

1 Gradient et laplacien

🎯 **Objectif** : déterminer le gradient et le laplacien en coordonnées cylindriques et sphériques.

📖 **Théorie** : analyse vectorielle.

📌 **Difficulté** : ★★☆☆ facultatif.

Le gradient et le laplacien en coordonnées cartésiennes s'écrivent,

$$\nabla = \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z},$$

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

a) A l'aide de la différentielle d'une fonction scalaire $f(\rho, \varphi, z)$, montrer que le gradient et le laplacien en coordonnées cylindriques s'écrivent,

$$\nabla = \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\varphi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z},$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

b) A l'aide de la différentielle d'une fonction scalaire $f(r, \theta, \varphi)$, montrer que le gradient et le laplacien en coordonnées sphériques s'écrivent,

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

2 Harmoniques sphériques

🎯 **Objectif** : étudier des propriétés des fonctions harmoniques sphériques.

📖 **Théorie** : analyse vectorielle et complexe.

📌 **Difficulté** : ★★☆☆ obligatoire.

Les fonctions harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ satisfont la relation d'orthonormalité,

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi)^* Y_\ell^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm}.$$

Ces fonctions sont exprimées en termes des polynômes de Legendre généralisés comme,

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \Theta_\ell^m(\theta) \Phi_\ell^m(\varphi) = c_\ell^m P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Les polynômes de Legendre généralisés satisfont la relation d'orthogonalité,

$$\int_{-1}^1 P_{\ell'}^m(x) P_\ell^m(x) dx = \frac{2}{2\ell + 1} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!} \delta_{\ell'\ell},$$

et la relation,

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

- a) Déterminer les coefficients c_ℓ^m , en déduire la forme explicite des harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ et montrer que,

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_\ell^m(\theta, \varphi)^*.$$

- b) Montrer que les fonctions harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ satisfont l'équation aux valeurs propres,

$$r^2 \nabla^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = -\ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \varphi).$$

- c) L'opérateur vectoriel moment cinétique est défini comme,

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i \hbar \mathbf{r} \times \nabla.$$

Montrer que les harmoniques sphériques satisfont les équations aux valeurs propres,

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \varphi) & \text{où} & \quad \hat{L}^2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}}, \\ \hat{L}_z Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= \hbar m Y_\ell^m(\theta, \varphi) & \text{où} & \quad \hat{L}_z = \hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{L}}. \end{aligned}$$

3 Opérateurs d'échelle

🎯 **Objectif** : étudier les opérateurs d'échelle du moment cinétique quantique.

📖 **Théorie** : analyse vectorielle et complexe.

🔧 **Difficulté** : ★★☆☆ obligatoire.

Les opérateurs d'échelle du moment cinétique sont définis comme,

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i \hat{L}_y \quad \text{et} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i \hat{L}_y.$$

- a) Etablir les relations de commutation entre les composantes cartésiennes de l'opérateur vectoriel moment cinétique,

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i \hbar \hat{L}_z \quad \text{et} \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i \hbar \hat{L}_x \quad \text{et} \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i \hbar \hat{L}_y.$$

- b) En déduire les relations de commutation,

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar \hat{L}_+ \quad \text{et} \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar \hat{L}_-.$$

Exprimer l'opérateur \hat{L}^2 en termes des opérateurs \hat{L}_+ , \hat{L}_- et \hat{L}_z et montrer la relation de commutation,

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0.$$

- c) Les fonctions harmoniques sphériques Y_ℓ^m sont des fonctions propres de l'opérateur \hat{L}_z avec la valeur propre $\hbar m$. Montrer que les opérateurs d'échelle satisfont les équations aux valeurs propres,

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

et permettent de monter et descendre l'échelle des valeurs propres $\hbar m$ de l'opérateur \hat{L}_z , d'où leur nom. Ces équations montrent que les fonctions $\hat{L}_\pm Y_\ell^m$ sont des fonctions propres de l'opérateur \hat{L}_z de valeurs propres $m \pm 1$.

- d) Les fonctions harmoniques sphériques Y_ℓ^m sont des fonctions propres normées des opérateurs \hat{L}^2 et \hat{L}_z qui satisfont les relations de récurrence,

$$Y_\ell^{m\pm 1} = c_\ell^{m\pm 1} \hat{L}_\pm Y_\ell^m,$$

où les coefficients $c_\ell^{m\pm 1}$ sont des constantes de normalisation. Déterminer les coefficients $c_\ell^{m\pm 1}$ et en déduire que,

$$-\ell \leq m \leq \ell.$$

4 Spin

🎯 **Objectif** : étudier les propriétés du spin.

📖 **Théorie** : analyse vectorielle et complexe.

🔪 **Difficulté** : ★★★★★ obligatoire.

Le moment cinétique intrinsèque des électrons en mécanique quantique, appelé communément le spin, est décrit par l'opérateur de spin $\hat{\mathbf{S}} \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^{2s+1})$. Par analogie avec les équations aux valeurs propres pour les opérateurs moment cinétique orbital au carré \hat{L}^2 et moment cinétique orbital vertical \hat{L}_z , l'opérateur de spin au carré \hat{S}^2 et l'opérateur de spin vertical \hat{S}_z satisfont les équations aux valeurs propres suivantes,

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 |s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle, \\ \hat{S}_z |s, m_s\rangle &= \hbar m_s |s, m_s\rangle,\end{aligned}$$

où le nombre de spin s et le nombre magnétique m_s de spin satisfont l'inégalité,

$$-s \leq m_s \leq s.$$

Les vecteurs $\psi_{sm_s} \equiv |s, m_s\rangle$ appartiennent à l'espace \mathbb{C}^{2s+1} , qui est l'espace de Hilbert \mathcal{H} associé au spin. Comme les électrons sont des particules de spin $s = 1/2$, l'espace de Hilbert est \mathbb{C}^2 . Les vecteurs propres normés de cet espace décrivent le spin up et le spin down et sont définis comme,

$$|\uparrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

et forment une base orthonormée de \mathbb{C}^2 ,

$$\langle \uparrow | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \downarrow \rangle = 1 \quad \text{et} \quad \langle \uparrow | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle = 0.$$

Par analogie avec l'opérateur moment cinétique orbital, les composantes cartésiennes de l'opérateur de spin satisfont les relations de commutation,

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z \quad \text{et} \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x \quad \text{et} \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y.$$

Les opérateurs d'échelle pour le spin sont définis comme,

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \quad \text{et} \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y,$$

et satisfont les relations de commutation suivantes,

$$\begin{aligned}[\hat{S}_z, \hat{S}_+] &= \hbar \hat{S}_+, \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_-] &= -\hbar \hat{S}_-.\end{aligned}$$

- a) Déterminer la représentation matricielle dans $M_2(\mathbb{C}^2)$ de l'opérateur de spin vertical \hat{S}_z , des opérateurs d'échelle de spin \hat{S}_+ et \hat{S}_- et en déduire les représentations matricielle des opérateurs de spin horizontaux \hat{S}_x et \hat{S}_y . Exprimer les représentations matricielles des opérateurs de spin \hat{S}_x , \hat{S}_y et \hat{S}_z en termes des matrices de Pauli définies comme,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- b) Montrer que les matrices $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ et $\hat{\sigma}_z$, forment une base de l'algèbre $\mathfrak{su}(2)$ du groupe de Lie $SU(2)$, c'est-à-dire,

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k,$$

où $\mathbb{1}$ est la matrice identité et ε_{ijk} sont les composantes du tenseur complètement antisymétrique de rang-3 de Levi-Civita, en calculant le commutateur et l'anticommutateur de ces matrices.

- c) Pour des vecteurs unitaires $\hat{\mathbf{n}}$ et $\hat{\mathbf{m}}$, en déduire que la représentation matricielle du produit des projections de l'opérateur vectoriel de spin $\hat{\mathbf{S}}$ le long des axes définis par ces vecteurs unitaires donne la relation suivante,

$$\left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}\right) \left(\hat{\mathbf{m}} \cdot \hat{\mathbf{S}}\right) = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{m}}) \hat{\mathbf{1}} + i \frac{\hbar}{2} (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{m}}) \cdot \hat{\mathbf{S}},$$

- d) Déterminer la représentation matricielle de l'opérateur unitaire,

$$U = e^{-i\theta \hat{\mathbf{n}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}} = e^{-i\frac{\theta}{2} \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}} \in SU(2),$$

décrivant la rotation intrinsèque autour de l'axe de vecteur directeur $\hat{\mathbf{n}}$.

5 Equation de Laguerre généralisée

🎯 **Objectif** : reformuler l'équation de Laguerre généralisée.

📖 **Théorie** : analyse réelle.

🔧 **Difficulté** : ☆☆☆ facultatif.

L'équation différentielle de Laguerre généralisée s'écrit,

$$\rho \frac{d^2 L_m^k(\rho)}{d\rho^2} + (k+1 - \rho) \frac{dL_m^k(\rho)}{d\rho} + m L_m^k(\rho) = 0.$$

Les fonctions de Laguerre généralisées $\Psi_m^k(\rho)$ sont définies en termes des polynômes de Laguerre généralisés $L_m^k(\rho)$ comme,

$$\Psi_m^k(\rho) = e^{-\rho/2} \rho^{(k+1)/2} L_m^k(\rho) .$$

- a) Montrer que satisfait l'équation différentielle que satisfont les fonctions de Laguerre généralisées,

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} + \frac{2m+k+1}{2\rho} - \frac{k^2-1}{4\rho^2} \right) \Psi_m^k(\rho) = 0 ,$$

est équivalente à l'équation différentielle de Laguerre généralisée que satisfont les polynômes de Laguerre généralisés.