TP2

On utilise les notations du cours:

$$\hat{p}_x = -i\partial_x, \qquad \hat{p}_y = -i\partial_y, \qquad \hat{p}_z = -i\partial_z,$$
$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

Nous allons étudier une particule quantique dans un potentiel attractif de Coulomb en 3D (atome d'hydrogène ou problème quantique de Kepler). Ce système est décrit par l'hamiltonien

$$\hat{H} = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 - \frac{\alpha}{r}, \qquad \alpha > 0.$$

Cet hamiltonien commute avec les composantes du moment angulaire $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$.

Nous avons vu qu'en mécanique classique le vecteur $\mathbf{A} = 2\mathbf{p} \wedge \mathbf{L} - \alpha \dfrac{\mathbf{r}}{r}$ est une intégrale du mouvement dans le problème de Kepler. On peut donc essayer de construire un opérateur associé à cette quantité, qui commuterait avec l'hamiltonien $\hat{H}$.

1. Soient $\hat{P}$, $\hat{Q}$, $\hat{R}$ trois opérateurs quelconques. Montrer que
$$[\hat{P}\hat{Q}, \hat{R}] = [\hat{P}, \hat{R}]\hat{Q} + \hat{P}[\hat{Q}, \hat{R}].$$

2. Montrer que $[\hat{L}_z, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] = 0$. En déduire que
$$\left[\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}}, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] = \left[\hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}}, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] = 0.$$

3. Montrer que $\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}} = 2i\hat{\mathbf{p}}$.

4. Montrer que l'opérateur $\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}}$ est symétrique, tandis que $\hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}}$ ne l'est pas.

A l'aide de Maple:

5. Montrer que l'opérateur
$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{p}} \wedge \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}} - \alpha\frac{\mathbf{r}}{r} = 2i\hat{\mathbf{p}} - 2\hat{\mathbf{L}} \wedge \hat{\mathbf{p}} - \alpha\frac{\mathbf{r}}{r},$$
commute avec l'hamiltonien $\hat{H}$, c'est-à-dire, $[\hat{A}_x, \hat{H}] = [\hat{A}_y, \hat{H}] = [\hat{A}_z, \hat{H}] = 0$.

6. Comme $\hat{\mathbf{A}}$ et $\hat{\mathbf{L}}$ sont des intégrales du mouvement (commutent avec $\hat{H}$), alors les commutateurs $[\hat{A}_j, \hat{A}_k]$, $[\hat{L}_j, \hat{A}_k]$, $j, k = x, y, z$ le sont également. On veut exprimer ces quantités en foction des intégrales du mouvement déjà connues. Montrer que
$$[\hat{A}_x, \hat{A}_y] = -4i\hat{H}\hat{L}_z, \qquad [\hat{A}_y, \hat{A}_z] = -4i\hat{H}\hat{L}_x, \qquad [\hat{A}_z, \hat{A}_x] = -4i\hat{H}\hat{L}_y,$$
$$[\hat{A}_x, \hat{L}_x] = [\hat{A}_y, \hat{L}_y] = [\hat{A}_z, \hat{L}_z] = 0,$$
$$[\hat{L_x}, \hat{A}_y] = -[\hat{L_y}, \hat{A}_x] = i\hat{A}_z,$$
$$[\hat{L_y}, \hat{A}_z] = -[\hat{L_z}, \hat{A}_y] = i\hat{A}_x,$$
$$[\hat{L_z}, \hat{A}_x] = -[\hat{L_x}, \hat{A}_z] = i\hat{A}_y.$$

7. Montrer que
$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{L}_x\hat{A}_x + \hat{L}_y\hat{A}_y + \hat{L}_z\hat{A}_z = 0.$$

Que peut-on en déduire sur le spectre de $\hat{H}$?