TP1

Le but des deux TPs est d'étudier une particule quantique dans un potentiel attractif de Coulomb $U(r) = -\frac{\alpha}{r}$, $\alpha > 0$ en 3D (atome d'hydrogène).

Partie I (mouvement classique)

On commence par considérer une particule classique dans un potentiel quelconque $U(r)$ à symétrie sphérique. Les équations du mouvement sont

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \\ \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} = -\nabla U = -\frac{dU}{dr}\,\mathbf{e}_r. \end{cases} \tag{1}$$

Questions théoriques:

1. Montrer que le moment angulaire $\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$ est conservé; c'est-à-dire, $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0$.
2. Même chose pour l'énergie totale $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r)$.
3. A l'aide de la conservation du moment angulaire justifier que le mouvement est plan.

En introduisant les coordonnées polaires r, φ dans le plan du mouvement, on peut montrer que les équations (1) s'écrivent sous la forme

$$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = \frac{2}{m}\Big(E - U_{eff}(r)\Big), \qquad \frac{d\varphi}{dt} = \frac{L}{mr^2}, \tag{2}$$

où $U_{eff}(r) = U(r) + \frac{L^2}{2mr^2}$. De même, en coordonnées cartésiennes x, y on a

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m}, \qquad \frac{dy}{dt} = \frac{p_y}{m}, \tag{3}$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{x}{r}\cdot\frac{dU}{dr}, \qquad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{y}{r}\cdot\frac{dU}{dr}. \tag{4}$$

On veut résoudre ces équations différentielles numériquement. Pour ceci:

- Choisissons les unités de masse de telle manière que $m = 0.5$.
- Fixons les conditions initiales, par exemple en posant $x(t=0) = 1.0$, $y(t=0) = 1.0$, $p_x(t=0) = -0.4$, $p_y(t=0) = 0.6$.
- Considèrons deux potentiels différents:
  1) celui de Coulomb, $U_1(r) = -\frac{\alpha}{r}$, avec $\alpha = 2.8$ et
  2) n'importe quel autre potentiel, par exemple, $U_2(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{0.3}{r^{3/2}}$.

Questions:

4. A l'aide du Maple, tracer les graphes de $U_{eff}(r)$ dans les deux cas. `plot`

5. Résoudre numériquement les équations (3), (4) sur l'intervalle $t \in [0, 100]$ et tracer les trajectoires de la particule dans les deux cas. Quelle est la différence entre ces trajectoires? `dsolve`, `odeplot`

6. Répéter avec d'autres valeurs de paramètres et d'autres potentiels $U_2(r)$. Conclure.

Questions théoriques:

7. Montrer que dans le cas du potentiel de Coulomb $U(r) = -\dfrac{\alpha}{r}$ la quantité vectorielle

$$\mathbf{A} = \frac{1}{m}\,\mathbf{p} \wedge \mathbf{L} - \alpha\,\frac{\mathbf{r}}{r}$$

est conservée: $\dfrac{d\mathbf{A}}{dt} = 0$. Comment peut-on interpréter cette conservation inattendue dans le cadre des résultats précédents?

8. Quelles sont les conséquences possibles de la conservation de $\mathbf{A}$ pour une particule quantique dans le potentiel de Coulomb? (pour le spectre/états propres de l'hamiltonien, etc)