$\begin{aligned}(Y_\ell^m, Y_{\ell'}^m) = \delta_{\ell\ell'} &= 2\pi\cdot C_\ell^m C_{\ell'}^m \int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta)P_{\ell'}^m(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \\ &= \frac{2\ell+1}{2}\sqrt{\frac{(\ell-m)!(\ell'-m)!}{(\ell+m)!(\ell'+m)!}}\int_{-1}^1 P_\ell^m(z)P_{\ell'}^m(z)\,dz\,,\end{aligned}$$

d'où on obtient

$$\int_{-1}^1 P_\ell^m(z)P_{\ell'}^m(z)\,dz = \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\,\delta_{\ell\ell'}\,. \tag{5.37}$$

(3) **Relations de récurrence**. D'après (5.34), nous avons

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

D'autre part par définition de $g_\ell^{m+1} = \hat{L}_+ g_\ell^m$, d'où

$$\begin{aligned}g_\ell^{m+1}(\theta,\varphi) &= 2^{\,\ell}\ell!\,(-1)^{m+1}P_\ell^{m+1}(\cos\theta)\,e^{i(m+1)\varphi} = \\ &= e^{i\varphi}\Big[\partial_\theta + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\,\partial_\varphi\Big]\,2^{\,\ell}\ell!\,(-1)^m P_\ell^m(\cos\theta)\,e^{im\varphi} = \\ &= 2^{\,\ell}\ell!\,(-1)^m e^{i(m+1)\varphi}\left[\frac{d}{d\theta} - m\,\mathrm{ctg}\,\theta\right]P_\ell^m(\cos\theta).\end{aligned}$$

Ceci implique la relation

$$\left[\frac{d}{d\theta} - m\,\mathrm{ctg}\,\theta\right]P_\ell^m(\cos\theta) + P_\ell^{m+1}(\cos\theta) = 0,$$

qui équivaut à

$$\left(\frac{d}{dz} + \frac{mz}{1-z^2}\right)P_\ell^m(z) = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}}\,P_\ell^{m+1}(z). \tag{5.38}$$

Exercice 68. Montrer que pour m pair $P_\ell^m(z)$ est un polynôme de degré ℓ en z.

Exercice 69. Démontrer la relation

$$\left(\frac{d}{dz} - \frac{mz}{1-z^2}\right)P_\ell^m(z) = -\frac{(\ell+m)(\ell+1-m)}{\sqrt{1-z^2}}\,P_\ell^{m-1}(z). \tag{5.39}$$

Indication: montrer d'abord que $\hat{L}_- g_\ell^m = (\ell+m)(\ell+1-m)g_\ell^{m-1}$ et ensuite procédez comme dans la démonstration de (5.38) ci-dessus.

Exercice 70. Montrer la relation

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

On pourra utiliser 1) relations de récurrence (5.38)–(5.39) et 2) induction sur m.

Exercice 71. En utilisant le résultat précédent, montrer que $\overline{Y_\ell^m(\theta,\varphi)} = (-1)^m Y_\ell^{-m}(\theta,\varphi)$.

Un cas particulièrement important pour les applications est celui des solutions ayant une symétrie axiale. Dans ce cas, on s'intéresse aux fonctions propres communes de $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$ qui ne dépendent pas de φ. En examinant (5.36), on voit que cette condition sélectionne parmi toutes les fonctions $\{Y_\ell^m\}$ celles avec $m=0$. On note

$$Y_\ell(\theta) = Y_\ell^0(\theta,\varphi) = C_\ell\, P_\ell(\cos\theta),$$

où $C_\ell = \sqrt{\dfrac{2\ell+1}{4\pi}}$ et $P_\ell(z)$ est le polynôme de degré ℓ défini par

$$P_\ell(z) = P_\ell^0(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\,\frac{d^\ell}{dz^\ell}\left(z^2-1\right)^\ell . \tag{5.40}$$

Nous avons en particulier:

$$\begin{aligned} P_0(z) &= 1, & P_1(z) &= z,\\ P_2(z) &= \frac{3z^2-1}{2}, & P_3(z) &= \frac{z(5z^2-3)}{2},\\ P_4(z) &= \frac{35z^4-30z^2+3}{8}, & P_5(z) &= \frac{z(63z^4-70z^2+15)}{8},\\ &\dots & &\dots \end{aligned} \tag{5.41}$$

Définition 72. Les polynômes $\{P_\ell(z)\}$ ainsi définis (avec $\ell = 0,1,\dots,\infty$) s'appellent les *polynômes de Legendre*. La relation (5.40) s'appelle la *formule de Rodrigues*.

Les polynômes de Legendre vérifient certaines relations d'orthogonalité qui s'obtiennent à partir de (5.37) en posant $m=0$:

$$\int_{-1}^{1} P_\ell^m(z) P_{\ell'}^m(z)\, dz \;=\; \frac{2}{2\ell+1}\,\delta_{\ell\ell'} . \tag{5.42}$$

D'autre part on n'a pas de relations de récurrence pour $\{P_\ell\}$ qui découlent de (5.38)–(5.39), car ces dernières formules relient des fonctions sphériques de Laplace avec la même valeur de ℓ.

Nous allons voir ci-dessous qu'il est quand même possible d'obtenir des relations de récurrence sur ℓ. Par contre elles ne découlent pas (directement) de l'algèbre du moment angulaire — dans ce sens, leur "origine" est très différente de celle des relations (3.8)–(3.9) et (5.38)–(5.39) vérifiées par les fonctions de Bessel et harmoniques sphériques respectivement.

Introduisons deux opérateurs $\hat{z}$ et $\hat{\partial}$ qui agissent sur les fonctions d'une variable z de la façon suivante:

$$(\hat{\partial} f)(z) = \frac{df}{dz}(z), \qquad (\hat{z} f)(z) = z f(z).$$

On peut facilement vérifier que $\left[\hat{\partial},\hat{z}\right] = 1$ et montrer par induction que $\left[\hat{\partial}^k,\hat{z}\right] = k\,\hat{\partial}^{k-1}$. Transformons maintenant la formule de Rodrigues pour $P_{\ell+1}(z)$ en utilisant ces relations de commutation. Nous avons d'une part:

$$
\begin{aligned}
P_{\ell+1}(z) &= \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\frac{d^{\,\ell+1}}{dz^{\,\ell+1}}\left(z^2-1\right)^{\ell+1} = \\
&= \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\frac{d^{\,\ell}}{dz^{\,\ell}}\left[\frac{d}{dz}\left(z^2-1\right)^{\ell+1}\right] = \frac{1}{2^{\ell}\ell!}\,\frac{d^{\,\ell}}{dz^{\,\ell}}\left[z\left(z^2-1\right)^{\ell}\right]. \qquad (5.43)
\end{aligned}
$$

D'autre part:

$$
\begin{aligned}
P_{\ell+1}(z) &= \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\frac{d^{\,\ell+1}}{dz^{\,\ell+1}}\left[z^2\left(z^2-1\right)^{\ell}\right] - \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\frac{d^{\,\ell+1}}{dz^{\,\ell+1}}\left(z^2-1\right)^{\ell} = \\
&= \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\hat{\partial}^{\,\ell+1}\,\hat{z}\left[z\left(z^2-1\right)^{\ell}\right] - \frac{1}{2(\ell+1)}\,\frac{d}{dz}\underbrace{\left[\frac{1}{2^{\ell}\ell!}\,\frac{d^{\,\ell}}{dz^{\,\ell}}\left(z^2-1\right)^{\ell}\right]}_{=P_\ell(z)} = \\
&= \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\Big(\underbrace{\left[\hat{\partial}^{\,\ell+1},\hat{z}\right]}_{=(\ell+1)\hat{\partial}^{\,\ell}}+\hat{z}\,\hat{\partial}^{\,\ell+1}\Big)\left[z\left(z^2-1\right)^{\ell}\right] - \frac{1}{2(\ell+1)}\,P'_\ell(z) = \\
&= \frac{1}{2}\cdot\underbrace{\frac{1}{2^{\ell}\ell!}\,\frac{d^{\,\ell}}{dz^{\,\ell}}\left[z\left(z^2-1\right)^{\ell}\right]}_{=P_{\ell+1}(z)\text{ d'après (5.43)}} + \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\hat{z}\,\hat{\partial}^{\,\ell+1}\hat{z}\,\left(z^2-1\right)^{\ell} - \frac{1}{2(\ell+1)}\,P'_\ell(z) = \\
&= \frac{1}{2}\,P_{\ell+1}(z) - \frac{1}{2(\ell+1)}\,P'_\ell(z) + \frac{1}{2^{\ell+1}(\ell+1)!}\,\hat{z}\Big(\underbrace{\left[\hat{\partial}^{\,\ell+1},\hat{z}\right]}_{=(\ell+1)\hat{\partial}^{\,\ell}}+\hat{z}\,\hat{\partial}^{\,\ell+1}\Big)\left[\left(z^2-1\right)^{\ell}\right] = \\
&= \frac{1}{2}\,P_{\ell+1}(z) - \frac{1}{2(\ell+1)}\,P'_\ell(z) + \frac{z}{2}\cdot\underbrace{\frac{1}{2^{\ell}\ell!}\,\frac{d^{\,\ell}}{dz^{\,\ell}}\left(z^2-1\right)^{\ell}}_{=P_\ell(z)} + \\
&\quad + \frac{z^2}{2(\ell+1)}\,\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{2^{\ell}\ell!}\,\frac{d^{\,\ell}}{dz^{\,\ell}}\left(z^2-1\right)^{\ell}\right] = \\
&= \frac{1}{2}\,P_{\ell+1}(z) - \frac{1}{2(\ell+1)}\,P'_\ell(z) + \frac{z}{2}\,P_\ell(z) + \frac{z^2}{2(\ell+1)}\,P'_\ell(z),
\end{aligned}
$$

d'où on obtient finalement une relation de récurrence pour $\{P_\ell\}$:

$$
P_{\ell+1}(z) = \frac{z^2-1}{\ell+1}\,P'_\ell(z) + zP_\ell(z). \qquad (5.44)
$$

Exercice 73. En partant de $P_0(z) = 1$ et en utilisant la récurrence (5.44), vérifier les formules (5.41) pour $P_{1..3}(z)$.

La relation (5.44) permet de réconstruire à partir de $P_0(z) = 1$ tout polynôme de Legendre $P_\ell(z)$. En appliquant par la suite à $P_\ell(z)$ les relations de récurrence (5.38)–(5.39), on peut obtenir des formules explicites pour tout $P_\ell^m(z)$ et pour toute harmonique sphérique $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$. Ceci résoud complétement le problème de diagonalisation simultanée des opérateurs $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_z$.