Corrigé exercice 1 : Mécanique quantique

Valeur numérique de la constante de Planck :

$$h = 6{,}62\times10^{-34}\ \text{J.s} \quad \text{et} \quad \hbar = 1{,}05\times10^{-34}\ \text{J.s}$$

3 Atome d'hydrogène

Dans son état fondamental d'énergie E_0, l'électron (de masse m) d'un atome d'hydrogène H dont le proton est supposé fixe en O (origine des coordonnées) est décrit par une fonction d'onde à symétrie sphérique :

$$\Psi_{\text{stat}}(r,t) = A\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right)$$

où r est la distance à O, A une constante réelle positive et $a = \dfrac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{me^2}$. On donne pour $\alpha > 0$:

$$\int_0^{+\infty} x^n \exp(-\alpha x)\,\mathrm{d}x = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

Données numériques :

$e = 1{,}6.10^{-19}$ C ; $\varepsilon_0 = 8{,}85.10^{-12}$ F.m^{-1} ; $m = 9{,}1.10^{-31}$ kg

1) *Déterminer la valeur de A.*

Il faut normaliser la probabilité de présence. On intègre sur tout l'espace, en utilisant les coordonnées sphériques :

$$\iiint_{\text{Espace}} |\Psi_{\text{stat}}(r,t)|^2\, r^2\mathrm{d}r\, \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi = 1$$

L'intégration sur les angles donne 4π et, comme A est une constante positive, on obtient :

$$4\pi A^2 \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2\,\mathrm{d}r = 1$$

d'où, en utilisant le formulaire de l'énoncé :

$$4\pi A^2\,\frac{a^3\times 2!}{8} = 1$$

soit finalement :

$$\pi a^3 A^2 = 1 \quad \text{d'où} \quad \boxed{A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}}$$

2) *En utilisant le volume d'une coquille sphérique comprise entre les sphères de rayon r et $r+\mathrm{d}r$, déterminer la probabilité pour que l'électron soit situé dans cette coquille en la mettant sous la forme : $\mathrm{d}\mathscr{P} = f(r)\,\mathrm{d}r$ et en donnant l'expression de $f(r)$.*

On rappelle (valeur à connaître, cf. diffusion thermique) que le volume d'une coquille sphérique est $\mathrm{d}\tau = 4\pi r^2\,\mathrm{d}r$.

Ainsi, la probabilité de présence de l'électron dans ce volume élémentaire est :

$$\mathrm{d}\mathscr{P} = |\Psi_{\text{stat}}(r,t)|^2\,\mathrm{d}\tau = |\Psi_{\text{stat}}(r,t)|^2\, 4\pi r^2\,\mathrm{d}r$$

d'où :

$$\mathrm{d}\mathscr{P} = A^2\exp\left(-\frac{2r}{a}\right) 4\pi r^2\,\mathrm{d}r$$

et donc :

$$\boxed{f(r) = \frac{4\,r^2}{a^3}\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)}$$

3) *Pour quelle valeur r_0 de r la densité linéique de probabilité $f(r)$ est-elle maximale ? Quelle est la valeur moyenne $\langle r\rangle$? A.N. : calculer $\langle r\rangle$.*

On dérive :

$$f'(r) = \frac{4}{a^3}\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)\left(2r - \frac{2r^2}{a}\right)$$

et on résout :

$$f'(r) = 0 \iff r\left(1 - \frac{r}{a}\right) = 0$$

ce qui donne soit $r = 0$ correspondant au minimum (nul) de f, soit $r = a$ ce qui correspond à son maximum puisque $f'(r) > 0$ si $r < a$ et $f'(r) < 0$ si $r > a$.

Le maximum de f est donc obtenu pour :

$$\boxed{r_0 = a}$$

La valeur moyenne $< r >$ s'écrit :

$$< r > = \int_{\text{Espace}} r\,\mathrm{d}\mathscr{P} = \int_0^{+\infty} r\,f(r)\,\mathrm{d}r = \frac{4}{a^3}\int_0^{+\infty} r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)\,\mathrm{d}r$$

et l'utilisation du formulaire conduit à :

$$\boxed{< r > = \frac{4}{a^3}\,\frac{3!\,a^4}{16} = \frac{3a}{2}}$$

A.N. : $a = 5{,}3.10^{-11}$ m (c'est le rayon de Bohr) et donc :

$$\boxed{< r > = 7{,}9.10^{-11}\ \text{m}}$$

4) *Donner l'expression de l'énergie potentielle $V(r)$ de l'électron.*

Il s'agit de l'énergie potentielle électrique de l'électron dans le champ électrique du noyau :

$$\boxed{V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\,r}}$$

<u>Rem</u> : on prend cette énergie potentielle nulle à l'infini.

5) *En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en déduire l'expression littérale de l'énergie E_0 de cet état fondamental, en fonction de e, ε_0 et r_0. A.N. Calculer E_0 en Joules puis en eV.*

On écrit l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour la partie spatiale :

$$\varphi(r) = A\,\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

Il faut bien sûr prendre l'expression du laplacien en coordonnées sphériques :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\varphi(r) + V(r)\varphi(r) = E_0\,\varphi(r)$$

d'où :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{r^2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\,\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}r}\right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\,r}\,\varphi(r) = E_0\,\varphi(r)$$

On calcule :

$$\frac{1}{r^2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\,\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}r}\right) = A\left(-\frac{2}{ar} + \frac{1}{a^2}\right)\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

En notant ensuite que :

$$\frac{e^2}{4\pi\,\varepsilon_0} = \frac{\hbar^2}{ma}$$

on constate que les termes en 1/r se simplifient et qu'il ne reste que :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{a^2}\,A\,\exp\left(-\frac{2r}{a}\right) = E_0\,A\,\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

ce qui conduit à (avec $r_0 = a$) :

$$\boxed{E_0 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\,r_0}}$$

A.N. avec tous les chiffres significatifs de a, on obtient :

$$\boxed{E_0 = -\,2{,}19.10^{-18}\ \mathrm{J} = -\,13{,}7\ \mathrm{eV}}$$

Le léger écart avec la valeur classique $-$ 13,6 eV est dû au manque de précision des valeurs numériques de e et m.

Remarque :

On rappelle que, d'après le cours d'atomistique de MPSI, l'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène vaut, en eV :

$$\boxed{E_n = -\,\frac{13{,}6}{n^2},\ n \in \mathbb{N}^*}$$

avec 1 eV = $1{,}6.10^{-19}$ J.