Chapitre 0 : Préambules: Moment cinétique - Rotations

1 - Moment cinétique orbital et harmoniques sphériques

1.1 Définition du moment cinétique orbital

Pour une particule d'impulsion $\vec{p}$ située en $\vec{r}$, le moment cinétique $\vec{L}$ par rapport à un point O est $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. En utilisant le principe de correspondance, on écrit:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \tag{1}$$

dont les composantes ne commutent pas:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\ \hat{L}_z \tag{2}$$

La dernière relation peut être prise comme une définition du moment cinétique orbital (ou comme une conséquence de la non-commutation du groupe des rotations, voir plus loin).

1.2 Quelques propriétés

- commutation

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \tag{3}$$

  Si les seuls degrés de liberté sont des mouvements de rotation, $\hat{L}_z$ et $\hat{\vec{L}}^2$ forment un ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC).

- Equations aux valeurs propres:

$$\hat{\vec{L}}^2\ |l,m> = \hbar^2 l(l+1)\ |l,m> \tag{4}$$

$$\hat{L}_z\ |l,m> = m\hbar\ |l,m> \tag{5}$$

  avec $< l,m|l',m' > = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$.
  Dans le cas d'un moment cinétique orbital, l et m sont entiers, $-l \leq m \leq l$.

- (définition) opérateur $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$
  $\hat{L}_\pm\ |l,m> = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\ |l, m\pm 1>$

1.3 Fonctions propres en représentation $\{|\vec{r}>\}$

L'opérateur $\hat{\vec{p}}$ en représentation $\{|\vec{r}>\}$ équivaut à $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$. Ainsi l'équation (1) s'exprime en coordonnées cartésiennes:

$$\left\{\begin{array}{lcl} L_x & = & \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y & = & \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z & = & \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{array}\right. \tag{6}$$

ou, en utilisant le système de coordonnées sphériques (r, θ, ϕ):

$$\left\{\begin{array}{lcl} L_x & = & i\hbar(\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\phi}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}) \\ L_y & = & i\hbar(-\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\sin\phi}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}) \\ L_z & = & \dfrac{\hbar}{i}(\dfrac{\partial}{\partial\phi}) \end{array}\right. \tag{7}$$

d'où

$$\left\{\begin{array}{lcl} \vec{L}^2 & = & -\hbar^2(\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \dfrac{1}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}) \\ L_\pm & = & \hbar\exp\left(\pm i\phi(\pm\dfrac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\dfrac{\partial}{\partial\phi})\right) \end{array}\right. \tag{8}$$

En représentation $\{|\vec{r}>\}$, les fonctions propres associées aux valeurs propres $l(l+1)\hbar^2$ de $\vec{L}^2$ et $m\hbar$ de L_z sont solutions des équations aux dérivées partielles:

$$\left\{\begin{array}{lcl} -\left\{\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \dfrac{1}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}\psi_{l,m}(r,\theta,\phi) & = & l(l+1)\ \psi_{l,m}(r,\theta,\phi) \\ -i\dfrac{\partial}{\partial\phi}\ \psi_{l,m}(r,\theta,\phi) & = & m\ \psi_{l,m}(r,\theta,\phi) \end{array}\right. \tag{9}$$

Dans les expressions précédentes, on remarque que r n'apparaît dans aucun opérateur différentiel: on peut donc considérer r comme un paramètre et ne tenir compte que de la dépendance en θ et ϕ: $\psi_{l,m}(r,\theta,\phi) \to f(r)\ Y_{l,m}(\theta,\phi)$.

$Y_{l,m}(\theta,\phi)$: fonction propre commune de $\vec{L}^2$ et L_z telle que:

$$\boxed{\left\{\begin{array}{lcl} \vec{L}^2\ Y_{l,m}(\theta,\phi) & = & l(l+1)\hbar^2\ Y_{l,m}(\theta,\phi) \\ L_z\ Y_{l,m}(\theta,\phi) & = & m\hbar\ Y_{l,m}(\theta,\phi) \end{array}\right.} \tag{10}$$

Une fois trouvée la solution $Y_{l,m}(\theta,\phi)$, on obtient les fonctions propres $\psi(r,\theta,\phi) = f(r)\ Y_{l,m}(\theta,\phi)$. Les conditions de normalisation sur les fonctions f et $Y_{l,m}$ peuvent être imposées séparemment:

$$\left\{\begin{array}{lcl} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\ |Y_{l,m}(\theta,\phi)|^2 d\theta & = & 1 \\ \int_0^{\infty} r^2\ |f(r)|^2 dr & = & 1 \end{array}\right. \tag{11}$$

Remarques:

- $Y_{l,m}(\theta,\phi) = F_{l,m}(\theta)e^{im\phi}$ (découle de l'équation (9b): $-i\frac{\partial}{\partial\phi}\psi_{l,m}(r,\theta,\phi) = m\ \psi_{l,m}(r,\theta,\phi)$)
- l entier, m aussi (car $Y_{l,m}(\theta,\phi=0) = Y_{l,m}(\theta,\phi=2\pi) \leftrightarrow e^{im\phi} = 1$)).

$Y_{l,m}(\theta,\phi)$: **harmoniques[1] sphériques[2]**. Elles forment une base orthogonale des fonctions de carré sommable sur la sphère de rayon unité.

Toute fonction continue $f(\theta,\phi)$ se décompose en une série d'harmoniques sphériques:

$$f(\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{l} c_{l,m}Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{12}$$

avec

$$c_{l,m} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \sin\theta\ d\theta\ Y^*_{l,m}(\theta,\phi)f(\theta,\phi) \tag{13}$$

Un développement en harmoniques sphériques est donc l'équivalent d'un développement en série de Fourier appliqué aux fonctions angulaires.

[1]fonctions dont le laplacien est nul

[2]très utiles pour résoudre des problèmes invariants par rotation

2 - Moment cinétique et rotations (CT p.697-719)

2.1 Rotations géométriques

On considère la rotation $\mathfrak{R}_{\vec{n}}(\alpha)$ d'un angle α autour de la direction $\vec{n}$ ($\vec{n}$: vecteur unitaire):

$$\vec{\alpha} = \alpha\, \vec{n} \tag{14}$$

Remarque: le groupe des rotations n'est pas commutatif:

$$\mathfrak{R}_{\vec{n}}(\alpha)\mathfrak{R}_{\vec{n}'}(\alpha^{'}) \neq \mathfrak{R}_{\vec{n}'}(\alpha^{'})\mathfrak{R}_{\vec{n}}(\alpha) \tag{15}$$

Le vecteur transformé par la rotation infinitésimale $\mathfrak{R}_{\vec{n}}(d\alpha)$ d'un vecteur $\vec{OM}$ donné s'écrit:

$$\mathfrak{R}_{\vec{n}}(d\alpha)\vec{OM} = \vec{OM} + d\alpha\; \vec{n} \times \vec{OM} \tag{16}$$

2.2 Opérateurs rotations dans l'espace des états

Exemple d'une particule sans spin.

Effectuons sur le système une rotation $\mathfrak{R}$ qui fait correspondre au point $\vec{r}$ le point $\vec{r}\,'$ tel que:

$$\vec{r}\,' = \mathfrak{R}\; \vec{r} \tag{17}$$

On suppose que la valeur de la fonction d'onde est inchangée par la rotation:

$$\psi^{'}(\vec{r}\,') = \psi(\vec{r}) \tag{18}$$

c'est-à-dire :

$$\psi^{'}(\vec{r}\,') = \psi(\mathfrak{R}^{-1}\vec{r}\,') \tag{19}$$

L'opérateur rotation $\hat{R}$ associé à la rotation $\mathfrak{R}$ considérée est défini par:

$$|\psi^{'} >= \hat{R}\; |\psi > \tag{20}$$

L'égalité (19) caractérise son action en représentation $\{|\vec{r} >\}$:

$$< \vec{r}\; |\hat{R}|\psi >=< \mathfrak{R}^{-1}\vec{r}\; |\psi > \tag{21}$$

Propriétés: $\hat{R}$ est un opérateur linéaire et unitaire. On a $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^{\dagger}$.

<u>Opérateurs rotation infinitésimale:</u>

Soit une rotation infinitésimale autour de O_z, $\mathfrak{R}_{\vec{e_z}}(d\alpha)$ appliquée à une particule dont l'état est décrit par la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$. La fonction d'onde après rotation vérifie (d'après (19)):

$$\psi^{'}(\vec{r}) = \psi[\; \mathfrak{R}^{-1}_{\vec{e_z}}(d\alpha)\; \vec{r}\;] \tag{22}$$

Les composantes de $\mathfrak{R}^{-1}_{\vec{e_z}}(d\alpha)$ se calculent à partir de (16):

$$\mathfrak{R}^{-1}_{\vec{e_z}}(d\alpha)\vec{r} = \mathfrak{R}_{-\vec{e_z}}(d\alpha)\vec{r} = \vec{r} - d\alpha\; \vec{e_z} \times \vec{r} = \left\{ \begin{array}{r} x + y\; d\alpha \\ y - x\; d\alpha \\ z \end{array} \right. \tag{23}$$

On peut donc écrire (22) sous la forme:

$$\psi^{'}(x, y, z) = \psi(x + y\ d\alpha, y - x\ d\alpha, z) \tag{24}$$

ce qui donne, au premier ordre en $d\alpha$:

$$\psi^{'}(x, y, z) = \psi(x, y, z) + d\alpha\ [y\frac{\partial \psi}{\partial x} - x\frac{\partial \psi}{\partial y}] = \psi(x, y, z) - d\alpha\ \underbrace{[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}]}_{\frac{i}{\hbar}[\hat{X}\ \hat{P}_y - \hat{Y}\ \hat{P}_x]\ \text{(en rep. } \{\vec{r}\})}\psi(x, y, z) \tag{25}$$

d'où:

$$\psi^{'}(\vec{r}) =< \vec{r}\ |\psi^{'}> =< \vec{r}\ |(1 - \frac{i}{\hbar}\ d\alpha\ \hat{L}_z)|\psi> \tag{26}$$

Or, par définition de $\hat{R}_{\vec{e_z}}(d\alpha)$,

$$|\psi^{'}> = \hat{R}_{\vec{e_z}}(d\alpha)\ |\psi> \tag{27}$$

d'où:

$$\hat{R}_{\vec{e_z}}(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar}\ d\alpha\ \hat{L}_z \tag{28}$$

De façon générale, pour une rotation infinitésimale autour d'un axe quelconque:

$$\boxed{\hat{R}_{\vec{n}}(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar}\ d\alpha\ \hat{\vec{L}} \cdot \vec{n}} \tag{29}$$

Remarque: Illustrons, dans un cas particulier, la structure non-commutative du groupe des rotations:

$$\mathfrak{R}_{\vec{e_y}}(-d\alpha')\mathfrak{R}_{\vec{e_x}}(d\alpha)\mathfrak{R}_{\vec{e_y}}(d\alpha')\mathfrak{R}_{\vec{e_x}}(-d\alpha) = \mathfrak{R}_{\vec{e_z}}(d\alpha d\alpha') \tag{30}$$

Cette relation implique que, au premier ordre par rapport à chacun des angles $d\alpha$ et $d\alpha'$:

$$[\ 1 + \frac{i}{\hbar}\ d\alpha^{'}\ \hat{L}_y\ ][\ 1 - \frac{i}{\hbar}\ d\alpha\ \hat{L}_x\ ][\ 1 - \frac{i}{\hbar}\ d\alpha^{'}\ \hat{L}_y\ ][\ 1 + \frac{i}{\hbar}\ d\alpha\ \hat{L}_x\ ] = 1 - \frac{i}{\hbar}d\alpha d\alpha^{'}\ \hat{L}_z \tag{31}$$

En développant le premier membre et en identifiant les coefficients des termes en $d\alpha\ d\alpha'$, on trouve:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \tag{32}$$

Ainsi les relations de commutation du moment cinétique orbital d'une particule apparaissent comme des conséquences de la structure non-commutative du groupe des rotations géométriques.

Opérateurs de rotation finie

En exploitant le fait que $\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha + d\alpha) = \hat{R}_{\vec{n}}(\alpha)\ \hat{R}_{\vec{n}}(d\alpha)$, on obtient:

$$\boxed{\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\ \alpha\ \hat{\vec{L}}\cdot\vec{n}}} \tag{33}$$