Problème de Mécanique Quantique

Atome d'Hydrogène simplifié

Il est possible d'obtenir les niveaux d'énergie des états à symétrie sphérique de l'atome d'Hydrogène par une schématisation uni-dimensionnelle. L'approche du calcul à une dimension est la suivante. Considérons un électron de masse m dans un potentiel $V(x)$ tel que,

$$V(x) = \infty \quad \text{pour} \quad x \leqslant 0\ ; \quad V(x) = -\frac{A}{x} \quad \text{pour} \quad x > 0$$

où $A = q^2/4\pi\epsilon_0$, q étant la charge élémentaire. On pose $\alpha = q^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c) \simeq 1/137$ (constante sans dimension) où c est la vitesse de la lumière.

1. Donner l'expression classique de la force engendrée par le potentiel $V(x)$ dans la région $x > 0$. Le potentiel est-il attractif ou répulsif ?

2. Soit $\psi(x,t)$ la fonction d'onde représentant l'état quantique de l'électron. Rappeler l'équation de Schrödinger pour cet électron dans un potentiel $V(x)$. Ecrire également l'équation que vérifie la fonction d'onde décrivant un état stationnaire d'énergie E. Quelle est à priori la dimension de l'espace vectoriel des solutions (pour cette dernière équation) ?

3. Montrer que la fonction d'onde:

$$\psi_0(x) = 0 \quad \text{pour} \quad x < 0\ ; \quad \psi_0(x) = \ B\, x\, e^{-\frac{x}{a}} \quad \text{pour} \quad x \geqslant 0$$

est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour une valeur de la constante a et de l'énergie propre E_0 que l'on déterminera (en fonction de $\hbar, m, c$ et α pour a, et, de m, c et α pour E_0).

4. $\psi_0(x)$ est la fonction d'onde associée à l'état fondamental. Qu'est-ce que l'état fondamental ? Discuter les continuités en $x = 0$.

5. Calculer numériquement E_0 (en eV) et a (en nm). On donne $mc^2 = 5,11\ 10^5$ eV et $\hbar c =$ 197 eV nm. Commenter les résultats obtenus.

6. Que représente $|\psi_0(x)|^2$? Pourquoi $\psi_0(x)$ doit-elle être normalisée ? Ecrire cette condition et en déduire [1] la valeur de la constante B [prise réelle] en fonction de a. Pourquoi peut-on prendre

[1] Penser, par exemple, à intégrer par parties.

B réelle ? Cette constante pourrait-elle être nulle ?

7. Calculer la valeur moyenne de l'énergie potentielle dans l'état fondamental:

$$\langle\, V(\hat{x})\, \rangle_0 = \int_0^{+\infty} dx\, V(x)\, |\psi_0(x)|^2.$$

On donnera le résultat en fonction de m, c et α puis en fonction de E_0 uniquement.

8. Pourquoi la valeur moyenne de l'hamiltonien $\left(\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})\right)$ dans l'état fondamental est-elle $\langle\, \hat{H}\, \rangle_0 = E_0$?

9. Déduire des deux questions précédentes la valeur moyenne de l'observable associée à l'énergie cinétique dans l'état fondamental: $\langle\, \hat{p}^2/2m\, \rangle_0$. Donner le résultat en fonction de m, c et α puis en terme de E_0.

10. Quelle relation (valable aussi en mécanique classique) y a-t-il entre $\langle\, V(\hat{x})\, \rangle_0$ et $\langle\, \hat{p}^2/2m\, \rangle_0$? Est-ce normal d'obtenir cette relation classique dans ce contexte quantique ?

11. Calculer la fonction d'onde $\tilde{\psi}_0(p)$ dans l'espace des impulsions. Donner le résultat sous la forme

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{B}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{[f(p, a, \hbar)]^2}$$

où l'on précisera la fonction $f(p, a, \hbar)$. Si B est pris à sa valeur obtenue à la question n'6, alors $\tilde{\psi}_0(p)$ est-elle normalisée ? *[justifier la réponse sans faire le calcul]*

12. Que vaut la valeur moyenne de l'impulsion $\langle\, \hat{p}\, \rangle_0$ dans l'état fondamental ? Utiliser des arguments de symétrie.

13. Calculer la valeur moyenne de position $\langle\, \hat{x}\, \rangle_0$ dans l'état fondamental [2]. Puis, calculer $\langle\, \hat{x}^2\, \rangle_0$. En déduire l'écart type Δx_0 sur la mesure de la position dans l'état fondamental. Donner les trois résultats en fonction de a.

14. Déduire de la valeur de Δx_0 obtenue une borne sur l'écart type Δp_0 associé à la mesure de l'impulsion dans l'état fondamental.

[2] Dans cette question n'13 on utilisera l'intégrale: $\int_0^{\infty} du\, e^{-u}\, u^n \;=\; n!$.