TD 4 : Particule dans un potentiel central

Conventions. Unités gaussiennes ; en unités SI, remplacer partout e^2 par $e^2/4\pi\varepsilon_0$.

Exercice 7 : Atome d'hydrogène

Soit un atome d'hydrogène, constitué d'un proton (supposé infiniment lourd) et d'un électron. La position du proton définit l'origine des coordonnées et l'on étudie le mouvement de l'électron, de masse m_e, dans le potentiel central du proton

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}\,.$$

Partie I — Du problème 3D à l'équation radiale

1. Exprimer le moment cinétique orbital $\mathbf{L}$ en fonction des opérateurs position $\mathbf{X}$ et impulsion $\mathbf{P}$. Écrire ses composantes L_i en notation indicielle.

2. Montrer que
$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{X}^2\mathbf{P}^2 - (\mathbf{X}\cdot\mathbf{P})^2 + \mathrm{i}\hbar\,\mathbf{X}\cdot\mathbf{P}.$$
On fera usage des commutateurs $[X_i, P_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$, $[X_i, X_j] = 0$ et $[P_i, P_j] = 0$. On donne $(\mathbf{A}\wedge\mathbf{B})_i = \epsilon_{ijk}A_jB_k$ et $\sum_i \epsilon_{ijk}\epsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$, avec ϵ le symbole de Lévi-Civita et δ celui de Kronecker.
Indications : partir de $\mathbf{L}^2 = \sum_i L_iL_i$ et faire apparaître les deux termes $X_jP_kX_jP_k$ et $X_jP_kX_kP_j$; dans chacun, ramener tous les X à gauche de tous les P.

3. En déduire l'expression du hamiltonien H du système faisant apparaître l'opérateur $\mathbf{L}^2$.
Indication : en représentation position et en coordonnées sphériques, $\mathbf{X}\cdot\mathbf{P} = -\mathrm{i}\hbar\, r\,\dfrac{\partial}{\partial r}$. En déduire $(\mathbf{X}\cdot\mathbf{P})^2 - \mathrm{i}\hbar\,\mathbf{X}\cdot\mathbf{P}$, puis $\mathbf{P}^2$ à partir de la question 2.

4. Les trois observables H, $\mathbf{L}^2$, L_z commutent. On cherche les solutions de $H\Psi = E\Psi$ sous la forme $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi)$. En s'appuyant sur le fait que les $Y(\theta,\phi)$ sont fonctions propres de $\mathbf{L}^2$ et L_z, établir l'équation radiale satisfaite par $u(r) = rR(r)$ sous la forme d'une équation de Schrödinger à une dimension dans un potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$ que l'on définira. Quelle condition u doit-elle vérifier en $r = 0$, et quelle est la condition de normalisation sur u ?

Partie A — Résolution de l'équation radiale : résultats admis

Les résultats de cette partie sont **admis en séance** ; l'exercice 7 bis, à traiter en travail personnel propose de calculer certaines étapes qui n'ont pas été complètement développées en cours.

On s'intéresse aux états liés, tels que $E < 0$. On introduit les variables adimensionnées

$$\rho = \frac{\sqrt{2m_e|E|}}{\hbar}\,r = \kappa r, \qquad \rho_0 = \frac{e^2\kappa}{|E|} = \frac{2m_ee^2}{\hbar^2\kappa}\,,$$

pour lesquelles l'équation radiale devient

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right) u(\rho) = 0. \tag{1}$$

Le comportement asymptotique des solutions, $u(\rho) \simeq A\,\mathrm{e}^{-\rho}$ pour $\rho \gg \max\left(\sqrt{l(l+1)}, \rho_0\right)$ et $u(\rho) \simeq B\rho^{l+1}$ pour $\rho \to 0$, amène à poser $u(\rho) = \mathrm{e}^{-\rho}\rho^{l+1}v(\rho)$.

La fonction $v(\rho)$ satisfait

$$\left(\rho_0 - 2(l+1) + 2(l+1-\rho)\frac{\partial}{\partial\rho} + \rho\,\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\right) v(\rho) = 0. \tag{2}$$

En cherchant v sous la forme d'une série entière $v(\rho) = \sum_{s=0}^{\infty} c_s \rho^s$ et en identifiant les termes de même puissance de ρ, les coefficients obéissent à la relation de récurrence

$$c_{s+1} = \frac{2(s+l+1) - \rho_0}{(s+1)(s+2l+2)}\, c_s. \tag{3}$$

Partie II — Quantification et fonctions d'onde

5. La série (3) doit comporter un nombre fini de termes, c'est-à-dire qu'il existe un entier $s_{\max} \geq 0$ tel que $c_{s_{\max}+1} = 0$. En déduire la valeur quantifiée de ρ_0, puis les énergies autorisées sous la forme de la formule de Bohr, en fonction d'un nombre quantique que l'on notera n. Quelles sont les valeurs possibles de n, et quelle contrainte relie n et l ?

6. Discuter le fait que la fonction radiale est caractérisée par les *deux* indices n et l. Montrer que $\kappa = 1/(na_0)$ et exprimer la fonction radiale sous la forme

$$R_{nl}(r) = r^{\,l} \left(\frac{1}{a_0 n}\right)^{l+1} \mathrm{e}^{-r/a_0 n}\, v_{nl}(\rho),$$

où l'on nommera et définira le paramètre a_0. On précisera pourquoi v porte, lui aussi, les indices n et l.

7. Donner la forme des fonctions $R_{nl}(r)$ pour les niveaux $n = 1$ et $n = 2$. On ne demande pas de normaliser les fonctions.

8. Soit $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ les fonctions propres de l'atome d'hydrogène. Donner les valeurs des nombres quantiques n, l et m pour les états $1s$, $2s$ et $2p$. Quelle est la dégénérescence du niveau n (spin non compris) ?

Exercice 7 bis (travail personnel)

a) A partir de l'équation radiale satisfaite par $u(r)$ établie à la question 4, retrouver l'équation radiale (1) pour les variables adimensionnées.

b) En injectant $u(\rho) = \mathrm{e}^{-\rho}\rho^{l+1}v(\rho)$ dans l'équation radiale (1), démontrer l'équation (2).
Indication : calculer successivement u' et u'', puis mettre $\mathrm{e}^{-\rho}\rho^{l}$ en facteur.