Correction de série 3, 2015-2016.

Exo 1

On a : $\vec{P} = -|q|\vec{r} = -|q|(x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k})$

Donc : $\left.\begin{aligned} P_x &= -|q| r\sin\theta\cos\varphi \\ P_y &= -|q| r\sin\theta\sin\varphi \\ P_z &= -|q| r\cos\theta \end{aligned}\right\}$ coord sphériques

D'où : $P_+ = P_x + iP_y$

$$= -|q| r\sin\theta\, e^{i\varphi} = |q|\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, r\, Y_l^1(\theta,\varphi).$$

$P_- = P_x - iP_y$

$$= -|q| r\sin\theta\, e^{-i\varphi} = -|q|\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, r\, Y_l^{-1}(\theta,\varphi)$$

$$P_z = -|q|\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, r\, Y_l^0(\theta,\varphi).$$

2) $\langle a|\vec{P}|b\rangle = \langle a|P_x|b\rangle\vec{i} + \langle a|P_y|b\rangle\vec{j} + \langle a|P_z|b\rangle\vec{j}$

$$= \frac{1}{2}\langle a|P_+ + P_-|b\rangle\vec{i} + \frac{1}{2i}\langle a|P_+ - P_-|b\rangle\vec{j} + \langle a|P_z|b\rangle\vec{k}$$

D'où : $S_{ab} = |\langle a|\vec{P}|b\rangle|^2$

$$= \frac{1}{2}|\langle a|P_+|b\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle a|P_-|b\rangle|^2 + |\langle a|P_z|b\rangle|^2$$

Les règles de sélection $S_{ab} \neq 0$.

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle a|P_+|b\rangle \neq 0 \\ \langle a|P_-|b\rangle \neq 0 \\ \langle a|P_z|b\rangle \neq 0 \end{cases}$$

Calcul de $\langle a|P_+|b\rangle$.

$$\langle a|P_+|b\rangle = \int_0^\infty\int_0^{2\pi}\int_0^\pi R_{n_a l_a}\left[Y_{l_a}^{m_{l_a}}(\theta,\varphi)\right] R_{n_b l_b} Y_{l_b}^{m_{l_b}}(\theta,\varphi) \times |q|\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, r\, Y_1^1(\theta,\varphi)\, r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$$

$$= |q|\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\int_0^\infty R_{n_a l_a} R_{n_b l_b} r^3 dr \times \int_0^{2\pi}\int_0^\pi \left[Y_{l_a}^{m_{l_a}}(\theta,\varphi)\right] Y_1^1(\theta,\varphi)\, Y_{l_b}^{m_{l_b}}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

avec $Y_1^1(\theta,\varphi)\, Y_l^{m_l}(\theta,\varphi) = \alpha Y_{l+1}^{m_l+1} + \beta Y_{l-1}^{m_l+1}(\theta,\varphi)$

$$\langle a|P_+|b\rangle = |q|\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\int_0^\infty \underbrace{R_{n_a l_a} R_{n_b l_b}}_{\neq 0} r^3 dr$$

$$\times\, \alpha\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y_{l_a+1}^{m_{l_a}+1}\, Y_{l_b}^{m_{l_b}}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi + \beta\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y_{l_a-1}^{m_{l_a}+1}\, Y_{l_b}^{m_{l_b}}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

$$= |q|\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\int_0^\infty R_{n_a l_a} R_{n_b l_b} r^3 dr$$

$$\alpha\,\delta_{l_a+1,l_b}\,\delta_{m_{l_a}+1,m_{l_b}} + \beta\,\delta_{l_a-1,l_b}\,\delta_{m_{l_a}+1,m_{l_b}}$$

l'intégral est nulle si.

$l_a + 1 = l_b$ et $m_{l_a} + 1 = m_{l_b}$

$l_a - 1 = l_b$ et $m_{l_a} + 1 = m_{l_b}$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Delta l = l_b - l_a = \pm 1 \\ \Delta m_l = m_{l_b} - m_{l_a} = +1 \end{cases}$$

→ un calcul similaire pour P_- et P_z, on aura

$$\begin{cases} \Delta l = l_b - l_a = \pm 1 \\ \Delta m_l = m_{l_b} - m_{l_a} = -1 \end{cases}$$

~~En résumé les règles de sélection sont~~ $\cancel{\Delta l = \pm 1}$ $\cancel{\Delta m_l = 0, \pm 1}$.

$$\begin{cases} \Delta l = l_b - l_a = \pm 1 \\ \Delta m_l = m_{l_b} - m_{l_a} = 0 \end{cases}$$

En résumé les règles de sélection sont

$$\begin{cases} \Delta l = \pm 1 \\ \Delta m_l = 0, \pm 1. \end{cases}$$