M2/CFP/Parcours de Physique Théorique
Invariances en physique et théorie des groupes

Symétrie dynamique de l'atome d'hydrogène

L'objet de ce problème est d'élucider la dégénérescence des niveaux de l'atome d'hydrogène en mécanique quantique non relativiste, dont l'énergie ne dépend pas du nombre quantique ℓ.

Traitement classique du problème de Kepler

Considérons le problème classique de Kepler, pour lequel, en coordonnées relatives, l'hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{k}{r} \tag{1}$$

où μ est la masse de la particule réduite. k est une quantité positive ($k = Z\,e^2$ pour l'atome d'hydrogène)
Rappel: Pour une ellipse, en notant M l'un des deux foyers, P le périhélie (point de la trajectoire le plus proche de M) et A l'aphélie (point de la trajectoire le plus éloigné de M), le demi-grand axe $a = PA/2$ et le demi-petit axe b sont reliés à l'excentricité par $e = (a^2 - b^2)^{1/2}/a$, et la distance focale du centre géométrique O de l'ellipse au foyer M vérifie $f = ae$.

1) Montrer que le vecteur de Runge-Lenz $\vec{M} = \vec{v} \times \vec{L} - k\frac{\vec{r}}{r}$ est une constante du mouvement.

2) En déduire, par intégration des équations du mouvement, que l'état lié est une ellipse. On pourra partir de l'expression de $\vec{M}.\vec{r}$.

3) Montrer que $\vec{L}^2 = \mu k a(1 - e^2)$ et que $\vec{M}$ est dirigé suivant le demi-grand axe, pointant de M vers P, de norme ke.

4) Montrer que $E = -\frac{k}{2a}$. Montrer que $\vec{L} \cdot \vec{M} = 0$ et que $\vec{M}^2 = 2E\frac{\vec{L}^2}{\mu} + k^2$.

5) Etablir les relations suivantes:

$$\begin{aligned}
&\{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk}\, L_k \\
&\{L_i, M_j\} = \epsilon_{ijk}\, M_k \\
&\{M_i, M_j\} = -\tfrac{2H}{\mu}\epsilon_{ijk}\, L_k \\
&\{H, L_i\} = \{H, M_i\} = 0\,.
\end{aligned}$$

6) Comment se transforme le vecteur de Runge-Lenz sous l'action du groupe des rotations?

7) On suppose l'énergie E fixée. Dans les deux cas $E > 0$ et $E < 0$, identifier les algèbres de Lie réelles engendrées par l'espace vectoriel de base $\vec{L}$ et $\vec{M}$ muni du crochet de Poisson. Il sera commode d'introduire $\vec{M}' = \sqrt{\frac{\pm\mu}{2E}}\,\vec{M}$.

Cas quantique

Dans le cas quantique, l'opérateur associé au vecteur de Runge-Lenz n'est pas hermitien. On redéfinit donc l'opérateur $\vec{M}$ par

$$\vec{M} = \frac{1}{2\mu}(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}) - k\frac{\vec{r}}{r}\,. \tag{2}$$

8) Montrer que $[\vec{M}, H] = 0\,.$

9) Vérifier que $\vec{L}.\vec{M} = \vec{M}.\vec{L} = 0$.
Etablir que $\vec{M}^2 = \frac{2H}{\mu}(\vec{L}^2 + \hbar^2) + k^2$. On comparera ce résultat au cas classique.

10) Reprendre la question 5) dans le cas quantique.

11) Les résultats des questions 6) et 7) sont-ils modifiés dans le cas quantique?

12) Dans le cas $E < 0$, montrer que l'algèbre de Lie engendrée par les opérateurs $\vec{L}$ et $\vec{M}'$ est identique à l'algèbre de Lie du groupe $SU(2) \times SU(2)$. Caractériser les représentations irréductibles de ce groupe.

13) Montrer que l'ensemble des valeurs propres du Casimir $C = \frac{1}{2}(\vec{L}^2 + \vec{M}'^2)$ de $SU(2) \times SU(2)$ ne sont pas atteintes. On pourra utiliser la question 9).

14) En déduire que le spectre de H est de la forme

$$E = -\frac{k^2\mu}{2(2j+1)^2} \tag{3}$$

où j est un nombre entier ou demi-entier. Préciser la dégénerescence de chacun des niveaux.

15) En utilisant les régles d'addition du moment cinétique, préciser les valeurs de ℓ pour un niveau j fixé. Retrouver la dégénérescence de chacun des niveaux obtenue à la question précédente.

16) Les niveaux d'énergie ainsi obtenus ont-ils une parité bien définie?