Faculté de physique et ingénierie
Université de Strasbourg

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

TD6

Jean-Pascal Lavoine

Transcrit par
PIERRE GUICHARD

L3 Semestre 5 2020

Éléments pour ce TD

Soit le moment cinétique $\vec{J}$ l'ensemble de trois observables $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$ et $\hat{J}_z$

$$\hat{\vec{J}}^2 |kjm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |kjm\rangle$$

$$\hat{J}_x |kjm\rangle = m\hbar |kjm\rangle \qquad \hat{J}_y |kjm\rangle = m\hbar |kjm\rangle \qquad \hat{J}_z |kjm\rangle = m\hbar |kjm\rangle$$

où $-j \leq m \leq j$.

$$J_+ |kjm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, |kjm+1\rangle$$
$$J_- |kjm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, |kjm-1\rangle$$

Exercice 1

Par définition, une observable $\vec{V}$ est vectorielle si ses trois composantes satisfont les relations de commutations suivantes :

$$\begin{aligned}
[J_x, V_x] &= 0 \\
[J_x, V_y] &= i\hbar V_z \\
[J_x, V_z] &= -i\hbar V_y
\end{aligned}$$

ainsi que celles qui s'en déduisent par permutation circulaires des indices x, y et z. $\vec{J}$ est le moment cinétique de composantes J_x, J_y et J_z.

1. On introduit les opérateurs V_+, V_-, J_+ et J_- définis par

$$V_\pm = V_x \pm iV_y \qquad\qquad J_\pm = J_x \pm iJ_y$$

Montrer que

$$\begin{aligned}
[J_+, V_+] &= [J_-, V_-] = 0 \\
[J_+, V_-] &= 2\hbar V_z \\
[J_-, V_+] &= -2\hbar V_z
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[J_+, V_\pm] &= [J_x + iJ_y, V_x \pm iV_y] \\
&= [J_x, V_x] \pm i[J_x, V_y] + i[J_y, V_x] \mp [J_y, V_y] \\
&= 0 \pm i(i\hbar V_z) + i(-i\hbar V_z) + 0 \\
&= \mp\hbar V_z + \hbar V_z
\end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{[J_+, V_+] = 0} \qquad\qquad \boxed{[J_+, V_-] = 2\hbar V_z}$$

$$\begin{aligned}
[J_-, V_\pm] &= [J_x - iJ_y, V_x \pm iV_y] \\
&= [J_x, V_x] \pm i[J_x, V_y] - i[J_y, V_x] \pm [J_y, V_y] \\
&= 0 \pm i[i\hbar V_z] - i(-i\hbar V_z) + 0 \\
&= \hbar V_z(\mp 1 - 1)
\end{aligned}$$

Et alors,

$$\boxed{[J_-, V_- = 0]} \qquad\qquad \boxed{[J_-, V_+] = -2\hbar V_z}$$

2. Établir les règles de sélection suivantes :

$$\begin{aligned}\langle k,j,m| V_z |k',j',m'\rangle &= 0 \text{ si } m \neq m' \\ \langle k,j,m| V_+ |k',j',m'\rangle &= 0 \text{ si } m \neq m'+1 \\ \langle k,j,m| V_- |k',j',m'\rangle &= 0 \text{ si } m \neq m'-1\end{aligned}$$

où $\{|k,j,m\rangle\}$ est la base de l'espace d'état dans lequel agissent ces opérateurs.

On vas partir du commutateur $[J_z, V_z]$ pour faire apparaître un V_z,

$$[J_z, V_z] = 0$$

$$\begin{aligned}\langle k,j,m| [J_z,V_z] |k',j',m'\rangle &= \langle k,j,m| J_zV_z - V_zJ_z |k',j',m'\rangle \\ &= (m\hbar - \hbar m') \langle k,j,m| V_z |k'j'm'\rangle = 0\end{aligned}$$

Et alors, si $m \neq m'$,

$$\boxed{\langle k,j,m| V_z |k',j',m'\rangle = 0} \text{ si } m \neq m'$$

De la même manière que précédemment, on vas vouloir faire apparaître $V_\pm$, donc on vas prendre le commutateur de cette observable avec une dont on connais l'opération,

$$\begin{aligned}[J_z, V_\pm] &= [J_z, V_x \pm iV_y] \\ &= [J_z, V_x] \pm i[J_z, V_y] \\ &= i\hbar V_y \pm i(-i\hbar)V_x \\ &= i\hbar V_y \pm \hbar V_x \\ &= \pm\hbar V_\pm\end{aligned}$$

Alors,

$$\begin{aligned}\pm\hbar \langle kjm| V_\pm |k'j'm'\rangle &= \langle kjm| [J_z, V_\pm] |k'j'm'\rangle \\ &= \langle kjm| J_zV_\pm - V_\pm J_z |k'j'm'\rangle \\ &= (m\hbar - m'\hbar) \langle kjm| V_\pm |k'j'm'\rangle\end{aligned}$$

Ce qui nous donne,

$$\hbar(m-m') \langle k,j,m| V_\pm |k',j',m'\rangle = \pm\hbar \langle k,j,m| V_\pm |k',j',m'\rangle$$

Alors,

$$\hbar(m - m' \mp 1) \langle k,j,m| V_\pm |k',j',m'\rangle = 0$$

Et alors,

$$\boxed{\langle k,j,m| V_+ |k',j',m'\rangle = 0} \text{ si } m \neq m'+1 \quad \boxed{\langle k,j,m| V_- |k',j',m'\rangle = 0} \text{ si } m \neq m'-1$$

3. Montrer que

$$\langle k,j,m+1|\, V_+\, |k,j,m\rangle = \alpha_+(k,j)\, \langle k,j,m+1|\, J_x\, |k,j,m\rangle$$

où $\alpha_+(k,j)$ est une quantité indépendante de m. En déduire la relation

$$\langle k,j,m|\, V_\pm\, |k,j,m'\rangle = \alpha_\pm(k,j)\, \langle k,j,m|\, J_\pm\, |k,j,m'\rangle$$

où $\alpha_-(k,j)$ est une quantité indépendante de m.

$$\langle kjm+2|\, J_+V_+\, |k,j,m\rangle = \langle kjm+2|\, V_+J_+\, |kjm\rangle$$

Alors,

$$\frac{\langle kjm+1|\, V_+\, |kjm\rangle}{\langle kjm+1|\, J_+\, |kjm\rangle} = \frac{\langle kjm+2|\, V_+\, |kjm+1\rangle}{\langle kjm+2|\, J_+\, |kjm+1\rangle} = \alpha(k,j)$$

$$\sum_{k_1,j_1,m_1} |k_1,j_1,m_1\rangle \langle k_1,j_1,m_1| = \mathrm{Id}$$

$$\sum_{k_1,j_1,m_1} \langle kjm+2|\, J_+\, |k_1,j_1,m_1\rangle \langle k_1,j_1,m_1|\, V_+\, |kjm\rangle = \sum_{k_1,j_1,m_1} \langle kjm+2|\, V_+\, |k_1j_1m_1\rangle \langle k_1j_1m_1|\, J_+\, |kjm\rangle$$

$$\langle kjm+2|\, J_+\, |kjm+1\rangle \langle kjm+1|\, V_+\, |kjm\rangle = \langle kjm+2|\, V_+\, |kjm+1\rangle \langle kjm+1|\, J_+\, |kjm\rangle$$

$$[J_-, V_-] = 0$$

Tout le reste est identique, juste on prend $m-2$.

4. Montrer que

$$\langle k,j,m|\, V_z\, |k,j,m'\rangle = \alpha(k,j)\, \langle k,j,m|\, J_z\, |k,j,m'\rangle$$

où

$$\alpha_-(k,j) = \alpha_+(k,j) = \alpha(k,j)$$

Comme déjà fait précédemment, on souhaite faire apparaître V_z, alors on prend le commutateur particulier $[J_+, V_-]$ qui est égal à $2\hbar V_z$ et nous fait alors apparaître V_z,

$$[J_+, V_-] = 2\hbar V_z$$

$$2\hbar \langle kjm| V_z |kjm\rangle = \langle kjm| J_+V_- - V_-J_+ |kjm\rangle$$

Mais on a un soucis, comment obtenir l'opération de J_+ sur le bra ?

$$J_- |kjm\rangle \qquad \longrightarrow \qquad \langle kjm| \underbrace{(J_-)^\dagger}_{J_+}$$

D'où,

$$\begin{aligned}
\langle kjm| J_+V_- - V_-J_+ |kjm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle kjm-1| V_- |kjm\rangle \\
&\quad - \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle kjm| V_- |kjm+1\rangle \\
&= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\alpha_-(k,j) \langle kjm-1| J_- |kjm\rangle \\
&\quad - \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\alpha_-(k,j) \langle kjm| J_- |kjm+1\rangle \\
&= \hbar^2\alpha_-(k,j) [j(j+1) - m(m-1) - j(j+1) + m(m+1)] \\
&= 2m\hbar^2\alpha_-(k,j) \\
&= 2\hbar \langle kjm| V_z |kjm\rangle
\end{aligned}$$

On peut alors refaire la même démarche avec,

$$[J_-, V_+] = -2\hbar V_z$$

$$-2\hbar \langle kjm| V_z |kjm\rangle = \langle kjm| J_-V_+ - V_+J_- |kjm\rangle$$

Mais on a un soucis, comment obtenir l'opération de J_- sur le bra ?

$$J_+ |kjm\rangle \qquad \longrightarrow \qquad \langle kjm| \underbrace{(J_+)^\dagger}_{J_-}$$

D'où,

$$\begin{aligned}
\langle kjm| J_-V_+ - V_+J_- |kjm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle kjm+1| V_+ |kjm\rangle \\
&\quad - \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle kjm| \langle kjm| V_+ |kjm-1\rangle \\
&= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\alpha_+(k,j) \langle kjm+1| J_+ |kjm\rangle \\
&\quad - \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\alpha_+(k,j) \langle kjm| \langle kjm| J_+ |kjm-1\rangle \\
&= \hbar^2\alpha_+(k,j) [j(j+1) - m(m+1) - j(j+1) + m(m-1)] \\
&= -2m\hbar^2\alpha_+(k,j) \\
&= -2\hbar \langle kjm| V_z |kjm\rangle
\end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{\alpha_+(k,j) = \alpha_-(k,j) = \alpha(k,j)}$$

Et on retrouve le même résultat, donc α_- et α_+ sont le même coefficient.

5. En déduire que

$$\langle k,j,m|\,\vec{V}\,|k,j,m'\rangle = \alpha(k,j)\,\langle k,j,m|\,\vec{J}\,|k,j,m'\rangle$$

On peut faire par permutation circulaires des indices la même chose que précédemment, et alors, c'est vérifier.

6. Montrer que

$$\alpha(k,j) = \frac{\langle k,j,m|\,\vec{J}\cdot\vec{V}\,|k,j,m\rangle}{j(j+1)\hbar^2}$$

$\vec{J}\cdot\vec{V}$ est une écriture compacte pour $J_xV_x + J_yV_y + J_zV_z$.

$$\begin{aligned}
\langle kjm|\,J_xV_x\,|kjm\rangle &= \sum_{k_1j_1m_1} \langle kjm|\,J_x\,|k_1j_1m_1\rangle\,\langle k_1j_1m_1|\,V_x\,|kjm\rangle \\
&= \sum_{m_1} \langle kjm|\,J_x\,|kjm_1\rangle\,\langle kjm_1|\,V_x\,|kjm\rangle \\
&= \alpha(k,j)\sum_{m_1} \langle kjm|\,J_x\,|kjm_1\rangle\,\langle kjm_1|\,J_x\,|kjm\rangle \\
&= \alpha(k,j)\,\langle kjm|\,J_x^2\,|kjm\rangle \\
&= \alpha(k,j)\,\big(j(j+1)\hbar^2\big)
\end{aligned}$$

Alors on peut faire une permutation circulaire des indices, et on trouve alors immédiatement,

$$\langle k,j,m|\,\vec{J}\cdot\vec{V}\,|k,j,m\rangle = \alpha(k,j)\,\langle kjm|\,J^2\,|kjm\rangle$$

D'où,

$$\boxed{\alpha(k,j) = \frac{\langle kjm|\,\vec{J}\cdot\vec{V}\,|kjm\rangle}{j(j+1)\hbar^2}}$$

Exercice II

On considère une particule de masse m dans le puits de potentiel à symétrie sphérique

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0 \text{ si } 0 \leq r \leq r_0 \\ 0 \text{ si } r > r_0 \end{cases}$$

où $r = \|\vec{r}\|$ et r_0 est une constante strictement positive.

1. Écrire l'équation de Schrödinger du système. On rappelle que le laplacien en coordonnées sphériques s'écrit

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

où L^2 est l'opérateur associé au carré du moment orbital $\vec{L}$.

2. On ne s'intéresse qu'aux états liés su système d'énergie E avec $-V_0 < E < 0$. On note $\psi(r,\theta,\varphi)$ la fonction d'onde et on pose $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ où $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sont les harmoniques sphériques.
Montrer que l'équation différentielle vérifiée par $R(r)$ se met sous la forme

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\left(rR(r)\right) + \left(\alpha^2(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r) = 0$$

où on précisera la valeur de $\alpha(r)$ dans chaque région de l'espace. (On rappelle que $L^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ où l est un entier positif ou nul).

3. Dans la suite de l'exercice, on ne considère que le cas de l'onde s ($l = 0$) et on pose $R(r) = u(r)/r$. Montrer que

$$\begin{cases} u(r) = A\sin(kr) & r \leq r_0 \\ u(r) = B\exp(-qr) & r > r_0 \end{cases}$$

où A et B sont deux constantes d'intégration que l'on ne demande pas de spécifier alors que k et q sont des quantités que l'on précisera.

4. Montrer qu'un état lié doit vérifier la relation

$$\tan(kr_0) = -\frac{k}{q}$$

et, à l'aide d'une résolution graphique, donner la condition pour qu'il existe au moins un état lié.