M1 PGA & SDUEE Année 2007–08

Physique quantique appliquée

Travaux dirigés n°4 : Théorème d'Ehrenfest et constantes du mouvement

Soit un système physique évoluant grâce à l'Hamiltonien $H = \frac{\overrightarrow{p}^2}{2m} + V\left(\overrightarrow{r}\right)$ et soit A un opérateur quelconque.

I - Théorème d'Ehrenfest

I.1 - Ecrire l'équation de Schrödinger pour l'état $|\psi(t)\rangle$.

I.2 - Que signifie-t-on par $\langle A\rangle$?

I.3 - Quelle est l'expression de $\frac{d\langle A\rangle}{dt}$?

I.4 - Que vaut $\frac{d\langle A\rangle}{dt}$ pour $A = \widehat{x}$? $A = \widehat{\overrightarrow{r}}$? $A = \widehat{p}\ (= \widehat{p_x})$? $A = \widehat{\overrightarrow{p}}$? Comparez ces équations aux équations du mouvement de la mécanique classique.

I.5 - Pour un oscillateur harmonique unidimensionnel, l'Hamiltonien s'écrit $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$. Donner $\frac{d\langle\widehat{x}\rangle}{dt}$ et $\frac{d\langle\widehat{p}\rangle}{dt}$. Conclusion.

I.6 - Résoudre les deux équations précédentes pour $\langle\widehat{x}\rangle(t)$ et $\langle\widehat{p}\rangle(t)$ en fonction de $\langle\widehat{x}\rangle(t_0) = x_0$ et $\langle\widehat{p}\rangle(t_0) = p_0$.

I.7 - Quelle est la forme de H la plus générale qui permet de retrouver les équations de la mécanique classique ? Interprétez les différents termes de cet Hamiltonien.

II - Constantes du mouvement en Mécanique Quantique

En Mécanique Classique, une grandeur A_{class} est dite "conservée" (et appelée "constante du mouvement" ou "intégrale première") lorsque sa dérivée (totale) est nulle : $\frac{dA_{class}}{dt} = 0$. Comme la valeur moyenne $\langle A\rangle$ d'un opérateur A (en Mécanique Quantique) évolue très souvent comme la grandeur classique associée (cf la partie I), on peut donner une première définition d'une grandeur conservée en Mécanique Quantique : A sera un opérateur "conservé" (appelé aussi un "opérateur intégrale première") lorsqu'on aura $\frac{d\langle A\rangle}{dt} = 0$ pour toute fonction d'onde intervenant dans la valeur moyenne $\langle A\rangle$.

II.1 - Donnez l'équation que vérifie A dans ce cas ?

II.2 - Plus précisément, soit A une observable de valeurs propres (discrètes) a_n associées aux vecteurs propres $|\varphi_n\rangle$. Si à t_0 on mesure A et que l'on trouve la valeur propre a_i, alors, juste après t_0, le système est dans l'état $|\varphi_i\rangle$:

$$A\,|\varphi_i\rangle = a_i\,|\varphi_i\rangle$$

et à $t > t_0$, le système est décrit par l'état $|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|\varphi_j\rangle$ où $|c_j(t)|^2$ donne la probabilité d'obtenir a_j dans une seconde mesure de A. En général, on n'est donc pas sûr de retrouver ultérieurement le même a_i dans une mesure de A.
Pour que A soit un "opérateur intégrale première", on exige donc que l'état $|\psi(t)\rangle$, évolué de $|\varphi_i\rangle$ dans le temps, reste vecteur propre de A pour la même valeur propre a_i.
Donnez les deux équations que doit satisfaire $|\psi(t)\rangle$ et retrouvez l'équation que vérifie A obtenue en $II.1$.

II.3 - Dans quels cas H est-il opérateur intégrale première ?

III - Symétries et constantes du mouvement

En mécanique quantique - comme en mécanique classique - toute "symétrie" continue d'un système dynamique entraîne l'existence d'une intégrale première associée (opérateur A).

III.1 - Dans le cas d'une particule libre ($H = \frac{\overrightarrow{p}^2}{2m}$) est-ce que $\widehat{\overrightarrow{p}}$, $\widehat{\overrightarrow{r}}$ et $\widehat{\overrightarrow{r}} - \frac{\widehat{\overrightarrow{p}}}{m}t$ sont opérateurs intégrales premières ? Quelles sont les symétries associées ?

III.2 - On suppose $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$. Que peut-on dire des états propres de A et H ?

Si l'équation $A\left|\varphi\right\rangle = a\left|\varphi\right\rangle$ est plus simple à résoudre que celle sur H ($H\left|\phi\right\rangle = E\left|\phi\right\rangle$), on commencera donc par la résoudre, puis on reportera la solution dans l'équation sur H.

III.3 - Pour une particule à 3 dimensions, de combien de variables dépend la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger ?

Pourquoi dit-on alors que le cas le plus favorable (pour une particule à 3D) est celui où on a : “Un ECOC de 3 opérateurs, intégrales premières, de complexité croissante, permettant la séparation des variables” ?

IV - Potentiel central

Pour un potentiel central $V\left(\overrightarrow{r}\right) = V\left(r\right)$ (c'est-à-dire à symétrie sphérique), on montre que $\left[L_i, V\left(r\right)\right] = 0$ (pour $i = x, y, z$) et on note $\left[\overrightarrow{L}, V\left(r\right)\right] = \overrightarrow{0}$. L'opérateur $\overrightarrow{L}$ est l'opérateur moment cinétique, défini par $\overrightarrow{L} = \overrightarrow{r} \wedge \overrightarrow{p}$ (on écrit aussi $L_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk}\ x_j\ p_k$ où ϵ_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique de Levi-Civita).

IV.1 - Que valent les commutateurs $\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right]$ et $\left[\overrightarrow{L}, H\right]$?

IV.2 - Que vaut $\left[\overrightarrow{L}^2, H\right]$?

IV.3 - Sachant que $\left[L_i, L_j\right] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk}\ L_k$ (i.e. que $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $\left[L_y, L_z\right] = i\hbar L_x$ et $\left[L_z, L_x\right] = i\hbar L_y$), montrer que $\left[\overrightarrow{L}^2, \overrightarrow{L}\right] = \overrightarrow{0}$ et donner un ECOC de 3 opérateurs intégrales premières.

IV.4 - En coordonnées sphériques $\overrightarrow{r} = (r, \theta, \varphi)$ on a :

$$\begin{aligned}
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
\overrightarrow{L}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\left(\theta\right)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\left(\theta\right)\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\left(\theta\right)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \\
H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V\left(r\right) + \frac{\overrightarrow{L}^2}{2mr^2}
\end{aligned}$$

Avec $\left\{L_z, \overrightarrow{L}^2, H\right\}$, est-on dans un exemple de "cas le plus favorable" décrit dans la question $III.3$?

Justifiez alors que l'on cherche des solutions générales à l'équation de Schrödinger en posant :

$$\begin{aligned}
\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) &= \Phi\left(\overrightarrow{r}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \\
\Phi\left(\overrightarrow{r}\right) &= R\left(r\right)S\left(\theta\right)T\left(\varphi\right)
\end{aligned}$$

où E est solution de $H\left|\Phi\right\rangle = E\left|\Phi\right\rangle$.
Les fonctions $Y\left(\theta, \varphi\right) = S\left(\theta\right)T\left(\varphi\right)$ sont appelées "harmoniques sphériques".

Corrigé du TD 4

I - Théorème d'Ehrenfest

I.1 - Ecrire l'équation de Schrödinger pour l'état $|\psi(t)\rangle$.

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

I.2 - Que signifie-t-on par $\langle A\rangle$?

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

I.3 - Quelle est l'expression de $\frac{d\langle A\rangle}{dt}$?

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle$$

I.4 - Que vaut $\frac{d\langle A\rangle}{dt}$ pour $A=\widehat{x}$? $A=\widehat{\overrightarrow{r}}$? $A=\widehat{p}\ (=\widehat{p_x})$? $A=\widehat{\overrightarrow{p}}$? Comparez ces équations aux équations du mouvement de la mécanique classique.

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}$$

$$\frac{d\langle\overrightarrow{r}\rangle}{dt} = \frac{\langle\overrightarrow{p}\rangle}{m} \tag{1}$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

$$\frac{d\langle\overrightarrow{p}\rangle}{dt} = -\left\langle\overrightarrow{\nabla}V(\overrightarrow{r})\right\rangle \tag{2}$$

Les équations (1) et (2) sont similaires aux équations de Hamilton de la Mécanique Classique :

$$\frac{d\overrightarrow{r}}{dt} = \frac{\overrightarrow{p}}{m} \tag{3}$$

$$\frac{d\overrightarrow{p}}{dt} = -\overrightarrow{\nabla}V(\overrightarrow{r}) \tag{4}$$

Les valeurs moyennes (les "centres" physiques des fonctions d'ondes) n'évoluent donc pas - en toute rigueur - comme en Mécanique Classique. Cela n'est vrai qu'en moyenne !
Plus précisément, c'est vrai lorsque :

$$\left\langle\overrightarrow{\nabla}V(\overrightarrow{r})\right\rangle = \left(\overrightarrow{\nabla}V\right)_{\langle\overrightarrow{r}\rangle}$$

i.e. pour des potentiels V particuliers (cf question I.7) ou lorsque la fonction d'ondes concernée est suffisamment "piquée" autour de $\langle\overrightarrow{r}\rangle$:

$$\begin{aligned}\left\langle\overrightarrow{\nabla}V(\overrightarrow{r})\right\rangle &= \int d\overrightarrow{r}\ \psi^*(\overrightarrow{r})\ \overrightarrow{\nabla}V(\overrightarrow{r})\ \psi(\overrightarrow{r})\\ &= \int d\overrightarrow{r}\ |\psi(\overrightarrow{r})|^2\ \overrightarrow{\nabla}V(\overrightarrow{r})\end{aligned}$$

avec $|\psi(\overrightarrow{r})|^2 \simeq \delta(\overrightarrow{r}-\langle\overrightarrow{r}\rangle)$ (limite classique).

I.5 - Pour un oscillateur harmonique unidimensionnel, l'Hamiltonien s'écrit $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega^2x^2$. Donner $\frac{d\langle\widehat{x}\rangle}{dt}$ et $\frac{d\langle\widehat{p}\rangle}{dt}$. Conclusion.

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = m\omega^2x$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -m\omega^2\langle x\rangle$$

Cas particulier où Mécanique Quantique = Mécanique Classique, au sens où les prévisions de ces 2 mécaniques (en ce qui concerne l'évolution) sont semblables.

I.6 - Résoudre les deux équations précédentes pour $\langle \widehat{x} \rangle (t)$ et $\langle \widehat{p} \rangle (t)$ en fonction de $\langle \widehat{x} \rangle (t_0) = x_0$ et $\langle \widehat{p} \rangle (t_0) = p_0$.

$$\frac{d^2 \langle x \rangle}{dt2} = -m\omega^2 \langle x \rangle$$

D'où :

$$\langle x \rangle (t) = Me^{i\omega t} + Ne^{-i\omega t}$$

avec M et N à déterminer en fonction de x_0 et p_0. Finalement :

$$\langle x \rangle (t) = x_0 \cos (\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin (\omega t)$$

$$\langle p \rangle (t) = p_0 \cos (\omega t) - m\omega x_0 \sin (\omega t)$$

I.7 - Quelle est la forme de H la plus générale qui permet de retrouver les équations de la mécanique classique ? Interprétez les différents termes de cet Hamiltonien.
On cherche $V(x)$ tel que :

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_{\langle x \rangle}$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = x \quad \text{ou} \quad \text{cte :} \qquad \text{OK}$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = x^2 \quad \Longrightarrow \quad \text{non car :} \quad \langle x^2 \rangle \neq \langle x \rangle^2$$

$$\text{Idem pour } x^{n>2}$$

On a donc :

$$V(x) = ax^2 + bx + cte$$

Interprétation des termes de V :
Dernier : pas de signification physique, on peut l'éliminer.
2nd : force de pesanteur, accélération
1er : potentiel harmonique (piège, cuvette de potentiel...), accélération non-uniforme...

Plus généralement, à 3D :

$$V(\overrightarrow{r}) = \overrightarrow{r} A \overrightarrow{r} + \overrightarrow{b} \overrightarrow{r} + \overrightarrow{p} C \overrightarrow{p} + \overrightarrow{d} \overrightarrow{p} + \overrightarrow{r} E \overrightarrow{p}$$

où le dernier terme rend compte d'une rotation, le 4ème terme l'effet d'un champ électrique par exemple, et le 3ème terme de l'effet d'une onde gravitationnelle par ex (en jauge d'Einstein !)...

II - Constantes du mouvement en Mécanique Quantique

En Mécanique Classique, une grandeur A_{class} est dite "conservée" (et appelée "constante du mouvement" ou "intégrale première") lorsque sa dérivée (totale) est nulle : $\frac{dA_{class}}{dt} = 0$. Comme la valeur moyenne $\langle A \rangle$ d'un opérateur A (en Mécanique Quantique) évolue très souvent comme la grandeur classique associée (cf la partie I), on peut donner une première définition d'une grandeur conservée en Mécanique Quantique : A sera un opérateur "conservé" (appelé aussi un "opérateur intégrale première") lorsqu'on aura $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = 0$ pour toute fonction d'onde intervenant dans la valeur moyenne $\langle A \rangle$.

II.1 - Donnez l'équation que vérifie A dans ce cas ?
De la question I.3. on déduit :

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] = 0$$

II.2 - Plus précisément, soit A une observable de valeurs propres (discrètes) a_n associées aux vecteurs propres $|\varphi_n\rangle$. Si à t_0 on mesure A et que l'on trouve la valeur propre a_i, alors, juste après t_0, le système est dans l'état $|\varphi_i\rangle$:

$$A\,|\varphi_i\rangle = a_i\,|\varphi_i\rangle$$

et à $t > t_0$, le système est décrit par l'état $|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|\varphi_j\rangle$ où $|c_j(t)|^2$ donne la probabilité d'obtenir a_j dans une seconde mesure de A. En général, on n'est donc pas sûr de retrouver ultérieurement le même a_i dans une mesure de A.
Pour que A soit un "opérateur intégrale première", on exige donc que l'état $|\psi(t)\rangle$, évolué de $|\varphi_i\rangle$ dans le temps, reste vecteur propre de A pour la même valeur propre a_i.
Donnez les deux équations que doit satisfaire $|\psi(t)\rangle$ et retrouvez l'équation que vérifie A obtenue en $II.1$.

$|\psi\rangle$ vérifie les 2 équations :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi\rangle &= H\,|\psi\rangle \\ A\,|\psi\rangle &= a_i\,|\psi\rangle \end{aligned}$$

avec a_i constante.
Par conséquent : :

$$\begin{aligned} A\,(H\,|\psi\rangle) &= A\left(i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi\rangle\right) \\ &= i\hbar\left(\frac{\partial\,(A\,|\psi\rangle)}{\partial t} - \frac{\partial A}{\partial t}\,|\psi\rangle\right) \\ &= a_i\left(i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi\rangle\right) - i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}\,|\psi\rangle \\ &= a_i\,(H\,|\psi\rangle) - i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}\,|\psi\rangle \\ &= H\,(a_i\,|\psi\rangle) - i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}\,|\psi\rangle \\ &= HA\,|\psi\rangle - i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}\,|\psi\rangle \end{aligned}$$

d'où :

$$i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] = 0$$

comme en II.1.

II.3 - Dans quels cas H est-il opérateur intégrale première ?
Lorsque :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0$$

i.e. lorsque H est indépendant du temps, ou encore, lorsque H est "invariant sous translation temporelle". Ainsi, si on a préparé le système dans un état propre de l'opérateur H, i.e. avec une énergie E particulière, alors le système garde cette énergie au cours de son évolution : l'"énergie" est donc constante.

III - Symétries et constantes du mouvement

En mécanique quantique - comme en mécanique classique - toute "symétrie" continue d'un système dynamique entraîne l'existence d'une intégrale première associée (opérateur A).

III.1 - Dans le cas d'une particule libre ($H = \frac{\overrightarrow{p}^2}{2m}$) est-ce que $\widehat{\overrightarrow{p}}$, $\widehat{\overrightarrow{r}}$ et $\widehat{\overrightarrow{r}} - \frac{\widehat{\overrightarrow{p}}}{m}t$ sont opérateurs intégrales premières ? Quelles sont les symétries associées ?

$$\left[\widehat{\overrightarrow{p}}, H\right] = \overrightarrow{0} \quad \text{et} \quad \frac{\partial\widehat{\overrightarrow{p}}}{\partial t} = 0$$

$\widehat{\overrightarrow{p}}$ est opérateur intégrale première car H ne dépend pas de $\widehat{\overrightarrow{r}}$, i.e. que, lorsque H est "invariant par translation spatiale", l'impulsion est constante.

$$\left[\widehat{\overrightarrow{r}}, H\right] = \frac{i\hbar}{m}\overrightarrow{p} \neq \overrightarrow{0} \quad \text{et} \quad \frac{\partial\widehat{\overrightarrow{r}}}{\partial t} = 0$$

$\widehat{\overrightarrow{r}}$ n'est donc pas opérateur intégrale première. Normal, car Ehrenfest (cf partie I) :

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\overrightarrow{p}\rangle}{dt} &= \overrightarrow{0} \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\overrightarrow{p}\rangle = \overrightarrow{p}_0 = cte \\
\frac{d\langle\overrightarrow{r}\rangle}{dt} &= \frac{\langle\overrightarrow{p}\rangle}{m} = \frac{\overrightarrow{p}_0}{m} \\
\langle\overrightarrow{r}\rangle(t) &= \frac{\overrightarrow{p}_0}{m}t + \langle\overrightarrow{r}\rangle_0
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\overrightarrow{r} - \frac{\overrightarrow{p}}{m}t, H\right] = \frac{\overrightarrow{p}}{m} \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial\left(\overrightarrow{r} - \frac{\overrightarrow{p}}{m}t\right)}{\partial t} = -\frac{\overrightarrow{p}}{m}$$

$\widehat{\overrightarrow{r}} - \frac{\widehat{\overrightarrow{p}}}{m}t$ est donc opérateur intégrale première. Normal, car Ehrenfest comme ci-dessus :

$$\langle\overrightarrow{r}\rangle - \frac{\langle\overrightarrow{p}\rangle}{m}t = \langle\overrightarrow{r}\rangle_0 = cte$$

III.2 - On suppose $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$. Que peut-on dire des états propres de A et H ?

Dans ce cas :

$$A \text{ op. int. 1ère} \qquad \Longleftrightarrow \qquad [A, H] = 0$$

i.e. qu'il existe une base commune de vecteurs propres à A et H.

Si l'équation $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$ est plus simple à résoudre que celle sur H ($H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$), on commencera donc par la résoudre, puis on reportera la solution dans l'équation sur H.

III.3 - Pour une particule à 3 dimensions, de combien de variables dépend la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger ?

Pourquoi dit-on alors que le cas le plus favorable (pour une particule à 3D) est celui où on a : "Un ECOC de 3 opérateurs, intégrales premières, de complexité croissante, permettant la séparation des variables" ?

$$\begin{aligned}
&\psi(\overrightarrow{r}, t) \\
t &= \text{paramètre} \\
\overrightarrow{r} = (x, y, z) = (r, \theta, \varphi) &= 3 \text{ variables : } \quad (q_1, q_2, q_3)
\end{aligned}$$

On a donc besoin d'un ECOC de 3 opérateurs intégrale première pour préparer/mesurer complètement l'état du système.
Soient A, B, C ces 3 opérateurs :

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \tag{5}$$
$$B|\psi\rangle = b|\psi\rangle \tag{6}$$
$$C|\psi\rangle = c|\psi\rangle \tag{7}$$

S'ils sont de complexité croissante et permettent la séparation des variables, i.e. par ex :

$$\begin{aligned}
&A\left(q_1, \frac{\partial}{\partial q_1}\right) \\
&B\left(q_1, \frac{\partial}{\partial q_1}; q_2, \frac{\partial}{\partial q_2}\right) \\
&C\left(q_1, \frac{\partial}{\partial q_1}; q_2, \frac{\partial}{\partial q_2}; q_3, \frac{\partial}{\partial q_3}\right)
\end{aligned}$$

(5) détermine alors la dépendance de $\psi(\overrightarrow{r}, t)$ en la variable q_1 :

$$\psi(\overrightarrow{r}, t) = \varphi_1(q_1)\,\phi_1(q_1, q_2, t)$$

(6) détermine ensuite la dépendance de $\psi(\overrightarrow{r},t)$ en la variable q_2 :

$$\psi(\overrightarrow{r},t) = \varphi_1(q_1)\,\varphi_2(q_2)\,\phi_2(q_3,t)$$

et enfin (7) détermine la dépendance de $\psi(\overrightarrow{r},t)$ en la variable q_3.
L'avantage est que l'on passe d'une équation aux dérivées partielles à 3 équations différentielles ordinaires, plus faciles à résoudre.
La solution $|\psi\rangle$ se trouve ainsi indicée à l'aide de valeurs propres d'opérateurs intégrale première :

$$\psi_{abc}(q_1,q_2,q_3,t)$$

et cette indexation reste inchangée au cours du temps, car $|\psi\rangle$ reste vecteur propre de A, B, C avec pour valeurs propres les mêmes a,b,c. Pour cette raison, les valeurs propres d'opérateurs intégrale première sont parfois appelés "bons nombres quantiques".
Lorsque $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, H peut être pris comme l'un de ces 3 opérateurs :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

IV - Potentiel central

Pour un potentiel central $V(\overrightarrow{r}) = V(r)$ (c'est-à-dire à symétrie sphérique), on montre que $[L_i, V(r)] = 0$ (pour $i = x,y,z$) et on note $\left[\overrightarrow{L}, V(r)\right] = \overrightarrow{0}$. L'opérateur $\overrightarrow{L}$ est l'opérateur moment cinétique, défini par $\overrightarrow{L} = \overrightarrow{r} \wedge \overrightarrow{p}$ (on écrit aussi $L_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk}\; x_j\; p_k$ où ϵ_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique de Levi-Civita).

IV.1 - Que valent les commutateurs $\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right]$ et $\left[\overrightarrow{L}, H\right]$?

$$\begin{aligned}
\left[L_z, \overrightarrow{p}^2\right] &= \left[L_z, p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right] \\
\left[L_z, p_x^2\right] &= p_x\left[L_z, p_x\right] + \left[L_z, p_x\right]p_x \\
\left[L_z, p_x\right] &= \left[xp_y - yp_x, p_x\right] = i\hbar p_y \\
\left[L_z, p_x^2\right] &= 2i\hbar p_y p_x \\
\left[L_z, p_y^2\right] &= -2i\hbar p_y p_x \\
\left[L_z, p_z^2\right] &= 0 \\
\left[L_z, \overrightarrow{p}^2\right] &= 0 \\
\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right] &= \overrightarrow{0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\overrightarrow{L}, H\right] &= \left[\overrightarrow{L}, \frac{\overrightarrow{p}^2}{2m} + V(r)\right] \\
&= \frac{1}{2m}\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right] + \left[\overrightarrow{L}, V(r)\right] = \overrightarrow{0}
\end{aligned}$$

IV.2 - Que vaut $\left[\overrightarrow{L}^2, H\right]$?

$$\begin{aligned}
\left[\overrightarrow{L}^2, H\right] &= \left[L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, H\right] \\
&= \left[L_x^2, H\right] + \left[L_y^2, H\right] + \left[L_z^2, H\right] \\
\left[L_x^2, H\right] &= L_x\left[L_x, H\right] + \left[L_x, H\right]L_x = 0 = \left[L_y^2, H\right] = \left[L_z^2, H\right] \\
\left[\overrightarrow{L}^2, H\right] &= 0
\end{aligned}$$

IV.3 - Sachant que $[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk}\, L_k$ (i.e. que $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$ et $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$), montrer que $\left[\overrightarrow{L}^2, \overrightarrow{L}\right] = \overrightarrow{0}$ et donner un ECOC de 3 opérateurs intégrales premières.

$$\begin{aligned}\left[\overrightarrow{L}^2, L_x\right] &= \left[L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x\right] \\ &= L_y\left[L_y, L_x\right] + \left[L_y, L_x\right] L_y + L_z\left[L_z, L_x\right] + \left[L_z, L_x\right] L_z \\ &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z \\ &= 0\end{aligned}$$

$$ECOC: \quad \left(L_z, \overrightarrow{L}^2, H\right)$$

IV.4 - En coordonnées sphériques $\overrightarrow{r} = (r, \theta, \varphi)$ on a :

$$\begin{aligned}L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \overrightarrow{L}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \\ H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + V(r) + \frac{\overrightarrow{L}^2}{2mr^2}\end{aligned}$$

Avec $\left\{L_z, \overrightarrow{L}^2, H\right\}$, est-on dans un exemple de "cas le plus favorable" décrit dans la question $III.3$? Oui !

Justifiez alors que l'on cherche des solutions générales à l'équation de Schrödinger en posant : immédiat !

$$\begin{aligned}\psi(\overrightarrow{r}, t) &= \Phi(\overrightarrow{r})\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \\ \Phi(\overrightarrow{r}) &= R(r)\, S(\theta)\, T(\varphi)\end{aligned}$$

où E est solution de $H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$.
Les fonctions $Y(\theta, \varphi) = S(\theta)\, T(\varphi)$ sont appelées "harmoniques sphériques".