Examen Mars 2014
filière Master

Méthode variationnelle

1. on peut écrire $|\psi_\beta\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ avec les c_n des coefficients complexes. Comme $|\psi_\beta\rangle$ est normalisé, on a

$$\langle\psi_\beta|\psi_\beta\rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

On a $E(\beta) = \langle\psi_\beta|\hat{H}|\psi_\beta\rangle = \sum_{n,n'} c_n^* \langle n|\hat{H}|n'\rangle c_{n'}$

or $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ et $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$ pour les états propres

d'où $E(\beta) = \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \delta_{nn'} E_{n'} = \sum_n |c_n|^2 E_n$

or $\forall n,\ E_n \geq E_0$ puisque E_0 est le fondamental.

Ainsi $E(\beta) \geq \sum_n |c_n|^2 E_0 = E_0 \underbrace{\sum_n |c_n|^2}_{=1} = E_0$

d'où le résultat $\boxed{E(\beta) \geq E_0}$

2. On veut que $E(\beta)$ soit <u>minimale</u> pour approcher le plus possible E_0, d'où la condition $\boxed{\dfrac{dE}{d\beta} = 0}$ <u>qui détermine</u> β. Il faut ensuite vérifier que $\boxed{\left.\dfrac{d^2E}{d\beta^2}\right|_{\beta_{min}} \geq 0}$ pour un minimum

3. $\boxed{\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} - \dfrac{e^2}{\hat{r}}}$

4. dimensionnellement, $[\hbar] = J\,s = kg(m\,s^{-1})^2 s = kg\,m^2 s^{-1}$
$[m] = kg$ et $[e^2] = J\,m = kg\,m^3 s^{-2}$

on voit donc que $\left[\frac{\hbar^2}{me^2}\right] = \frac{kg^2 m^4 s^{-2}}{kg \cdot kg m^3 s^{-2}} = m$ (longueur)

ainsi $\boxed{a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}}$ est une longueur. On reconnaît le rayon de Bohr.

ordre de grandeur: $a_B \simeq \frac{10^{-68}}{10^{-30}\, 2.10^{-28}} = 0{,}5\, 10^{-10}\, m = \underline{0{,}5\, Å}$

5. $[R] = \frac{kg^2 m^4 s^{-2}}{kg\; m^2} = kg\, m^2 s^{-2} = J$ est une énergie

ordre de grandeur: $R \simeq \frac{10^{-68}}{2\,10^{-30} \left(\frac{1}{2}\right)^2 10^{-20}} \simeq \underline{2.10^{-18}\, J}$

valeur plus connue: $\underline{R = 13{,}6\, eV}$

6. condition de normalisation à 3D:

$$\int d^3\vec{r}\, |\Psi_\beta(\vec{r})|^2 = 1 \iff 1 = \int_0^{+\infty} C^2 e^{-2\beta r}\, 4\pi r^2 dr \underset{x = 2\beta r}{=} C^2 4\pi \frac{1}{(2\beta)^3} \underbrace{\int_0^{+\infty} x^2 e^{-x} dx}_{=2}$$

d'où $\boxed{C = \left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2}}$

7. $\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta} - \frac{e^2}{r}}$

8. énergie moyenne: $\langle \Psi_\beta | \hat{H} | \Psi_\beta \rangle = \int d^3\vec{r}\, \Psi^*_\beta(\vec{r})\, \hat{H}\, \Psi_\beta(\vec{r})$

$$= C^2 \int_0^\infty 4\pi r^2 dr\, e^{-\beta r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta} - \frac{e^2}{r}\right) e^{-\beta r}$$

soit $$E(\beta) = \frac{\beta^3}{\pi} 4\pi \left\{ \int_0^\infty dr\, r^2 e^{-\beta r}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) e^{-\beta r} - e^2 \int_0^\infty dr\, r\, e^{-2\beta r} \right\}$$

$$= 4\beta^3 \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty r^2 \left[(-\beta)^2 e^{-2\beta r} - \frac{2}{r}\beta e^{-2\beta r}\right] - e^2 \frac{1}{(2\beta)^2} \underbrace{\int_0^\infty dx\, x\, e^{-x}}_{=1} \right\}$$

$$E(\beta) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{4\beta^5 \underbrace{\int_0^\infty r^2 e^{-2\beta r} dr}_{2/(2\beta)^3} - 8\beta^4 \underbrace{\int_0^\infty r e^{-2\beta r}}_{1/(2\beta)^2}\right\} - e^2\beta$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(-\beta^2 + 2\beta^2\right) - e^2\beta \Rightarrow \boxed{E(\beta) = \frac{\hbar^2\beta^2}{2m} - e^2\beta}$$

9. valeur optimale de β :

$$\frac{dE}{d\beta} = 0 = \frac{\hbar^2}{m}\beta - e^2 \Rightarrow \boxed{\beta = \frac{me^2}{\hbar^2} = \frac{1}{a_B}}$$

on trouve 1/le rayon de Bohr comme pour le fondamental exact.

10. Energie optimale : $E = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} - e^2 a_B^{-1}$

$$= \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} - \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = \boxed{-R}$$

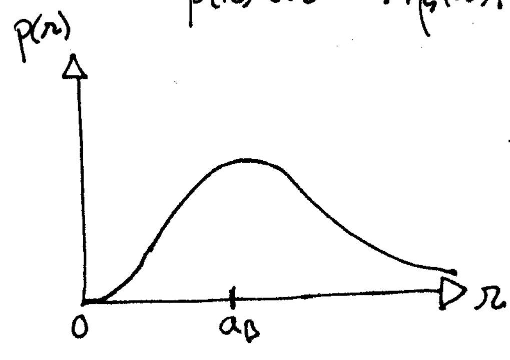
or le spectre de l'atome d'hydrogène est donné par

$$\boxed{E_n = -\frac{R}{n^2}} \quad \text{pour } n = 1, 2, 3, \ldots$$

On a donc bien exactement l'énergie du fondamental pour $n = 1$, $E = -R$ et il appartient bien au spectre

11. densité de probabilité de trouver l'électron entre r et $r+dr$:

$$p(r)\,dr = |\psi_\beta(\vec{r})|^2 4\pi r^2 dr \quad \text{soit} \quad \boxed{p(r) = \frac{4r^2}{a_B^3} e^{-2r/a_B}}$$



valeur moyenne :

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty r\,p(r)\,dr = 4\int_0^\infty \left(\frac{r}{a_B}\right)^3 e^{-2r/a_B} dr \overset{x=2r/a_B}{=} \frac{4a_B}{2^4}\underbrace{\int_0^\infty x^3 e^{-x} dx}_{3!=6}$$

soit $\boxed{\langle r\rangle = \frac{3}{2}a_B}$

12. $\hat{H}' = \hat{H} + \hat{W}$ donc

$$\boxed{\hat{W} = \begin{cases} \dfrac{e^2}{2r_0}\left[\left(\dfrac{r}{r_0}\right)^2 - 3\right] + \dfrac{e^2}{r} = \dfrac{e^2}{2r_0}\left[\left(\dfrac{r}{r_0}\right)^2 + 2\dfrac{r_0}{r} - 3\right] & \text{si } r \leqslant r_0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}}$$

13. Il faut calculer $\langle \psi_\beta | \hat{W} | \psi_\beta \rangle = \dfrac{e^2 C^2}{2r_0} \displaystyle\int_0^{r_0} 4\pi r^2 dr \, e^{-2\beta r}\left(\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 + 2\frac{r_0}{r} - 3\right)$

$$= 2\pi \frac{e^2}{r_0}\frac{\beta^3}{\pi} \int_0^{r_0} dr \, \cancel{e^{-2r/a_B}} \left(\frac{r^4}{r_0^2} + 2r_0 r - 3r^2\right)$$

comme $r \leqslant r_0$ et $r_0 \ll a_B$
on prend $e^{-2r/a_B} \simeq 1$

$$= \frac{2e^2\beta^3}{r_0}\left[\frac{1}{5}\frac{r_0^5}{r_0^2} + \cancel{r_0 r_0^2} - \cancel{r_0^3}\right] = \frac{2}{5} e^2 r_0^2 \beta^3$$

soit $\boxed{E'(\beta) = E(\beta) + \frac{2}{5} e^2 r_0^2 \beta^3}$

14. faisons $\dfrac{dE'}{d\beta} = 0 = \dfrac{\hbar^2}{m}\beta - e^2 + \dfrac{6}{5} e^2 r_0^2 \beta^2 \Longleftrightarrow \dfrac{6}{5} r_0^2 \beta^2 + a_B \beta - 1 = 0$

comme $r_0 \ll a_B$, $\beta \simeq 1/a_B$ à l'ordre 0 en r_0/a_B et on peut écrire $\beta \simeq 1/a_B\left(1 - \frac{6}{5} r_0^2 \beta^2\right)$

$\beta^2 \simeq 1/a_B^2$ à l'ordre 0 ici

soit $\beta \simeq \dfrac{1}{a_B}\left(1 - \dfrac{6}{5}\left(\dfrac{r_0}{a_B}\right)^2\right)$

le nouveau rayon est donc $a_B' = \dfrac{a_B}{1 - \frac{6}{5}\left(\frac{r_0}{a_B}\right)^2} \Rightarrow \boxed{a_B' \simeq a_B\left(1 + \frac{6}{5}\left(\frac{r_0}{a_B}\right)^2\right) > a_B}$

l'électron est donc en moyenne plus loin du proton que a_B

la correction est en $\left(\dfrac{r_0}{a_B}\right)^2 \simeq \left(\dfrac{10^{-15}}{0{,}5 \cdot 10^{-10}}\right)^2 \simeq 4 \cdot 10^{-10} \ll 1 \Rightarrow$ difficile à mesurer !

Cependant, ce genre de correction est mesurée et permet d'accéder à la taille du proton.