MÉCANIQUE QUANTIQUE AVANCÉE
TRAVAUX DIRIGÉS No. 5

Potentiel central – partie radiale

1. **Fonctions radiales pour les états liés du système proton-électron (atome d'hydrogène)**

   On travaille ici sans la correction due à la masse finie du noyau ("nuclear recoil correction"), donc dans la limite $\lim_{m_N \to \infty} \mu = m_e$, la masse au repos (non-relativiste) de l'électron. De plus, $\rho = \frac{r}{a_0}$ et $Z = 1$. Une représentation des fonctions d'onde radiales pour le problème d'une particule dans un champ central est possible à partir des polynômes de Laguerre:

$$\Psi(\rho, \vartheta, \varphi) = a_0^{-\frac{3}{2}} \; N_{n\ell} \; F_{n\ell}\left(\frac{2\rho}{n}\right) \; Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) \tag{1}$$

$$N_{n\ell} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}} \quad \text{facteur de normalisation}$$

$$F_{n\ell}\left(\frac{2\rho}{n}\right) = \left(\frac{2\rho}{n}\right)^{\ell} e^{-\frac{\rho}{n}} \, L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right)$$

$$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right) = (-1)^{2\ell+1} \frac{d^{2\ell+1}}{d\left(\frac{2\rho}{n}\right)^{2\ell+1}} \mathcal{L}_{n+\ell}^{0}\left(\frac{2\rho}{n}\right) \quad \text{Fonctions gén. de Laguerre}$$

$$\mathcal{L}_{n+\ell}^{0}\left(\frac{2\rho}{n}\right) = e^{\frac{2\rho}{n}} \frac{d^{n+\ell}}{d\left(\frac{2\rho}{n}\right)^{n+\ell}} \left(\left(\frac{2\rho}{n}\right)^{n+\ell} e^{-\frac{2\rho}{n}}\right) \quad \text{polynômes de Laguerre}$$

   (a) Spécifier les valeurs des nombres quantiques figurantes dans l'expression $|\Psi_H\rangle = |n \, \ell \, m_\ell\rangle$ pour l'état fondamental de l'atome d'hydrogène et pour tous les états correspondants à son premier niveau excité. Donner en plus la valeur du nombre quantique radial, n_r, dans les differentes états respectives.

   (b) Déterminer explicitement la forme fonctionnelle de la partie radiale – utilisant la représentation à partir des polynômes de Laguerre – et la partie angulaire pour l'état fondamental Ψ_{1s}. Vérifier que votre fonction d'onde est normalisée à 1.

2. **Propriétés des solutions radiales et théorème général de l'incertitude**

   (a) Calculer une intégrale radiale déterminée qui est utile et essentielle:

$$I = \int_0^\infty r^n \, e^{-\alpha r} \, dr$$

   avec $\alpha \in \mathbb{R}_{>0}$ et $n \in \mathbb{N}$.

   (b) Calculer la distance moyenne de l'électron du proton (proton à l'origine) dans l'état Ψ_{1s} déterminée dans la section précédente 1b.

   (c) Calculer ainsi la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{r}^2$ (r coordonnée radiale) dans l'état Ψ_{1s}.

(d) Montrer que si l'opérateur de l'impulsion radiale est exprimée comme

$$\hat{p}_r := \frac{\hbar}{\imath}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

l'énergie cinétique radiale s'écrit comme

$$\hat{T}_r = \frac{\hat{p}_r^2}{2m}.$$

(e) Calculer les valeurs moyennes de $\hat{p}_r$ et $\hat{p}_r^2$, respectivement, dans l'état Ψ_{1s}.

(f) En déduire les variances (au carré) pour les deux grandeurs, distance radiale et impulsion radiale.

(g) Vérifier, utilisant les informations précédentes, si le théorème général de l'incertitude en mécanique quantique soit valable pour le mouvement radial dans l'état Ψ_{1s} ou non. Commenter votre résultat.