CHAPITRE VI

Le Moment cinétique

Le moment cinétique a été introduit au chapitre V. C'était de façon expérimentale.

Nous reprenons l'étude de cette grandeur physique en utilisant de façon méthodique les outils développés au cours des chapitres précédents.

Nous avons choisi de présenter cet important problème par une technique d'opérateurs plutôt qu'en résolvant les équations différentielles auxquelles conduit la recherche des fonctions propres et des valeurs des opérateurs associés.

I Recherche d'un ensemble d'opérateurs qui commutent

I-1 Grandeurs physiques et opérateurs: Un espoir déçu

Le moment cinétique est un vecteur à trois composantes. Chacune des composantes $\mathscr{L}_x$, $\mathscr{L}_y$, $\mathscr{L}_z$ est une grandeur physique mesurable. Leur correspondent trois opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}_x$, $\widehat{\mathbf{L}}_y$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$.

Les opérateurs se construisent suivant le principe de correspondance. L'opérateur $\widehat{\mathbf{L}}_z$ a été construit au chapitre III. Les autres opérateurs s'en déduisent par permutation circulaire:

$$\widehat{\mathbf{L}}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad \widehat{\mathbf{L}}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \qquad \widehat{\mathbf{L}}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

On peut vérifier facilement que les trois opérateurs obéissent aux relations de commutation:

$$\left[\widehat{\mathbf{L}}_x , \widehat{\mathbf{L}}_y\right] = i\hbar\,\widehat{\mathbf{L}}_z \qquad \left[\widehat{\mathbf{L}}_y , \widehat{\mathbf{L}}_z\right] = i\hbar\,\widehat{\mathbf{L}}_x \qquad \left[\widehat{\mathbf{L}}_z , \widehat{\mathbf{L}}_x\right] = i\hbar\,\widehat{\mathbf{L}}_y$$

Ce qui signifie qu'il n'existe pas de base diagonalisant simultanément deux de ces opérateurs et a fortiori les trois à la fois.

Si une base diagonalise $\widehat{\mathbf{L}}_z$, alors elle ne diagonalise ni $\widehat{\mathbf{L}}_y$ ni $\widehat{\mathbf{L}}_x$. C'est bien sûr un peu décevant. Il faut se contenter de pouvoir prédire à coup sûr et au mieux le résultat de mesure d' une seule des composantes du moment cinétique. Cela signifie en particulier qu' on ne peut en aucun cas prévoir à coup sûr le vecteur moment cinétique.

C'est le résultat expérimental qui avait été observé au chapitre V.

I-2 Un espoir partiellement retrouvé

En fait la situation est moins désespérée qu'il ne paraît car il se trouve que si les opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}_x$, $\widehat{\mathbf{L}}_y$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$ ne commutent pas entre eux, l'opérateur carré du moment cinétique $\widehat{\mathbf{L}}^2 = \widehat{\mathbf{L}}_x^2 + \widehat{\mathbf{L}}_y^2 + \widehat{\mathbf{L}}_z^2$ commute avec chacun d'eux.

$$\left[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}_x\right] = 0 \qquad \left[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}_y\right] = 0 \qquad \left[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}_z\right] = 0$$

Cela se vérifie facilement en tenant compte de la distributivité:

$$\left[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}_x\right] = \left[\widehat{\mathbf{L}}_x^2 + \widehat{\mathbf{L}}_y^2 + \widehat{\mathbf{L}}_z^2, \widehat{\mathbf{L}}_x\right] = \left[\widehat{\mathbf{L}}_x^2 , \widehat{\mathbf{L}}_x\right] + \left[\widehat{\mathbf{L}}_y^2 , \widehat{\mathbf{L}}_x\right] + \left[\widehat{\mathbf{L}}_z^2, \widehat{\mathbf{L}}_x\right]$$

et en utilisant les relations de commutation écrites au paragraphe précédent.

Il existe donc une base qui diagonalise simultanément $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_z$ mais qui ne diagonalise a priori ni $\hat{\mathbf{L}}_y$ ni $\hat{\mathbf{L}}_x$.

Il existe une seconde base qui diagonalise $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_x$ et une troisième base qui diagonalise $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_y$.

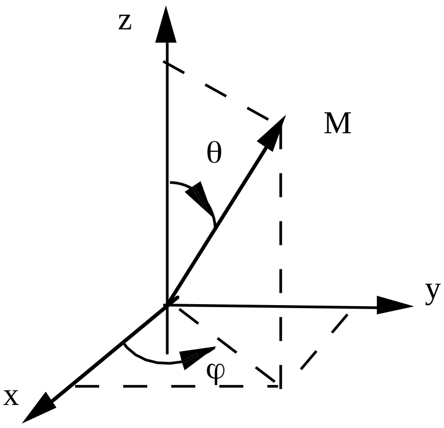
Pour des raisons de commodité qui tiennent à la forme particulièrement simple de $\hat{\mathbf{L}}_z$ en coordonnées sphériques, nous choisissons de travailler dans la base qui diagonalise $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_z$.

Il serait bien sûr tout à fait équivalent de choisir la base qui diagonalise $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_x$ ou celle qui diagonalise $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_y$.

I-3-Expressions des opérateurs en coordonnées sphériques

En effectuant le changement de variable:

$x = r \sin\theta \cos\varphi$
$y = r \sin\theta \sin\varphi$
$z = r \cos \theta$



on trouve:

$$\hat{\mathbf{L}}_x = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\varphi}{\operatorname{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \qquad \hat{\mathbf{L}}_y = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\sin\varphi}{\operatorname{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$\hat{\mathbf{L}}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad \hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\operatorname{tg}\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

Des expressions peu avenantes qui présentent toutefois l'avantage de montrer que ces opérateurs ne dépendent que des variables angulaires θ et φ.

I-4 Position du problème

Nous sommes à la recherche des fonctions propres communes à $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_z$ et des valeurs propres correspondantes, c'est à dire des fonctions $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ telles que:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_\ell^m(\theta,\varphi) = a_\ell \, Y_\ell^m(\theta,\varphi) \qquad \text{et} \qquad \hat{\mathbf{L}}_z Y_\ell^m(\theta,\varphi) = b_m \, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

Dans ces expressions, b_m a la dimension d'un moment cinétique, c'est à dire de $\hbar$. a_ℓ a la dimension d'un carré de moment cinétique, c'est à dire de $\hbar^2$.

Sans restreindre la généralité, on peut écrire $b_m = m\,\hbar$ où a priori m est un réel quelconque. Par ailleurs, puisque tout réel positif peut s'écrire de façon unique $\ell\,(\ell+1)$ où ℓ est un réel positif, on peut sans restreindre la généralité poser $a_\ell = \ell\,(\ell+1)\,\hbar^2$.

Le problème est donc de trouver les fonctions $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ et les nombres ℓ réels positifs et m réels tels que:

$$\widehat{\mathbf{L}}^2\, Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \ell\,(\ell+1)\,\hbar^2\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$\widehat{\mathbf{L}}_z\, Y_\ell^m(\theta,\varphi) = m\,\hbar\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

<u>I-5 Fonctions d'onde</u>

Nous avons ignoré jusqu'à présent la variable r. Il est évident que puisque les opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$ ne dépendent que de θ et de φ, toute fonction du type:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

où R ne dépend que de la variable r est fonction propre de $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$.

La condition de normation s'écrit:

$$\iiint \psi^*(r,\theta,\varphi)\,\psi(r,\theta,\varphi)\,d\tau = \int_0^\infty R^*(r)\,R(r)\,r^2\,dr \iint Y_\ell^{m\,*}(\theta,\varphi)\,Y_\ell^m(\theta,\varphi)\,\sin\theta\,d\theta\,d\varphi = 1$$

Afin de standardiser les $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$, on choisit de normaliser indépendamment la partie en r et les parties angulaires et d'écrire:

$$\int_0^\infty R^*(r)\,R(r)\,r^2\,dr = 1$$

$$\iint Y_\ell^{m\,*}(\theta,\varphi)\,Y_\ell^m(\theta,\varphi)\,\sin\theta\,d\theta\,d\varphi = 1$$

Dans le sous-espace restreint aux variables θ et φ, $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$ forment un ensemble complet d'opérateurs qui commutent. Les fonctions propres communes $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ forment une base.

Les conditions d'orthogonalité et de normalisation se rassemblent sous:

$$\left\langle Y_\ell^m(\theta,\varphi) \,\middle|\, Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\varphi) \right\rangle = \int Y_\ell^{m\,*}(\theta,\varphi)\,Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\varphi)\,\sin\theta\,d\theta\,d\varphi = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'}$$

<u>II Recherche des valeurs propres de $\widehat{\mathbf{L}}_z$</u>

L'équation aux valeurs propres de $\widehat{\mathbf{L}}_z$ s'écrit simplement:

$$\widehat{\mathbf{L}}_z\, Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_\ell^m(\theta,\varphi) = m\,\hbar\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

dont la solution est :

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

Puisque cette fonction doit être périodique en φ et de période 2π,

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi+2\pi)$$

Ce qui impose $e^{i m 2\pi} = 1$ et donc:

$$\boxed{m = \text{entier}}$$

La composante $\mathscr{L}_z$ du moment cinétique ne peut prendre comme valeur que $m\hbar$ où m est un nombre entier positif, négatif ou nul.

Il s'agit tout simplement de la condition de quantification de Bohr.

III Recherche des valeurs propres de $\widehat{\mathbf{L}}^2$

Une première méthode consiste à résoudre l'équation différentielle aux valeurs propres de $\widehat{\mathbf{L}}^2$. Cependant vu l'expression de cet opérateur, se lancer dans une telle résolution n'est pas très encourageant.

Une seconde méthode consiste à générer , à partir d'un nombre restreint de fonctions propres particulières, l'ensemble des fonctions propres communes à $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$. C'est la méthode que nous proposons.

III-1 Opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}_+$ et $\widehat{\mathbf{L}}_-$

Soient les deux opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}_+$ et $\widehat{\mathbf{L}}_-$ définis par:

$$\widehat{\mathbf{L}}_+ = \widehat{\mathbf{L}}_x + i\,\widehat{\mathbf{L}}_y \qquad \text{et} \qquad \widehat{\mathbf{L}}_- = \widehat{\mathbf{L}}_x - i\,\widehat{\mathbf{L}}_y$$

Puisque $\widehat{\mathbf{L}}_x$ et $\widehat{\mathbf{L}}_y$ représentant des grandeurs physiques mesurables sont hermitiens ($\left(\widehat{\mathbf{L}}_x\right)^+ = \widehat{\mathbf{L}}_x$), $\widehat{\mathbf{L}}_+$ et $\widehat{\mathbf{L}}_-$ ne le sont pas.
Ces opérateurs sont cependant adjoints l'un de l'autre:

$$\left(\widehat{\mathbf{L}}_+\right)^+ = \widehat{\mathbf{L}}_- \quad \text{et} \quad \left(\widehat{\mathbf{L}}_-\right)^+ = \widehat{\mathbf{L}}_+$$

Aussi, il s'ensuit que si ϕ et φ sont deux fonctions de $\mathscr{E}$:

$$\langle \widehat{\mathbf{L}}_+ \phi \mid \varphi \rangle = \langle \phi \mid \widehat{\mathbf{L}}_- \varphi \rangle \quad \text{et} \quad \langle \widehat{\mathbf{L}}_- \phi \mid \varphi \rangle = \langle \phi \mid \widehat{\mathbf{L}}_+ \varphi \rangle$$

$\widehat{\mathbf{L}}_+$ et $\widehat{\mathbf{L}}_-$ ne correspondent pas à des grandeurs physiques et sont de simples intermédiaires de calcul.

III-2 Relations de commutation

Les opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}_+$ et $\widehat{\mathbf{L}}_-$ satisfont à un certain nombre de relations de commutation:

$$\left[\widehat{\mathbf{L}}^2 , \widehat{\mathbf{L}}_+\right] = 0 \qquad\qquad \left[\widehat{\mathbf{L}}^2 , \widehat{\mathbf{L}}_-\right] = 0$$
$$\left[\widehat{\mathbf{L}}_\mathbf{z} , \widehat{\mathbf{L}}_+\right] = \hbar\, \widehat{\mathbf{L}}_+ \qquad\qquad \left[\widehat{\mathbf{L}}_\mathbf{z} , \widehat{\mathbf{L}}_-\right] = -\hbar\, \widehat{\mathbf{L}}_-$$

On note aussi que:

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = \frac{1}{2}\left[\widehat{\mathbf{L}}_+ \widehat{\mathbf{L}}_- + \widehat{\mathbf{L}}_- \widehat{\mathbf{L}}_+\right] + \widehat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}^2$$

Ces relations de commutation se vérifient sans trop de difficulté à partir des relations de commutation élémentaires de $\widehat{\mathbf{L}}^2$, $\widehat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}$, $\widehat{\mathbf{L}}_\mathbf{x}$ et $\widehat{\mathbf{L}}_\mathbf{y}$

III-3-Propriété fondamentale I

Si $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ est fonction propre de $\hat{\mathbf{L}}^2$ pour la valeur propre $\ell\ (\ell+1)\ \hbar^2$ alors les fonctions $\hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ et $\hat{\mathbf{L}}_-\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ sont fonctions propres de $\hat{\mathbf{L}}^2$ avec la même valeur propre.

En effet vu les relations de commutation il vient:

$$\hat{\mathbf{L}}^2\ \hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \hat{\mathbf{L}}_+\ \hat{\mathbf{L}}^2\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \hat{\mathbf{L}}_+\ \ell\ (\ell+1)\ \hbar^2\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \ell\ (\ell+1)\ \hbar^2\ \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

Soit:

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}}^2\ [\ \hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)\ ] = \ell\ (\ell+1)\ \hbar^2\ [\ \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi)\ ]}$$

III-4-Propriété fondamentale II

Si $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ est fonction propre de $\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}$ pour la valeur propre $m\,\hbar$ alors les fonctions $\hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ et $\hat{\mathbf{L}}_-\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ sont fonctions propres de $\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}$ pour les valeurs propres respectives $(m+1)\hbar$ et $(m-1)\ \hbar$.

Au vu des relations de commutation $\left[\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}\ ,\ \hat{\mathbf{L}}_+\right] = \hbar\ \hat{\mathbf{L}}_+$:

$$\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}\ \hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \hat{\mathbf{L}}_+\ \hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) + \hbar\ \hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = (m+1)\,\hbar\ \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}\ [\hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)] = (m+1)\,\hbar\ [\ \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi)\ ]}$$

De même en utilisant la relation de commutation $\left[\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}\ ,\ \hat{\mathbf{L}}_-\right] = -\ \hbar\ \hat{\mathbf{L}}_-$

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}\ [\hat{\mathbf{L}}_-\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)\ ] = (m-1)\,\hbar\ [\ \hat{\mathbf{L}}_-\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)\ ]}$$

III-5 Résultat de l'application de $\hat{\mathbf{L}}_+$ et $\hat{\mathbf{L}}_-$

Considérons une fonction $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ fonction propre de $\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}$ et $\hat{\mathbf{L}}^2$ pour les valeurs propres $m\hbar$ et $\ell\ (\ell+1)\ \hbar^2$.

Vu les propriétés de $\hat{\mathbf{L}}_+$ et $\hat{\mathbf{L}}_-$, $\hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ est fonction propre de $\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}$ et $\hat{\mathbf{L}}^2$ pour les valeurs propres $(m+1)\hbar$ et $\ell\ (\ell+1)\ \hbar^2$.

$\hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ s'identifie, à une constante près, à $Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi)$:

$$\hat{\mathbf{L}}_+\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = C_m^+\ Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi)$$

De même $\hat{\mathbf{L}}_- Y_l^m(\theta,\varphi)$ est fonction propre de $\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z}$ et $\hat{\mathbf{L}}^2$ pour les valeurs propres $(m-1)\hbar$ et $\ell\ (\ell+1)\ \hbar^2$.

$\hat{\mathbf{L}}_-\ Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ s'identifie, à une constante près, à $Y_\ell^{m-1}(\theta,\varphi)$:

$$\hat{\mathbf{L}}_-\ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = C_m^-\ Y_\ell^{m-1}(\theta,\varphi)$$

Les conditions de normalisation de $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ et $Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi)$ conduisent à:

$$\left\langle \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi) \middle| \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi) \right\rangle = |C_m^+|^2 \left\langle Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi) \middle| Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi) \right\rangle$$

Soit en tenant compte du fait que $\hat{\mathbf{L}}_+$ et $\hat{\mathbf{L}}_-$ sont adjoints:

$$|C_m^+|^2 = \left\langle Y_\ell^m(\theta,\varphi) \middle| \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi) \right\rangle$$

De même:

$$|C_m^-|^2 = \left\langle Y_\ell^m(\theta,\varphi) \middle| \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- Y_\ell^m(\theta,\varphi) \right\rangle$$

Calculons $\hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+$:

$$\hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ = (\hat{\mathbf{L}}_x - i\,\hat{\mathbf{L}}_y)(\hat{\mathbf{L}}_x + i\,\hat{\mathbf{L}}_y) = \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 + \mathbf{i}\,(\hat{\mathbf{L}}_x \hat{\mathbf{L}}_y - \hat{\mathbf{L}}_y \hat{\mathbf{L}}_x)$$

Soit en tenant compte de la relation de commutation $\left[\hat{\mathbf{L}}_x , \hat{\mathbf{L}}_y\right] = i\,\hbar\,\hat{\mathbf{L}}_z$ et de la relation $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 + \hat{\mathbf{L}}_z^2$:

$$\hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_z^2 - \hbar\,\hat{\mathbf{L}}_z$$

Et :

$$\hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \left(\ell\,(\ell+1) - m^2 - m\right)\hbar^2\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

Ainsi:

$$|c_m^+|^2 = \left\langle Y_\ell^m(\theta,\varphi) \middle| \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi) \right\rangle = \left(\ell\,(\ell+1) - m^2 - m\right)\hbar^2 \left\langle Y_\ell^m(\theta,\varphi) \middle| Y_\ell^m(\theta,\varphi) \right\rangle$$

Soit finalement à un facteur de phase près:

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\ell\,(\ell+1) - m\,(m+1)}\;\hbar\; Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi)}$$

de même:

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}}_- Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\ell\,(\ell+1) - m\,(m-1)}\;\hbar\; Y_\ell^{m-1}(\theta,\varphi)}$$

III-6 Détermination des valeurs propres de $\hat{\mathbf{L}}^2$

Il apparaît donc que partant de $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$, on engendre:

à l'aide de $\hat{\mathbf{L}}_+$ une suite de $Y_\ell^{m+1}(\theta,\varphi)$, $Y_\ell^{m+2}(\theta,\varphi)$, etc…

à l'aide de $\hat{\mathbf{L}}_-$ une suite de $Y_\ell^{m-1}(\theta,\varphi)$, $Y_\ell^{m-2}(\theta,\varphi)$, etc…

$$0 \xleftarrow{\hat{\mathbf{L}}_-} Y_\ell^{m''} \cdots\; Y_\ell^{m-1} \xleftarrow{\hat{\mathbf{L}}_-} Y_\ell^{m} \xrightarrow{\hat{\mathbf{L}}_+} Y_\ell^{m+1} \xrightarrow{\hat{\mathbf{L}}_+} Y_\ell^{m+2} \cdots\; Y_\ell^{m'} \xrightarrow{\hat{\mathbf{L}}_+} 0$$

Partant d'une fonction propre commune à $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_z$ pour les valeurs propres $\ell\,(\ell+1)\,\hbar^2$ et $m\,\hbar$, $\hat{\mathbf{L}}_+$ engendre une nouvelle fonction propre commune à $\hat{\mathbf{L}}^2$ et $\hat{\mathbf{L}}_z$ pour la même valeur propre de $\hat{\mathbf{L}}^2$ mais pour une valeur propre incrémentée de $\hbar$ pour $\hat{\mathbf{L}}_z$.

A cette génération de $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$, il y a toutefois une limite.

Elle est imposée par le fait que le carré du moment cinétique est nécessairement supérieur au carré d'une de ses composantes. Cela signifie que ℓ étant donné:

$$|m| \le \sqrt{\ell\,(\ell+1)}$$

Il existe donc un m' satisfaisant à cette condition, tel que m'+1 n'y satisfasse plus.
$\widehat{\mathbf{L}}_+$ appliqué à $Y_\ell^{m'}(\theta,\varphi)$ ne doit donc pas pouvoir engendrer un $Y_\ell^{m'+1}(\theta,\varphi)$
Puisque:

$$\widehat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^{m'}(\theta,\varphi) = \sqrt{\ell(\ell+1) - m'(m'+1)}\ \hbar\ Y_\ell^{m'+1}(\theta,\varphi)$$

Il suffit que pour ce m':

$$\left| C_+^{m'} \right| = \sqrt{\ell(\ell+1) - m'(m'+1)} = 0$$

Ce qui est réalisable pour:

$$m' = \ell$$

La valeur maximale que peut prendre m est la valeur entière $+\ell$

Le même raisonnement peut être repris avec $\widehat{\mathbf{L}}_-$.

Il existe une valeur m'' telle que m''-1 ne satisfasse plus à la condition:

$$|m| \le \sqrt{\ell(\ell+1)}$$

$\widehat{\mathbf{L}}_-$ appliqué à $Y_\ell^{m''}(\theta,\varphi)$ ne doit donc pas pouvoir engendrer un $Y_\ell^{m''-1}(\theta,\varphi)$
Puisque

$$\widehat{\mathbf{L}}_- Y_\ell^{m''}(\theta,\varphi) = \sqrt{\ell(\ell+1) - m''(m''-1)}\ \hbar\ Y_\ell^{m''-1}(\theta,\varphi)$$

Il suffit que:

$$\left| C_-^{m''} \right| = \sqrt{\ell(\ell+1) - m''(m''-1)} = 0$$

Ce qui est réalisable pour:

$$m'' = -\ell$$

la valeur minimale que peut prendre m est la valeur entière $m = -\ell$

Ainsi l et m sont des entiers.
m peut prendre toutes les valeurs entières comprises entre $-\ell$ et $+\ell$.

$$\boxed{-\ell \le m \le \ell}$$

Le carré du moment cinétique ne peut prendre que les valeurs $\ell(\ell+1)\hbar^2$ où l est un entier positif ou nul.

III -7 Représentation de $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$

Les opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$ forment un ensemble complet d'opérateurs qui commutent.

Il existe une base qui diagonalise simultanément $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{L}}_z$. Cette base est l'ensemble des fonctions $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ appelées harmoniques sphériques.

ℓ peut prendre toutes les valeurs entières positives ou nulles.
m ne peut prendre que les valeurs comprises entre $-\ell$ et $+\ell$.

Pour une valeur de ℓ, il y a $2\ell+1$ valeurs de m.

Les $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ découpent l'espace des fonctions de θ et de φ en sous espaces propres $\mathscr{E}(\ell)$ de $\hat{\mathbf{L}}^2$. Chaque sous espace propre $\mathscr{E}(\ell)$ correspond à une valeur de ℓ. Il est donc $2\ell+1$ fois dégénéré.

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \qquad\qquad\qquad\qquad \hat{\mathbf{L}}_z$$

$$\hbar^2\left(\begin{array}{c|ccc|ccccc|c}
0 &&&&&&&&& \\ \hline
 & 2 &&&&&&&& \\
 && 2 &&&&&&& \\
 &&& 2 &&&&&& \\ \hline
 &&&& 6 &&&&& \\
 &&&&& 6 &&&& \\
 &&&&&& 6 &&& \\
 &&&&&&& 6 && \\
 &&&&&&&& 6 & \\ \hline
 &&&&&&&&& 12
\end{array}\right)
\qquad
\hbar\left(\begin{array}{c|ccc|ccccc|c}
0 &&&&&&&&& \\ \hline
 & -1 &&&&&&&& \\
 && 0 &&&&&&& \\
 &&& 1 &&&&&& \\ \hline
 &&&& -2 &&&&& \\
 &&&&& -1 &&&& \\
 &&&&&& 0 &&& \\
 &&&&&&& 1 && \\
 &&&&&&&& 2 & \\ \hline
 &&&&&&&&& -3
\end{array}\right)$$

Et une fonction quelconque de θ et de φ peut s'écrire:

$$g(\theta,\varphi) = \sum_{\ell=0}^{\ell=\infty}\ \sum_{m=-\ell}^{m=+\ell} c_\ell^m\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

Où:

$$c_\ell^m = \int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} Y_\ell^{m^*}(\theta,\varphi)\, g(\theta,\varphi) \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$

IV-Les Harmoniques sphériques.

IV-1-Construction des harmoniques sphériques

Les harmoniques sphériques sont de la forme:

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = f_\ell^m(\theta)\, e^{i m\varphi}$$

or :

$$\hat{\mathbf{L}}_+ Y_\ell^\ell(\theta,\varphi) = \hat{\mathbf{L}}_+\ f_\ell^\ell(\theta)\, e^{i\ell\varphi} = 0$$

où:

$$\hat{\mathbf{L}}_+ = \hat{\mathbf{L}}_x + i\hat{\mathbf{L}}_y = \hbar\, e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{cotg}(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

il s'ensuit:

$$\hbar\, e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{cotg}(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] f_\ell^\ell(\theta)\, e^{i\ell\varphi} = 0$$

soit:

$$\left[\frac{\partial}{\partial\theta} - \ell \operatorname{cotg}(\theta)\right] f_\ell^\ell(\theta) = 0$$

et en tenant compte de:

$$\operatorname{cotg}(\theta)\ d\theta = \frac{d\ \sin\theta}{\sin\theta}$$

il vient:

$$f_\ell^\ell(\theta) = \alpha_\ell \ (\sin\theta)^\ell$$

où la constante de normalisation se calcule et s'écrit:

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

Il est alors possible de générer les autres harmoniques sphériques correspondant au même ℓ en appliquant successivement $\widehat{\mathbf{L}}_-$.

$$\widehat{\mathbf{L}}_- = \widehat{\mathbf{L}}_x - i\widehat{\mathbf{L}}_y = \hbar\, e^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot g\,\theta \ \frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

IV-2-Quelques Les harmoniques sphériques

On trouve dans tout formulaire élémentaire de mathématique:

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \ \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \ \sin\theta \ \ e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0 = \mp\sqrt{\frac{5}{16\pi}} \quad (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \ \sin\theta \ \cos\theta \ e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm2} = \mp\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \ \sin^2\theta \ \ e^{\pm 2 i\varphi}$$

IV- 3 Représentation des harmoniques sphériques

Imaginons une particule décrite par la fonction d'onde

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$$

R(r), est relative à la distribution radiale de la probabilité de présence. Elle donne des renseignements sur la distance qui sépare (en terme probabiliste) la particule de l'origine, mais elle ne dit rien sur la direction de l'espace où l'on a le plus de chance de trouver la particule.

A l'opposé, les harmoniques sphériques sont relatives à la distribution angulaire des probabilités de présence de la particule.

Plus $\left|Y_\ell^m(\theta,\varphi)\right|^2$ est important, plus la probabilité de trouver la particule décrite par la fonction d'onde $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ dans la direction (θ,φ) est importante.

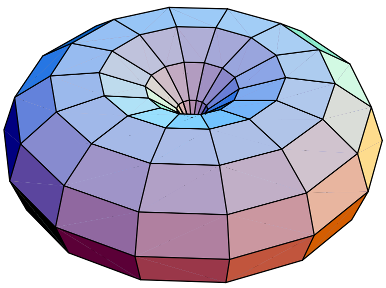
Il est donc d'usage de représenter les harmoniques sphériques par des surfaces dont les points situés dans la direction (θ,φ) sont séparés de l'origine par la "distance" $\left|Y_\ell^m(\theta,\varphi)\right|^2$. Cette "distance" n'a rien à voir avec la partie radiale et n'est pas une distance physique, elle n'est là que pour faire sentir la directionalité de la probabilité de présence. L'extension spatiale est donnée par $|R(r)|^2$

Tracer de telles surface n'est pas tâche difficile si l'on est muni d'un logiciel de mathématique tel que mathématica qui contient les harmoniques sphériques comme fonctions résidentes, au même titre que les sinus ou cosinus:

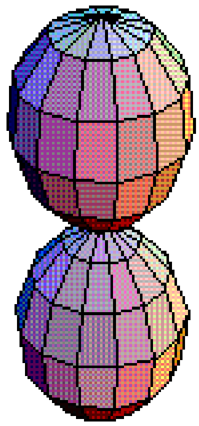
$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \textbf{SphericalHarmonicY}\ (\boldsymbol{\ell}, \mathbf{m}, \mathbf{teta}, \mathbf{phi})$$

pour représenter $Y_1^0(\theta,\varphi)$, il suffit de faire:

```
ParametricPlot3D  [{ Abs[SphericalHarmonicY [1,0,u,t]]^2 Cos[t] Sin[u],
 Abs[SphericalHarmonicY [1,0,u,t]]^2 Sin[t] Sin[u] , Abs[SphericalHarmonicY [1,0,u,t]]^2 Cos[u]},
{t,0,2 Pi},{u,0.0001,3.14}, Boxed->False]
```



Représentation de $Y_1^{\pm 1}(\theta,\varphi)$



Représentation de $Y_1^0(\theta,\varphi)$