

UNIVERSITE LIBRE DE BRUXELLES

SYSTEMES DE FERMIONS
DANS UN CHAMP CENTRAL

I. ALGEBRE DES MOMENTS CINETIQUES

J. DEENEN
M. DEMEUR
C. QUESNE

UNIVERSITE LIBRE DE BRUXELLES

SYSTEMES DE FERMIONS
DANS UN CHAMP CENTRAL

I. ALGEBRE DES MOMENTS CINETIQUES

J. DEENEN
M. DEMEUR
C. QUESNE

Les atomes et les noyaux atomiques constituent un ensemble de systèmes physiques dominés par la symétrie sphérique. L'étude microscopique de ces systèmes formés d'électrons et de nucléons est basée, en première approximation, sur celle de N fermions plongés dans un champ central.

Nous avons découpé ce chapitre important de la physique en deux parties :

- 1) l'acquisition des techniques propres au couplage des moments cinétiques ; cette première partie se limite de manière naturelle aux systèmes de deux fermions ;
- 2) l'acquisition des techniques propres à l'étude des systèmes de N fermions de même espèce ($N > 2$).

Le texte rédigé est basé sur divers enseignements :

- a) ceux que M. Demeur a donné au cours des dernières années ;
 - b) celui que Madame Quesne a donné en 1971-72 (1^{ère} année de la licence en sciences physiques) ;
 - c) celui que J. Deenen a donné en 1969-70 (2^{de} année de la licence en sciences physiques).
- Il a été établi dans le double but de soulager le travail des étudiants et celui des enseignants. Pour les premiers, ce texte doit les libérer de l'effort considérable que représente la mise en ordre de leurs notes, compte tenu des formules nombreuses que comporte une telle matière. Pour les seconds, ce texte doit leur permettre d'élaguer leur enseignement (oral) de certaines démonstrations fastidieuses dont la longueur masque parfois la suite logique et le sens physique du but poursuivi.

Ce texte a été rédigé avec le souci de présenter l'ensemble avec des notations cohérentes ce qu'il est difficile de trouver dans la littérature actuelle, laquelle est d'ailleurs peu abondante en ce qui concerne la seconde partie.

J. DEENEN - M. DEMEUR - C. QUESNE

I INTRODUCTION

1. Hamiltonien à particules indépendantes

Le but de ce cours est de préparer l'étude des systèmes atomiques et nucléaires, systèmes pour lesquels les données expérimentales indiquent une symétrie sphérique sous-jacente.

Supposons que ces systèmes soient décrits en première approximation par le hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^n T(\bar{x}^{(i)}) + \sum_{i < j=2}^n V(|\bar{x}^{(i)} - \bar{x}^{(j)}|), \quad (1.1)$$

où $T(\bar{x}^{(i)})$ représente l'opérateur d'énergie cinétique de la $i^{\text{ème}}$ particule (lesquelles sont au nombre de n) et V est une interaction à deux corps.

Constater expérimentalement qu'il y a une symétrie sphérique sous-jacente conduit à écrire

$$\begin{aligned} H &= \left[\sum_i \left(T(\bar{x}^{(i)}) + \bar{V}(r^{(i)}) \right) \right] + \left[\sum_{i < j} V(|\bar{x}^{(i)} - \bar{x}^{(j)}|) - \sum_i \bar{V}(r^{(i)}) \right] \\ &= H_0 + W, \end{aligned} \quad (1.2)$$

où H_0 est la somme de n hamiltoniens individuels

$$h_0(i) = T(i) + \bar{V}(i), \quad (1.3)$$

à symétrie sphérique (puisque le potentiel \bar{V} introduit ne dépend que de la longueur r) et où W est une interaction résiduelle à deux corps.

L'esprit général de la description de ces systèmes consiste à adopter H_0 comme point de départ : c'est-à-dire à construire une base de fonctions propres de H_0 et à utiliser ensuite cette base pour

diagonaliser le hamiltonien complet H . Nous conviendrons d'appeler H_0 le hamiltonien à particules indépendantes.

La construction d'une base de fonctions propres de H_0 se fait en deux étapes. En premier lieu, on effectue la quantification de h_0 , hamiltonien à une particule à symétrie sphérique. Ceci est un problème classique de mécanique quantique, dont nous rappelons ci-dessous la solution. Ensuite on forme les fonctions propres de H_0 à partir de produits adéquats de fonctions propres des hamiltoniens individuels $h_0(i)$. L'objet de ce cours va être l'étude d'un certain nombre de problèmes liés à cette construction.

1.1. Exemple

La procédure suivie en 1 est caractéristique de la physique atomique lorsque le centre de masse du système est confondu avec le noyau de l'atome de charge Ze (approximation en général très bonne) :

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i=1}^n \left[T(i) - \frac{Ze^2}{r^{(i)}} \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}^{(i)} - \vec{r}^{(j)}|} \\
 &= \sum_i h_0(i) + W.
 \end{aligned}
 \tag{1.4}$$

Les propriétés du système ont conduit de manière naturelle à grouper les interactions noyau-électron avec les énergies cinétiques des électrons et à constituer l'interaction résiduelle avec les interactions électron-électron.

2. Hamiltonien à une particule à symétrie sphérique

Nous désirons en premier lieu résoudre le problème aux valeurs propres

$$h_0 \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad , \tag{2.1}$$

pour le hamiltonien à une particule, à symétrie sphérique

$$h_0 = T + \bar{V}(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \bar{V}(r) . \quad (2.2)$$

A cet effet, nous avons besoin de l'expression du laplacien en coordonnées sphériques r, θ, φ ,

$$\Delta = \partial_{rr}^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \mathcal{L} , \quad (2.3)$$

où \mathcal{L} est l'opérateur angulaire

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\sin\theta} \partial_\theta (\sin\theta \partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_{\varphi\varphi}^2 . \quad (2.4)$$

L'équation (2.1) se réécrit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_{rr}^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{\mathcal{L}}{r^2} \right) + \bar{V}(r) - E \right] \psi(\vec{r}) = 0 . \quad (2.5)$$

La fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ se factorise en une partie radiale et une partie angulaire

$$\psi(\vec{r}) = R_{n\lambda}(r) \mathbb{H}_\lambda(\theta, \varphi) , \quad (2.6)$$

pour autant que l'on puisse résoudre le problème aux valeurs propres

$$\mathcal{L} \mathbb{H}_\lambda(\theta, \varphi) = \lambda \mathbb{H}_\lambda(\theta, \varphi) . \quad (2.7)$$

Dans ces conditions, l'équation (2.5) se réduit à une équation différentielle pour la fonction d'onde radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(d_{rr}^2 + \frac{2}{r} d_r + \frac{\lambda}{r^2} \right) + \bar{V}(r) - E_{n\lambda} \right] R_{n\lambda}(r) = 0 . \quad (2.8)$$

Il reste donc à résoudre successivement l'équation angulaire (2.7) et l'équation radiale (2.8) et à étudier la signification physique

des nombres quantiques Λ et n , qui sont associés à l'une et à l'autre équations.

3. Equation angulaire

La quantification de la partie angulaire du laplacien est un problème bien connu, dont la solution a été donnée en toute généralité pour un espace à $(p+2)$ dimensions. Ayant défini la variable radiale $r = \left(\sum_{i=1}^{p+2} x_i^2 \right)^{1/2}$ et une variable angulaire du genre φ (définie de 0 à 2π autour d'un axe de rotation), on introduit p variables angulaires du genre θ (définies de 0 à π dans un plan de référence). Le laplacien prend la forme

$$\Delta^{(p)} = r^{-p-1} \partial_r r^{p+1} \partial_r + r^{-2} \mathcal{L}^{(p)}(\varphi; \theta_1, \dots, \theta_p). \quad (3.1)$$

La théorie générale de la quantification de $\mathcal{L}^{(p)}$ est basée sur les propriétés des polynômes harmoniques F , c'est-à-dire les polynômes homogènes en les $(p+2)$ variables x_i , qui sont solutions de l'équation $\Delta^{(p)} F = 0$. Quand on tient compte des conditions aux limites qui résultent de la périodicité des fonctions propres angulaires, on arrive aux valeurs propres

$$\Lambda^{(p)} = -\lambda(\lambda + p) \quad \text{avec } \lambda = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

A chaque valeur propre $\Lambda^{(p)}$ est attachée une dégénérescence, qui, dans le cas où $\lambda + p - 1 \geq 0$, vaut

$$\frac{(\lambda + p - 1)! (2\lambda + p)}{p! \lambda!}. \quad (3.3)$$

Nous allons démontrer explicitement ces résultats dans les cas $p = 0$ et $p = 1$.

3.1. Exemple (2 dimensions)

Quand $p = 0$, le laplacien, exprimé en la variable radiale r et en la variable angulaire φ , s'écrit

$$\Delta^{(0)} = \partial_{rr}^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_{\varphi\varphi}^2. \quad (3.4)$$

La forme de cet opérateur suggère de combiner les coordonnées

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi, \\ y &= r \sin \varphi, \end{aligned} \quad (3.5)$$

en

$$\begin{aligned} u &= x + iy = r e^{i\varphi}, \\ v &= x - iy = r e^{-i\varphi}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Sous l'effet de cette transformation linéaire, le laplacien prend la forme très simple

$$\Delta^{(0)} = 4 \partial_{uv}^2 \quad (3.7)$$

et un polynôme homogène en x, y se transforme en un polynôme homogène en u, v . Par conséquent, un polynôme homogène de degré k ,

$$F_k = \sum_{a=0}^k c_a u^a v^{k-a}, \quad (3.8)$$

où c_a est un coefficient, est harmonique s'il satisfait à la condition

$$4 \partial_{uv}^2 \sum_{a=0}^k c_a u^a v^{k-a} = 0 \quad (3.9)$$

ou

$$\sum_{a=0}^k a(k-a) c_a u^{a-1} v^{k-a-1} = 0, \quad (3.10)$$

quels que soient u et v . Pour tout $0 \leq a \leq k$, on doit donc avoir

$$a(k-a) c_a = 0$$

et les seuls coefficients c_a différents de zéro sont ceux pour lesquels soit $a = 0$, soit $a = k$. A $a = 0$ correspond le polynôme harmonique $r^k e^{-ik\varphi}$, à $a = k$ est associé $r^k e^{ik\varphi}$.

De ceci, on déduit immédiatement l'équation aux valeurs propres pour la partie angulaire du laplacien :

$$\partial_{\varphi\varphi}^2 r^k e^{\pm ik\varphi} = -k^2 r^k e^{\pm ik\varphi}. \quad (3.11)$$

Ici k joue le rôle de λ ; c'est un entier positif ou nul, comme il résulte à la fois de sa définition comme degré d'un polynôme et de la condition de périodicité des fonctions d'onde angulaires. Pour $k > 0$, la dégénérescence est 2, en accord avec la formule générale (3.3). A $k = 0$ est associée une seule fonction propre.

3.2. Exemple (3 dimensions)

La solution donnée au problème à $p = 0$ va faciliter celle du cas où $p = 1$, cas qui nous intéresse particulièrement. Cette fois le laplacien $\Delta^{(1)} = \Delta$ s'exprime en la variable radiale r , en la variable angulaire de type φ et en la variable angulaire de type θ par la formule (2.3). L'opérateur angulaire $L^{(1)} = L$ défini par l'expression (2.4) dépend de deux variables, pour lesquelles nous exigerons des conditions aux limites lors de la quantification. Nous aurons donc à construire des fonctions propres caractérisées par deux nombres quantiques.

Dans ce cas-ci également, on se convainc facilement que les coordonnées cartésiennes ne sont pas les mieux adaptées au problème à résoudre. En effet, la condition d'harmonicité d'un polynôme homogène de degré k en x, y, z ,

$$F_k = \sum_{\alpha\beta\gamma} b_{\alpha\beta\gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma, \quad (3.12)$$

$$\text{avec } \alpha \geq 0, \quad \beta \geq 0, \quad \gamma \geq 0 \quad (3.13)$$

$$\text{et } \alpha + \beta + \gamma = k, \quad (3.14)$$

$$\text{est } (\partial_{xx}^2 + \partial_{yy}^2 + \partial_{zz}^2) \sum_{\alpha\beta\gamma} b_{\alpha\beta\gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma = 0. \quad (3.15)$$

On en déduit une relation de récurrence à trois termes,

$$(\alpha+2)(\alpha+1) b_{\alpha+2,\beta,\gamma} + (\beta+2)(\beta+1) b_{\alpha,\beta+2,\gamma} + (\gamma+2)(\gamma+1) b_{\alpha,\beta,\gamma+2} = 0, \quad (3.16)$$

qui ne conduit pas de manière directe à un second nombre quantique. La raison pour laquelle cette voie ne convient pas est de nature géométrique : les coordonnées cartésiennes sont symétriques entre elles alors que les variables angulaires qui nous intéressent ne le sont pas (une de type φ et une autre de type θ).

Les coordonnées commodes sont

$$\begin{aligned} u &= x + iy = r \sin \theta e^{i\varphi}, \\ v &= x - iy = r \sin \theta e^{-i\varphi}, \\ z &= r \cos \theta, \end{aligned} \quad (3.17)$$

qui séparent clairement l'axe z du plan équatorial (où les coordonnées isotropes sont utiles ainsi qu'il a été vu plus haut). Dans ces nouvelles coordonnées, un polynôme homogène de degré k s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} G_k &= \sum_{\alpha\beta\gamma} c_{\alpha\beta\gamma} u^\alpha v^\beta z^\gamma \\ &= r^k \sum_{\alpha\beta\gamma} c_{\alpha\beta\gamma} e^{i(\alpha-\beta)\varphi} (\sin \theta)^{\alpha+\beta} (\cos \theta)^\gamma, \end{aligned} \quad (3.18)$$

avec les conditions

$$\alpha \geq 0, \quad \beta \geq 0, \quad \gamma \geq 0 \quad (3.19)$$

et $\alpha + \beta + \gamma = k$. (3.20)

Le polynôme homogène G_k est harmonique si

$$\Delta G_k = 0 \quad (3.21)$$

ou encore

$$(4 \partial_{\mu\nu}^2 + \partial_{zz}^2) G_k = 0 . \quad (3.22)$$

Ceci conduit à la relation de récurrence à deux termes

$$4(\alpha+1)(\beta+1) c_{\alpha+1, \beta+1, \gamma} + (\gamma+2)(\gamma+1) c_{\alpha, \beta, \gamma+2} = 0 . \quad (3.23)$$

En vertu de cette relation, tous les coefficients $c_{\alpha\beta\gamma}$ caractérisés par une valeur constante de $\alpha - \beta$ sont connus dès que l'on connaît l'un d'entre eux. L'équation (3.22) possède donc autant de solutions linéairement indépendantes G_{kx} qu'il y a de valeurs distinctes de

$$x = \alpha - \beta , \quad (3.24)$$

compatibles avec les conditions (3.19) et (3.20). La valeur maximum de x est atteinte quand α est maximum (= k) et β minimum (= 0) d'où

$$x \leq k ; \quad (3.25)$$

on trouve de même

$$x \geq -k . \quad (3.26)$$

Il y a donc $2k+1$ fonctions G_{kx} indépendantes,

$$G_{kx} = \sum_{\alpha=0}^k c_{\alpha, \alpha-x, k+x-2\alpha} \begin{matrix} \alpha & \alpha-x & k+x-2\alpha \\ \mu & \nu & z \end{matrix} , \quad (3.27)$$

avec $\alpha - x \geq 0$,

$$k+x-2\alpha \geq 0 . \quad (3.28)$$

Les fonctions angulaires qui nous intéressent sont en vertu de (3.18)

$$r^{-k} G_{kx} = e^{ix\varphi} g_k^x(\theta). \quad (3.29)$$

De l'harmonicité de G_{kx} on déduit que

$$\left[\partial_{xx}^2 + \frac{2}{r} \partial_x + \frac{\rho^{(1)}}{r^2} \right] r^k e^{ix\varphi} g_k^x(\theta) = 0, \quad (3.30)$$

ou encore

$$r^{k-2} \left[k(k+1) + \rho^{(1)} \right] e^{ix\varphi} g_k^x(\theta) = 0. \quad (3.31)$$

Les valeurs propres de $\rho^{(1)}$ sont donc

$$\Lambda^{(1)} = \Lambda = -k(k+1), \quad (3.32)$$

Notons que comme conséquence de (3.31), $g_k^x(\theta)$ satisfait à l'équation différentielle

$$\left[k(k+1) + \frac{1}{\sin\theta} d_\theta (\sin\theta d_\theta) - \frac{x^2}{\sin^2\theta} \right] g_k^x(\theta) = 0, \quad (3.33)$$

ce qui implique

$$g_k^x(\theta) \propto g_k^{|x|}(\theta). \quad (3.34)$$

Pour finir, remarquons que les polynômes G_k de degré k sont, avant d'imposer la condition (3.21), au nombre de

$$\sum_{\alpha=0}^k (k-\alpha+1) = \frac{1}{2} (k+1)(k+2). \quad (3.35)$$

Comme $r^2 = uv + z^2$ est un polynôme homogène du second degré, on peut obtenir tous les G_k à partir des $(2k+1)$ polynômes G_{kx} , des $(2k-3)$ polynômes $r^2 G_{k-2,x}$, des $(2k-7)$ polynômes $r^4 G_{k-4,x}$ et ainsi de suite. On vérifie en effet facilement que

$$\sum_{k=0 \text{ ou } 1}^{k-2, k} (2k+1) = \frac{1}{2} (k+1)(k+2). \quad (3.36)$$

Dans le cas $p = 1$, la notation traditionnelle est la suivante :

$$\begin{aligned} k &\longrightarrow l = 0, 1, 2, \dots \\ x &\longrightarrow m \quad \text{avec} \quad -l \leq m \leq l \\ g_k^x(\theta) &\longrightarrow P_l^m(\theta) \\ G_{kx} &\longrightarrow e^{im\varphi} P_l^m(\theta) \propto Y_{lm}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Les nombres quantiques l et m proviennent de la diagonalisation simultanée des opérateurs $L^{(1)}$ et ∂_φ (qui commutent) :

$$[L^{(1)} + l(l+1)] Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0, \quad (3.38)$$

$$[\partial_\varphi - im] Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0. \quad (3.39)$$

3.3. Quelques propriétés des fonctions d'onde angulaires $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

L'équation différentielle (3.33), satisfaite par $P_l^m(\theta)$, peut se récrire en posant $t = \cos \theta$ sous la forme

$$\left\{ (1-t^2) \frac{d^2}{dt^2} - 2t \frac{d}{dt} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-t^2} \right] \right\} P_l^m(t) = 0, \quad (3.40)$$

qui est l'équation différentielle de Legendre. La fonction $P_l^m(t)$ est la solution de cette équation, qui est finie pour tous les points dans l'intervalle $-1 \leq t \leq 1$; c'est donc une fonction associée de Legendre de première espèce. Elle est donnée par la formule

$$P_l^m(t) = \frac{(1-t^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dt^{l+m}} (t^2-1)^l, \quad -l \leq m \leq l. \quad (3.41)$$

Elle possède la propriété

$$P_l^{-m}(t) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(t) \quad (3.42)$$

et pour $m > 0$, elle est donnée en fonction du polynôme de Legendre $P_l(t)$ par

$$P_l^m(t) = (1-t^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(t)}{dt^m} \quad 0 \leq m \leq l. \quad (3.43)$$

Les polynômes de Legendre $P_l(t)$ sont donnés par la formule de Rodrigues

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dt^l} (t^2-1)^l \quad (3.44)$$

et satisfont à l'équation différentielle

$$\left[(1-t^2) \frac{d^2}{dt^2} - 2t \frac{d}{dt} + l(l+1) \right] P_l(t) = 0. \quad (3.45)$$

Les fonctions $P_l^m(t)$ sont orthogonales en l mais ne sont pas normalisées :

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(t) P_{l'}^m(t) dt = \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \delta_{ll'}. \quad (3.46)$$

La seconde solution de l'équation de Legendre présente une singularité logarithmique aux bornes de l'intervalle de définition. On établit que ces fonctions de Legendre de seconde espèce sont reliées aux P_l et P_l^m par les relations suivantes :

$$Q_l(t) = \frac{1}{2} P_l(t) \ln \frac{1+t}{1-t} - W_{l-1}(t),$$

$$W_{l-1}(t) = \sum_{p=1}^l \frac{1}{p} P_{p-1}(t) P_{l-p}(t),$$

$$Q_l^m(t) = (-1)^m (1-t^2)^{m/2} \frac{d^m}{dt^m} Q_l(t).$$

Les fonctions d'onde angulaires complètes $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, appelées aussi fonctions de Laplace ou harmoniques sphériques, sont définies par

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad -l \leq m \leq l. \quad (3.47)$$

La racine carrée est introduite pour assurer l'orthonormalisation des Y_{lm} ,

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (3.48)$$

tandis que la phase $(-1)^m$ correspond à la convention la plus souvent utilisée dans la littérature (convention de Condon et Shortley). Ce choix de phase ne modifie pas la propriété (3.42); celle-ci entraîne que

$$Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{l-m}(\theta, \varphi). \quad (3.49)$$

Le nombre de noeuds de la fonction d'onde angulaire $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est égal à la somme du nombre de noeuds de $e^{im\varphi}$ dans l'intervalle $0 \leq \varphi < 2\pi$ et de celui de $P_l^m(\cos \theta)$ dans l'intervalle $0 \leq \theta \leq \pi$, soit $m + (l-m) = l$.

4. Equation radiale

Il résulte de l'étude du paragraphe précédent que la fonction d'onde d'une particule dans un potentiel à symétrie sphérique peut s'écrire sous la forme

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4.1)$$

où, en vertu de (2.8) et (3.38), la fonction radiale satisfait à l'équation

$$\left[d_{rr}^2 + \frac{2}{r} d_r - \frac{l(l+1)}{r^2} - v(r) + \varepsilon_{nl} \right] R_{nl}(r) = 0, \quad (4.2)$$

$$\text{où} \quad v(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \bar{V}(r) \quad (4.3)$$

$$\text{et} \quad \varepsilon_{nl} = \frac{2m}{\hbar^2} E_{nl}. \quad (4.4)$$

Les valeurs propres $-l(l+1)$ de \mathcal{L}^2 étant indépendantes de m , il en est de même des énergies E_{nl} et des fonctions d'onde radiales R_{nl} et par conséquent, chaque énergie E_{nl} est affectée d'une dégénérescence $2l+1$ qui représente le nombre de fonctions d'onde $R_{nl} Y_{lm}$ correspondant à E_{nl} . Le nombre quantique $n = 0, 1, 2, \dots$, provenant de la quantification de l'équation radiale, représente le nombre de noeuds de la fonction radiale (zéro et l'infini n'étant pas comptés comme noeuds). Il en résulte que le nombre de noeuds de la fonction d'onde totale est $n+l$.

Si l'énergie potentielle n'est pas singulière (c'est-à-dire ne possède pas à l'origine une singularité plus forte ou égale à celle du terme centrifuge $l(l+1)/r^2$, l'équation aux indices de l'équation différentielle radiale s'écrit

$$s(s+1) = l(l+1), \quad (4.5)$$

fournissant les solutions

$$\begin{aligned} s_1 &= l \geq 0, \\ s_2 &= -l-1 < 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

La solution s_2 est à rejeter car elle conduit à des fonctions d'on-

de singulières à l'origine. Les fonctions d'onde radiales se comportent donc à l'origine comme

$$R_{nl} \approx r^l (1 + \dots) . \quad (4.7)$$

Ce comportement en fonction de l présente une très grande importance dans les phénomènes où interfèrent les électrons atomiques (longueur caractéristique : 10^{-9} cm) et le noyau atomique (longueur caractéristique : 10^{-13} cm).

5. Parité des fonctions d'onde

Nous allons étudier l'action, sur la fonction d'onde $\psi_{nlm}(\vec{r})$, de l'opérateur parité ou retournement d'espace \mathcal{P} , qui transforme \vec{r} en $-\vec{r}$. Pour ce faire, il est commode de réécrire ψ_{nlm} sous la forme

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = \left[r^{-l} R_{nl}(r) \right] \left[r^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \right] . \quad (5.1)$$

La fonction $r^{-l} R_{nl}(r)$ (régulière à l'origine) est invariante pour toutes les opérations qui laissent r invariant, en particulier pour la transformation $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. La fonction $r^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est un polynôme homogène en x, y, z de degré l . En opérant un retournement d'espace \mathcal{P} sur ce polynôme, il apparaît une phase $(-1)^l$. Cette phase est donc celle qui apparaît lorsque \mathcal{P} est appliqué à la fonction complète $\psi_{nlm}(\vec{r})$. Par conséquent la parité - valeur propre de l'opérateur \mathcal{P} - est donnée par $(-1)^l$.

6. Exemples de potentiels centraux

Deux potentiels centraux (ou à symétrie sphérique) se rencontrent couramment en physique atomique et en physique nucléaire: le potentiel coulombien

$$\bar{V}_1(r) = - \frac{Z e^2}{r} \quad (6.1)$$

et le potentiel d'oscillateur harmonique

$$\bar{V}_2(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2. \quad (6.2)$$

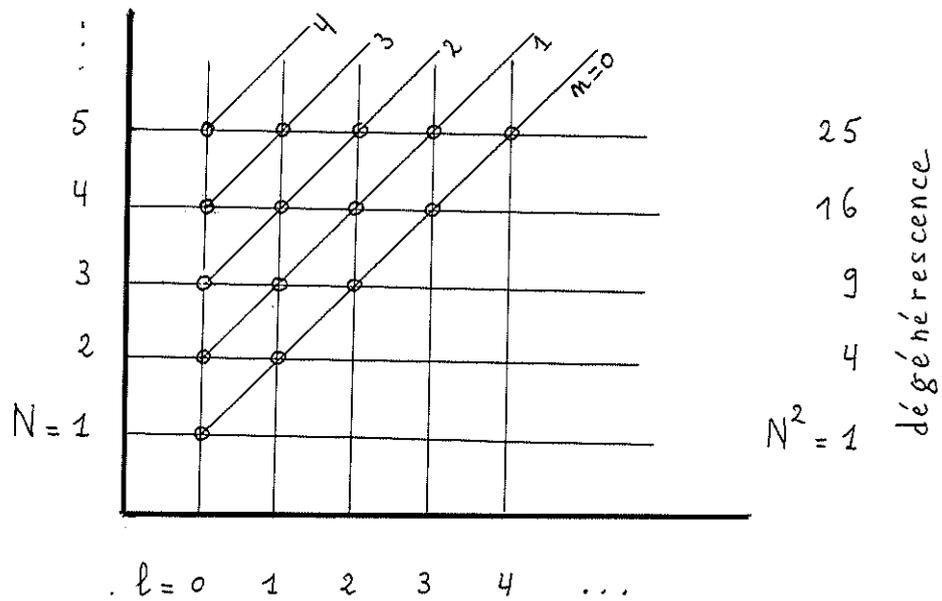
Quelques-unes de leurs propriétés importantes sont rappelées dans ce paragraphe. La quantification complète est donnée explicitement en appendice.

Dans chacun des deux cas, une symétrie particulière est responsable de la propriété suivante : les nombres quantiques n (nombre de noeuds radiaux) et l (nombre de noeuds angulaires) se combinent dans l'énergie E_{nl} sous une forme simple, ce qui entraîne une dégénérescence des niveaux d'énergie supérieure à la dégénérescence ($2l+1$) prévue pour un potentiel central quelconque.

Dans le cas hydrogénoïde, on a

$$E_{nl} = - \frac{Z^2 m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{(n+l+1)^2}. \quad (6.3)$$

On introduit habituellement le nombre quantique $N = n+l+1$ ($N = 1, 2, 3, \dots$), qui suffit à caractériser l'énergie. C'est ainsi que l'on parle des couches (d'énergie) $N = 1$ (appelée aussi couche K), $N = 2$ (couche L), $N = 3$ (couche M), etc. L'existence du nombre quantique N entraîne une dégénérescence N^2 par couche. Une représentation schématique du spectre est donnée dans la fig. 1.



$$\text{parité} = (-1)^l \rightarrow + \quad - \quad + \quad - \quad + \quad \dots$$

Fig. 1 Spectre de l'atome hydrogéoïde

Dans le cas de l'oscillateur harmonique, on a

$$E_{nl} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right). \quad (6.4)$$

On introduit habituellement le nombre quantique $N = 2n + l$ ($N=0,1,2,\dots$), qui suffit à caractériser l'énergie. La dégénérescence de la couche N est donnée par $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$. La parité d'un état étant donnée par $(-1)^l = (-1)^{l+2n} = (-1)^N$, on constate que chaque couche est de parité pure. Une représentation schématique du spectre est donnée dans la fig. 2.

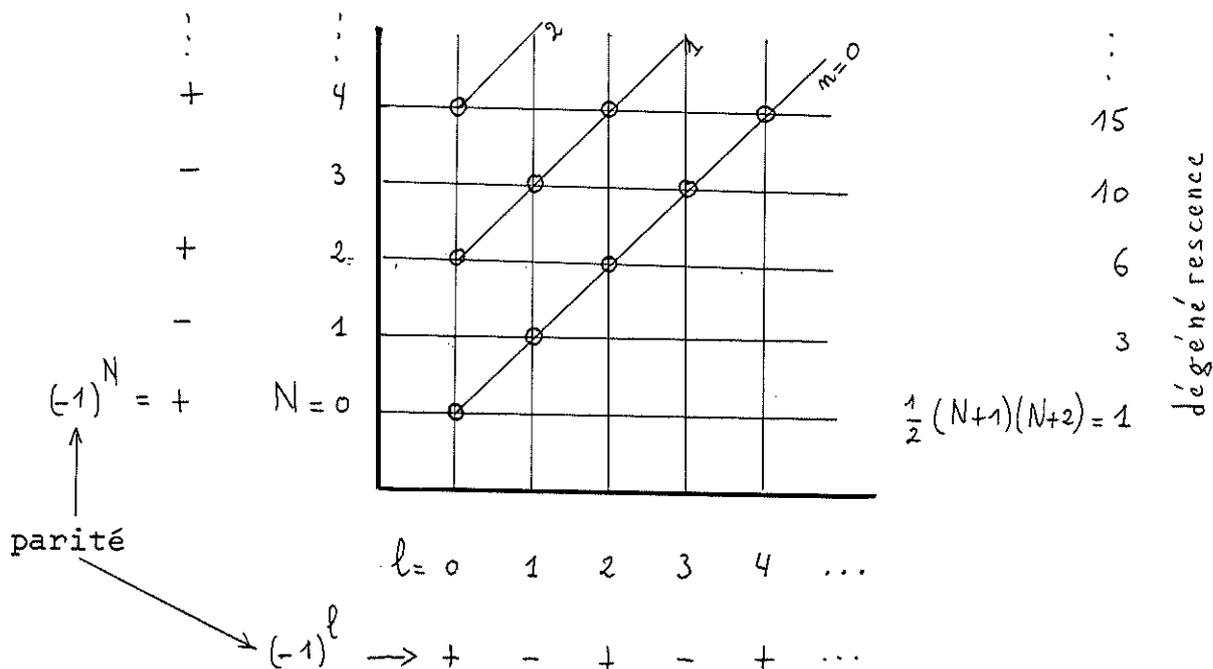


Fig. 2 Spectre de l'oscillateur harmonique

Par contre, le potentiel central appelé couramment "puits rectangulaire" ne jouit pas de symétries particulières conduisant à une combinaison simple des nombres quantiques n et l . Chaque état $E_{n\ell}$ n'est donc affecté que de la dégénérescence $(2\ell + 1)$ caractéristique des potentiels centraux.

7. Moment cinétique orbital

En mécanique classique, le moment cinétique d'une particule dans un champ central,

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}, \tag{7.1}$$

est une constante du mouvement. Le principe de correspondance ($\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$) le transforme en un opérateur vectoriel de composantes

$$L_i = \frac{\hbar}{i} (x_j \partial_{x_k} - x_k \partial_{x_j}), \tag{7.2}$$

qui commute avec le hamiltonien de la particule

$$[h_0, \bar{L}] = 0 . \quad (7.3)$$

Ici (i, j, k) représente une permutation circulaire de (1, 2, 3) avec $x_1 = x$, $x_2 = y$ et $x_3 = z$.

Les relations de commutation des composantes du moment cinétique résultent directement de la définition (7.2) et de la propriété du commutateur

$$[AB, CD] = A (C [B, D] + [B, C] D) + (C [A, D] + [A, C] D) B . \quad (7.4)$$

On a :

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= -\hbar^2 [x_j \partial_k - x_k \partial_j, x_k \partial_i - x_i \partial_k] \\ &= -\hbar^2 \{ [x_j \partial_k, x_k \partial_i] + [x_k \partial_j, x_i \partial_k] \} \\ &= -\hbar^2 \{ x_j [\partial_k, x_k] \partial_i + x_i [x_k, \partial_k] \partial_j \} \\ &= -\hbar^2 (x_j \partial_i - x_i \partial_j) \\ &= i\hbar L_k . \end{aligned} \quad (7.5)$$

L'opérateur

$$\bar{L}^2 = L_i^2 + L_j^2 + L_k^2 \quad (7.6)$$

jouit d'une propriété intéressante :

$$\begin{aligned} [\bar{L}^2, L_i] &= [L_j^2 + L_k^2, L_i] \\ &= L_j [L_j, L_i] + [L_j, L_i] L_j + L_k [L_k, L_i] + [L_k, L_i] L_k \\ &= L_j (-i\hbar L_k) + (-i\hbar L_k) L_j + L_k (i\hbar L_j) + (i\hbar L_j) L_k \\ &= 0 . \end{aligned} \quad (7.7)$$

Il en résulte que l'opérateur \bar{L}^2 peut être diagonalisé simultanément avec une de ses composantes. Traditionnellement, cette composante est choisie comme étant L_3 . Par conséquent, dans le cas d'une particule dans un champ central, on peut diagonaliser simultanément h_0 , \bar{L}^2 et L_3 . C'est ce que nous avons fait dans les paragraphes précédents, car il est facile de montrer par passage aux coordonnées sphériques dans (7.2) et (7.6) que les opérateurs \mathcal{L} et \mathcal{L}_φ ne sont autres que $-\frac{1}{\hbar^2} \bar{L}^2$ et $\frac{i}{\hbar} L_3$ respectivement. L'opérateur \bar{L} est connu sous le nom de moment cinétique orbital.

Il est commode d'introduire un opérateur sans dimension

$$\bar{l} = \frac{1}{\hbar} \bar{L} \quad , \quad (7.8)$$

jouissant des propriétés

$$[l_i, l_j] = i l_k \quad .$$

$$\begin{aligned} l_+ &= l_x + i l_y \\ l_- &= l_x - i l_y \end{aligned} \quad (7.9)$$

D'autre part, les définitions

$$l_{\pm} = l_1 \pm i l_2 \quad ,$$

$$l_0 = l_3 \quad ,$$

$$\begin{aligned} l_x &= \frac{1}{2} (l_+ + l_-) \\ l_y &= \frac{1}{2i} (l_+ - l_-) \end{aligned} \quad (7.10)$$

conduisent aux relations

$$[l_+, l_-] = 2 l_0 \quad ,$$

$$[l_0, l_{\pm}] = \pm l_{\pm} \quad .$$

(7.11)

Dans la suite du cours, nous réserverons le nom de moment cinétique orbital à l'opérateur sans dimension (7.8).

8. Extension de la définition du moment cinétique

Nous convenons d'appeler dorénavant moment cinétique tout opérateur vectoriel \bar{j} , dont les composantes sont hermitiques et

satisfont à des relations du même type que (7.11), c'est-à-dire

$$[j_+, j_-] = 2j_0, \quad (8.1a)$$

$$[j_0, j_{\pm}] = \pm j_{\pm}, \quad (8.1b,c)$$

où

$$j_{\pm} = j_1 \pm i j_2, \quad (8.2)$$

$$j_0 = j_3,$$

sans pour autant être nécessairement des opérateurs différentiels du type de (7.2). Cette définition a un sens car nous allons montrer qu'il existe effectivement des opérateurs, autres que le moment cinétique orbital \bar{l} , qui satisfont aux relations de commutation (8.1).

L'opérateur \bar{j}^2 , défini par

$$\bar{j}^2 = j_1^2 + j_2^2 + j_3^2 = j_+ j_- + j_0(j_0 - 1) = j_- j_+ + j_0(j_0 + 1), \quad (8.3)$$

possède la propriété

$$[\bar{j}^2, j_{\pm}] = [\bar{j}^2, j_0] = 0 \quad (8.4)$$

et l'on peut donc diagonaliser simultanément \bar{j}^2 et j_0 . Soit Γ l'ensemble des opérateurs qu'il faut ajouter à \bar{j}^2 et j_0 pour obtenir un ensemble complet d'observables qui commutent (par exemple, dans le cas d'une particule dans un champ central, on prenait h_0). Désignons par $|\gamma j m\rangle$ les vecteurs propres simultanés de Γ , \bar{j}^2 et j_0 , correspondant aux valeurs propres γ , λ_j et m respectivement :

$$\bar{j}^2 |\gamma j m\rangle = \lambda_j |\gamma j m\rangle, \quad (8.5a)$$

$$j_0 |\gamma j m\rangle = m |\gamma j m\rangle. \quad (8.5b)$$

Ici j est un symbole qui est supposé repérer de manière univoque les valeurs propres de \bar{j}^2 . Les vecteurs propres $|\gamma j m\rangle$ sont ortho-normés, c'est-à-dire

$$\langle \gamma' j' m' | \gamma j m \rangle = \delta_{\gamma' \gamma} \delta_{j' j} \delta_{m' m} . \quad (8.6)$$

Comme les opérateurs de moment cinétique n'affectent pas les valeurs propres γ , nous les omettrons dans la suite la plupart du temps, écrivant simplement $|j m\rangle$ à la place de $|\gamma j m\rangle$.

Nous allons déterminer les valeurs propres λ_j et m de \bar{j}^2 et j_0 . Nous remarquons d'abord qu'en vertu de (8.4),

$$\bar{j}^2 j_i |j m\rangle = j_i \bar{j}^2 |j m\rangle = \lambda_j j_i |j m\rangle , \quad (8.7)$$

où j_i désigne n'importe quelle composante ou combinaison linéaire de composantes de \bar{j} . Les opérateurs de moment cinétique transforment donc un vecteur $|j m\rangle$ en un autre vecteur qui est aussi vecteur propre de \bar{j}^2 correspondant à la même valeur propre. Par conséquent, nous pouvons restreindre nos considérations au sous-ensemble des vecteurs $|j m\rangle$ qui correspondent à la même valeur propre de \bar{j}^2 , c'est-à-dire à la même valeur du symbole j .

Considérons l'élément de matrice du commutateur (8.1b) entre un bra $\langle j m' |$ et un ket $|j m\rangle$. On obtient :

$$\begin{aligned} & \langle j m' | (j_0 j_+ - j_+ j_0) | j m \rangle \\ &= \langle j m' | j_0 | j m' \rangle \langle j m' | j_+ | j m \rangle - \langle j m' | j_+ | j m \rangle \langle j m | j_0 | j m \rangle \\ &= (m' - m) \langle j m' | j_+ | j m \rangle \\ &= \langle j m' | j_+ | j m \rangle , \end{aligned} \quad (8.8)$$

en utilisant le fait que j_0 n'a que des éléments de matrice diagonaux, donnés par (8.5b). On en déduit que les seuls éléments de matrice non nuls de j_+ sont ceux pour lesquels $m' - m = 1$ et l'on peut donc écrire

$$j_+ |j^m\rangle = \alpha_m |j^{m+1}\rangle, \quad (8.9)$$

où α_m est un nombre (en principe complexe) qu'il reste à déterminer.

Un traitement analogue du commutateur (8.1c) conduit à la conclusion que

$$j_- |j^m\rangle = \alpha'_m |j^{m-1}\rangle, \quad (8.10a)$$

où α'_m est également un nombre à déterminer. En fait, la définition (8.2) de j_{\pm} et l'hermiticité de j_1 et j_2 montrent que $j_- = j_+^*$. Par conséquent

$$\alpha'_m = \langle j^{m-1} | j_- | j^m \rangle = \langle j^{m-1} | j_+^+ | j^m \rangle = \langle j^m | j_+ | j^{m-1} \rangle^* = \alpha_{m-1}^*. \quad (8.11)$$

Nous utilisons la notation + pour désigner l'hermitique conjugué et * le complexe conjugué. La relation (8.10a) se réécrit donc

$$j_- |j^m\rangle = \alpha_{m-1}^* |j^{m-1}\rangle. \quad (8.10b)$$

Il reste à déterminer α_m , ce qui se fait en considérant un élément de matrice diagonal du commutateur (8.1a) :

$$\begin{aligned} & \langle j^m | (j_+ j_- - j_- j_+) | j^m \rangle \\ &= \langle j^m | j_+ | j^{m-1} \rangle \langle j^{m-1} | j_- | j^m \rangle - \langle j^m | j_- | j^{m+1} \rangle \langle j^{m+1} | j_+ | j^m \rangle \\ &= 2 \langle j^m | j_0 | j^m \rangle. \end{aligned} \quad (8.12)$$

On obtient une équation aux différences pour $|\alpha_m|^2$:

$$|\alpha_{m-1}|^2 - |\alpha_m|^2 = 2m, \quad (8.13)$$

dont la solution générale contient une constante arbitraire C :

$$|x_m|^2 = C - m(m+1). \quad (8.14)$$

Pour toute valeur finie de C , le membre de droite de (8.14) devient négatif pour des valeurs positives ou négatives, suffisamment grandes de m . Cependant $|x_m|^2$ doit être non négatif. Il y a donc une contradiction. La manière de faire disparaître cette contradiction est la suivante : partant d'un état $|j^m\rangle$ correspondant à une valeur de m pour laquelle le membre de droite de (8.14) est > 0 , on engendre une chaîne de vecteurs à m croissant, $|j^{m+1}\rangle, |j^{m+2}\rangle, \dots$ par application successive de j_+, j_+^2, \dots ; les valeurs > 0 de m pour lesquelles le membre de droite de (8.14) est < 0 , ne seront pas atteintes si à un moment donné la chaîne s'arrête, c'est-à-dire s'il existe une valeur > 0 de m , m_{\max} , pour laquelle

$$x_{m_{\max}} = 0 \quad (8.15)$$

$$\text{ou } j_+ |j^{m_{\max}}\rangle = 0. \quad (8.16)$$

A partir du même vecteur $|j^m\rangle$, on peut former une chaîne descendante $|j^{m-1}\rangle, |j^{m-2}\rangle, \dots$ par application successive de j_-, j_-^2, \dots ; les valeurs < 0 de m , pour lesquelles le membre de droite de (8.14) est < 0 , ne seront pas atteintes si à un moment donné la chaîne s'arrête, c'est-à-dire s'il existe une valeur < 0 de m , m_{\min} , pour laquelle

$$x_{m_{\min}-1} = 0 \quad (8.17)$$

$$\text{ou } j_- |j^{m_{\min}}\rangle = 0. \quad (8.18)$$

En vertu de (8.14), (8.15) et (8.17), on a

$$C = m_{\max}(m_{\max} + 1) = (m_{\min} - 1)m_{\min} = |m_{\min}|(|m_{\min}| + 1) \quad (8.19)$$

$$\text{et } m_{\max} = |m_{\min}|. \quad (8.20)$$

Les valeurs propres de j_0 varient donc par pas de 1 dans le domaine fini

$$m_{\min} = -m_{\max}, m_{\min} + 1, \dots, m_{\max} - 1, m_{\max}. \quad (8.21)$$

L'écart entre les valeurs maximum et minimum de m , égal à $2m_{\max}$, doit être un entier positif. Par conséquent m_{\max} peut seulement prendre les valeurs $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$.

Les valeurs propres de \bar{j}^2 découlent directement de (8.3) :

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \langle f^m | \bar{j}^2 | f^m \rangle \\ &= \langle f^m | [j_- j_+ + j_0(j_0 + 1)] | f^m \rangle \\ &= \langle f^m | j_- | f^{m+1} \rangle \langle f^{m+1} | j_+ | f^m \rangle + \langle f^m | j_0(j_0 + 1) | f^m \rangle \\ &= |\alpha_m|^2 + m(m+1) \\ &= m_{\max} (m_{\max} + 1). \end{aligned} \quad (8.22)$$

Elles sont, comme il était prévu, indépendantes de m et peuvent être repérées par le nombre positif m_{\max} , que nous identifions au symbole j .

Nous avons donc établi le théorème important suivant :

Les vecteurs propres simultanés $|f^m\rangle$ de \bar{j}^2 et j_0 satisfont à

$$\bar{j}^2 |f^m\rangle = j(j+1) |f^m\rangle, \quad (8.23)$$

$$j_0 |f^m\rangle = m |f^m\rangle, \quad (8.24)$$

où les valeurs de j et m sont soumises aux restrictions suivantes :

1. j peut prendre n'importe quelle valeur positive, entière ou demi-entière, $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$;
2. pour une valeur donnée de j , m peut prendre les $(2j+1)$ valeurs $m = -j, -j + 1, \dots, j-1, j$.

Nous avons vu antérieurement que les valeurs entières de j correspondent au moment cinétique orbital \bar{l} :

$$\bar{l}^2 |l m\rangle = l(l+1) |l m\rangle \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad , \quad (8.25)$$

$$l_0 |l m\rangle = m |l m\rangle \quad -l \leq m \leq l \quad , \quad (8.26)$$

$$|l m\rangle = Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (8.27)$$

Les valeurs demi-entières de j correspondent à des moments cinétiques qui n'ont pas d'analogue classique. En particulier, $j = \frac{1}{2}$ est le moment cinétique de spin de l'électron.

Les opérateurs de moment cinétique sont représentés dans la base $|j m\rangle$, pour une valeur donnée de j , par une matrice de dimension $2j + 1$.

Les éléments de matrice de j_+ et j_- sont donnés par (8.9), (8.10b), (8.14) et (8.19), mais seulement à une phase près (celle de x_m). Cette phase est complètement arbitraire, mais une fois qu'un choix a été effectué, il doit être adopté dans tous les calculs subséquents pour ne pas aboutir à des inconsistances. Nous adopterons la convention de Condon et Shortley, suivant laquelle la phase de x_m est prise égale à $+1$.

On obtient alors

$$\langle j^{m\pm 1} | j_{\pm} | j^m \rangle = \left[(j \mp m)(j \pm m + 1) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (8.28)$$

$$\langle j^m | j_0 | j^m \rangle = m. \quad (8.29)$$

De (8.28), on déduit que les éléments de matrice non nuls de

$$J_1 = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) \quad (8.30)$$

et $J_2 = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-)$ (8.31)

sont

$$\langle J \ m \pm 1 | J_1 | J \ m \rangle = \frac{1}{2} \left[(J \mp m)(J \pm m + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (8.32)$$

et $\langle J \ m \pm 1 | J_2 | J \ m \rangle = \mp \frac{i}{2} \left[(J \mp m)(J \pm m + 1) \right]^{\frac{1}{2}}$. (8.33)

9. Moment cinétique de spin

Revenons un instant sur les valeurs demi-entières du moment cinétique j et en particulier sur la plus petite d'entre elles, $j = \frac{1}{2}$. Les matrices de représentation des opérateurs de moment cinétique dans l'espace des vecteurs propres à $j = \frac{1}{2}$ sont données en vertu de (8.29), (8.32) et (8.33) par

$$S_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9.1)$$

où l'on a classé les valeurs de m en ordre décroissant. Les matrices 2×2

$$\sigma_i = 2 S_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (9.2)$$

sont les matrices de Pauli. On a également *(établir directement à partir des formules à g.)*

$$S_+ = S_1 + i S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S_- = S_1 - i S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (9.3)$$

$$S_0 = S_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

et l'on vérifie aisément par multiplication matricielle que

$$\begin{aligned} [s_+, s_-] &= 2 s_0, \\ [s_0, s_{\pm}] &= \pm s_{\pm}. \end{aligned} \tag{9.4}$$

L'opérateur \bar{s} , dont les composantes ont pour représentation matricielle s_1, s_2 et s_3 est le moment cinétique de spin. Les vecteurs propres simultanés de \bar{s}^2 et s_0 sont les vecteurs colonnes ou spineurs à deux composantes

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle &= \chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle &= \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{9.5}$$

10. Renversement du temps

Dans ce paragraphe, nous allons étudier l'effet de l'opération de renversement du temps sur les vecteurs propres du moment cinétique.

En mécanique classique, les systèmes dont le lagrangien ne contient pas de terme linéaire par rapport aux vitesses, sont invariants par renversement du temps : si $\bar{r}(t)$ est une solution des équations du mouvement, la fonction $\bar{r}_{ren}(t)$ définie par

$$\bar{r}_{ren}(t) = \bar{r}(-t) \tag{10.1}$$

est aussi solution de ces équations. On a de plus

$$\bar{p}_{ren}(t) = -\bar{p}(-t). \tag{10.2}$$

Il en est ainsi entre autres dans le cas d'un système de particules placées dans un potentiel statique.

En mécanique quantique, l'opération de renversement du

temps est une transformation des variables et des états dynamiques du système dans laquelle \bar{r} et \bar{p} se transforment en \bar{r} et $-\bar{p}$ respectivement. Désignons par K l'opérateur qui effectue cette transformation. Par définition

$$K \bar{r} K^{-1} = \bar{r} , \quad (10.3)$$

$$K \bar{p} K^{-1} = -\bar{p} . \quad (10.4)$$

Le système est invariant par renversement du temps si son hamiltonien H est tel que

$$[H, K] = 0 . \quad (10.5)$$

Considérons l'équation de Schrödinger dépendant du temps d'un système invariant par renversement du temps :

$$(i\hbar \partial_t - H) \psi(t) = 0 . \quad (10.6)$$

Appliquons-lui l'opérateur K . L'équation devient en tenant compte de (10.5) :

$$(-i\hbar \partial_t - H) K \psi(t) = 0 \quad (10.7)$$

soit encore :

$$(i\hbar \partial_t - H) K \psi(-t) = 0 . \quad (10.8)$$

Donc, si $\psi(t)$ obéit à l'équation de Schrödinger, la fonction d'onde

$$\psi_{ren}(t) \equiv K \psi(-t) \quad (10.9)$$

lui obéit également. La fonction d'onde ψ_{ren} à un instant quelconque t est la transformée par renversement du temps de la fonction d'onde ψ à l'instant $-t$.

Revenons à l'équation (10.6) et appliquons-lui cette fois

l'opérateur de conjugaison complexe K_0 . L'équation devient

$$(-i\hbar\partial_t - H) \psi^*(t) = 0. \quad (10.10)$$

En comparant (10.7) et (10.10), on déduit que $K\psi(t)$ et $\psi^*(t)$ ne peuvent différer que par une transformation unitaire U indépendante du temps :

$$K\psi(t) = U\psi^*(t) = UK_0\psi(t). \quad (10.11)$$

Par conséquent

$$K = UK_0 \quad (10.12)$$

et son inverse vaut

$$K^{-1} = K_0^{-1}U^{-1} = K_0U^{-1} \quad (10.13)$$

puisque $K_0^{-1} = K_0$. Comme \bar{r} est un opérateur réel, tandis que \bar{p} est un opérateur imaginaire pur, on a

$$K_0\bar{r}K_0 = \bar{r}, \quad (10.14)$$

$$K_0\bar{p}K_0 = -\bar{p}. \quad (10.15)$$

Les relations (10.3) et (10.4) entraînent donc que

$$U\bar{r}U^{-1} = \bar{r}, \quad (10.16)$$

$$U\bar{p}U^{-1} = \bar{p}. \quad (10.17)$$

Examinons maintenant l'effet de l'opérateur K sur le moment cinétique orbital $\bar{l} = \frac{1}{\hbar}\bar{r} \wedge \bar{p}$. Comme conséquence directe de (10.3) et (10.4), on obtient

$$K\bar{l}K^{-1} = -\bar{l}. \quad (10.18)$$

L'opérateur \bar{l} étant un moment cinétique particulier, sa loi de transformation doit être la même que celle de n'importe quel moment cinétique et par conséquent

$$K \bar{j} K^{-1} = -\bar{j} . \quad (10.19)$$

En particulier, pour le moment cinétique de spin on a

$$K \bar{s} K^{-1} = -\bar{s} , \quad (10.20)$$

et en tenant compte de (9.1) ,

$$\begin{aligned} K_0 s_1 K_0 &= s_1 , \\ K_0 s_2 K_0 &= -s_2 , \\ K_0 s_3 K_0 &= s_3 , \end{aligned} \quad (10.21)$$

d'où

$$\begin{aligned} U s_1 U^{-1} &= -s_1 , \\ U s_2 U^{-1} &= s_2 , \\ U s_3 U^{-1} &= -s_3 . \end{aligned} \quad (10.22)$$

Pour une particule sans spin, dotée seulement d'un moment cinétique orbital \bar{l} , les relations (10.16) et (10.17) définissent la transformation unitaire U, qui se réduit à une phase arbitraire $e^{i\varphi}$ (qui n'a pas de signification physique). Nous choisissons de prendre $\varphi = l\pi$, de telle sorte que

$$K = e^{il\pi} K_0 \quad (10.23)$$

et

$$\begin{aligned}
K |l m\rangle &= K Y_{lm}(\theta, \varphi) \\
&= e^{i l \pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) \\
&= (-1)^{l+m} Y_{l-m}(\theta, \varphi)
\end{aligned}
\tag{10.24}$$

en vertu de (3.49).

Pour une particule de spin $\frac{1}{2}$, les relations (10.16), (10.17) et (10.22) définissent la transformation unitaire U . Les relations (10.22) peuvent se récrire sous la forme

$$\begin{aligned}
\{U, \sigma_1\} &= 0, \\
[U, \sigma_2] &= 0, \\
\{U, \sigma_3\} &= 0,
\end{aligned}
\tag{10.25}$$

où $\{U, \sigma_i\}$ désigne l'anticommutateur de U et σ_i , c'est-à-dire $U\sigma_i + \sigma_i U$. Or on sait que

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}
\tag{10.26}$$

et

$$[\sigma_i, \sigma_i] = 0.
\tag{10.27}$$

Par conséquent, la transformation U est du type

$$U = e^{i\varphi'} \sigma_2,
\tag{10.28}$$

où φ' est une phase arbitraire, que nous prendrons égale à $\pi/2$. L'opérateur de renversement du temps s'écrit donc pour une particule de spin $\frac{1}{2}$:

$$K = i\sigma_2 K_0.
\tag{10.29}$$

Son action sur les spineurs $\chi_{m_s} (m_s = \pm \frac{1}{2})$ définis par (9.5) est

donnée par

$$\begin{aligned} K \chi_{m_s} &= i \sigma_2 K_0 \chi_{m_s} \\ &= i \sigma_2 \chi_{m_s} , \end{aligned} \quad (10.30)$$

où

$$\begin{aligned} \sigma_2 \chi_{1/2} &= i \chi_{-1/2} , \\ \sigma_2 \chi_{-1/2} &= -i \chi_{1/2} . \end{aligned} \quad (10.31)$$

Ces dernières relations résultent soit de l'application de l'expression générale (8.33) des éléments de matrice de j_2 pour un moment cinétique quelconque, soit de la forme explicite de σ_2 et χ_{m_s} donnée au § 9. On peut donc écrire

$$K \chi_{m_s} = (-1)^{\frac{1}{2} + m_s} \chi_{-m_s} . \quad (10.32)$$

Le choix, que nous avons opéré pour les phases arbitraires φ et φ' qui entrent dans U , a pour effet que les vecteurs propres du moment cinétique orbital et du moment cinétique de spin se transforment de la même manière sous l'effet du renversement du temps. Les formules (10.24) et (10.32) peuvent se récrire en toute généralité

$$K |j m\rangle = (-1)^{j+m} |j -m\rangle . \quad (10.33)$$