Maîtrise de Physique, 1993-1994
Mécanique quantique : TD n°10

Oscillateur Harmonique Bidimensionnel.

NANCY 1 Université

1. Oscillateur harmonique bidimensionnel en coordonnées cartésiennes.

On considère une masse m reliée à l'origine par un ressort de raideur k constituant un oscillateur harmonique isotrope plan de pulsation ω.

1.1) Exprimer l'énergie potentielle $\mathcal{V}(x,y)$ en coordonnées cartésiennes.

1.2) Ecrire l'équation de Schrödinger et la résoudre par séparation des variables. On introduira deux nombres quantiques p et q permettant d'exprimer la fonction d'onde $\Psi_{p,q}(x,y)$; les niveaux d'énergie E_N seront caractérisés par un entier N.

Donner l'expression des niveaux d'énergie et des dégénérescences. Ecrire explicitement les trois premières fonctions d'onde.

1.3) Comment se transforme la fonction d'onde $\Psi_{p,q}(x,y)$ par réflexion spatiale $(x,y) \to (-x,-y)$?

2. Oscillateur harmonique bidimensionnel en coordonnées polaires.

On se propose de traiter le problème précédent en coordonnées polaires (ρ,φ)

2.1) Ecrire l'équation de Schrödinger en coordonnées polaires et séparer les variables en cherchant une solution sous la forme $\Psi(\rho,\varphi) = R(\rho)\Phi(\varphi)$.

2.2) Montrer que la partie angulaire est de la forme :

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi} \quad , \quad m \in \mathbb{Z}$$

2.3) Réécrire l'équation radiale (en tenant compte de 2.2) en fonction d'une variable sans dimension $\tilde{\rho} = \rho/b$ où b est une grandeur homogène à une longueur à définir.

2.4) On cherche les fonctions d'onde d'énergie $E_1 = 2\hbar\omega$. En vous inspirant de la question 1.2, indiquer le nombre de solutions que l'on s'attend à trouver et montrer que la forme supposée pour la partie radiale $R(\tilde{\rho})$ est

$$R(\tilde{\rho}) \sim \tilde{\rho} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

2.5) En utilisant la forme ci-dessus dans l'équation radiale, déterminer les valeurs permises pour m au niveau $N = 1$.

2.6) Donner l'expression complète des solutions $\Psi_{N,m}(\rho,\varphi)$ au niveau $N = 1$ et montrer qu'elles sont combinaisons linéaires des solutions en cartésiennes au même niveau.

2.7) Pour un niveau N quelconque, en utilisant les propriétés de Ψ par réflexion spatiale établies en 1.3, montrer que m et N sont de même parité.

2.8) On notera ℓ la valeur maximale de $|m|$ au niveau N et on admettra que la fonction radiale correspondante est de la forme :

$$R_{N,\ell}(\tilde{\rho}) \sim \tilde{\rho}^N e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

En déduire la valeur de ℓ.

2.9) Indiquer dans un tableau les valeurs de E, p, q, N et m pour les quatre premières valeurs de l'énergie, en mettant en évidence la compatibilité des dégénérescences en coordonnées cartésiennes et polaires.

3. Atome d'hydrogène et transformation de Schwinger.

3.1) Ecrire l'équation radiale pour l'atome d'hydrogène avec une fonction d'onde de la forme :

$$\psi_{n_H \ell_H m_H}(r,\theta,\varphi) = R_{n_H \ell_H}(r) Y_{\ell_H}^{m_H}(\theta,\varphi)$$

On notera E_H, ℓ_H et m_H l'énergie et les nombres quantiques relatifs à l'atome d'hydrogène.

3.2) Effectuer les changements de variable et de fonction $r = \frac{\rho^2}{2}$ et $R_{n_H \ell_H} = \frac{1}{\rho} F(\rho)$ et montrer que $F(\rho)$ est solution d'une équation d'oscillateur harmonique à deux dimensions dont on notera m_{OH} le nombre quantique orbital.

3.3) En déduire par identification les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène. On montrera pour cela que m_{OH} doit être impair pour que la correspondance soit possible.

3.4) Construire explicitement la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental.

3.5) Résumer par un tableau indiquant les valeurs de N, ℓ_{OH}, m_{OH}, E_{OH}, E_H, n_H, ℓ_H, m_H, les correspondances entre oscillateur harmonique bidimensionnel et atome d'hydrogène.

Annexes :

• On rappelle que le $p^{\text{ième}}$ état excité de l'oscillateur harmonique unidimensionnel de pulsation ω a pour énergie $\varepsilon_p = (p + 1/2)\hbar\omega$, ($p$ est un entier), et qu'il est représenté par la fonction d'onde :

$$\psi_p(x) = (\pi b^2)^{-1/4} (2^p p!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) H_p\left(\frac{x}{b}\right)$$

Les premiers polynômes d'Hermite sont donnés par :

$$H_0(z) = 1,\ H_1(z) = 2z,\ H_2(z) = 4z^2 - 2 \ldots$$

• Le laplacien en coordonnées polaires s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\cdot\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\cdot$$

UNIVERSITE DE NANCY I
FACULTE DES SCIENCES

DIPLOME : Maîtrise de Physique
Epreuve de : Compléments de
Mécanique Quantique
Examen : session de septembre
Date : 14 Septembre 1993
Horaire : 9h00 à 12h00

SUJET D'EXAMEN :
Rédacteur : B. Berche
Documents non autorisés
Durée : 1 heure 30
Sujet accompagné d'un second sujet rédigé par M Weislinger

Barême approximatif sur 25 : 1 : 5 points, 2 : 20 points.

Important : certains résultats utiles de mécanique quantique sont rappelés en annexe.

Oscillateur Harmonique Bidimensionnel

1. Oscillateur harmonique bidimensionnel en coordonnées cartésiennes.

On considère une masse m reliée à l'origine par un ressort de raideur k constituant un oscillateur harmonique isotrope plan de pulsation ω.

1.1) Exprimer l'énergie potentielle $\mathcal{V}(x,y)$ en coordonnées cartésiennes.

1.2) Ecrire l'équation de Schrödinger et la résoudre par séparation des variables. On introduira deux nombres quantiques p et q permettant d'exprimer la fonction d'onde $\Psi_{p,q}(x,y)$; les niveaux d'énergie E_N seront caractérisés par un entier N.

Donner l'expression des niveaux d'énergie et des dégénérescences. Ecrire explicitement les trois premières fonctions d'onde.

1.3) Comment se transforme la fonction d'onde $\Psi_{p,q}(x,y)$ par réflexion spatiale $(x,y) \to (-x,-y)$?

2. Oscillateur harmonique bidimensionnel en coordonnées polaires.

On se propose de traiter le problème précédent en coordonnées polaires (ρ,φ)

2.1) Ecrire l'équation de Schrödinger en coordonnées polaires et séparer les variables en cherchant une solution sous la forme $\Psi(\rho,\varphi) = R(\rho)\Phi(\varphi)$.

2.2) Montrer que la partie angulaire est de la forme :

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi} \quad , \quad m \in \mathbb{Z}$$

2.3) Réécrire l'équation radiale (en tenant compte de 2.2) en fonction d'une variable sans dimension $\tilde{\rho} = \rho/b$ où b est une grandeur homogène à une longueur à définir.

2.4) On cherche les fonctions d'onde d'énergie $E_1 = 2\hbar\omega$. En vous inspirant de la question 1.2, indiquer le nombre de solutions que l'on s'attend à trouver et montrer que la forme supposée pour la partie radiale $R(\tilde{\rho})$ est

$$R(\tilde{\rho}) \sim \tilde{\rho} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

2.5) En utilisant la forme ci-dessus dans l'équation radiale, déterminer les valeurs permises pour m au niveau $N = 1$.

2.6) Donner l'expression complète des solutions $\Psi_{N,m}(\rho, \varphi)$ au niveau $N = 1$ et montrer qu'elles sont combinaisons linéaires des solutions en cartésiennes au même niveau.

2.7) Pour un niveau N quelconque, en utilisant les propriétés de Ψ par réflexion spatiale établies en 1.3, montrer que m et N sont de même parité.

2.8) On notera ℓ la valeur maximale de $\mid m \mid$ au niveau N et on admettra que la fonction radiale correspondante est de la forme :

$$R_{N,\ell}(\tilde{\rho}) \sim \tilde{\rho}^N e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

En déduire la valeur de ℓ.

2.9) Indiquer dans un tableau les valeurs de E, p, q, N et m pour les quatre premières valeurs de l'énergie, en mettant en évidence la compatibilité des dégénérescences en coordonnées cartésiennes et polaires.

Annexes :

• On rappelle que le $p^{\text{ième}}$ état excité de l'oscillateur harmonique unidimensionnel de pulsation ω a pour énergie $\varepsilon_p = (p + 1/2)\hbar\omega$, ($p$ est un entier), et qu'il est représenté par la fonction d'onde :

$$\psi_p(x) = (\pi b^2)^{-1/4}(2^p p!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) H_p\left(\frac{x}{b}\right)$$

Les premiers polynômes d'Hermite sont donnés par :

$$H_0(z) = 1,\ H_1(z) = 2z,\ H_2(z) = 4z^2 - 2 \ldots$$

• Le laplacien en coordonnées polaires s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\cdot\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\cdot$$

COMPLEMENTS DE MECANIQUE QUANTIQUE
EXAMEN SEPTEMBRE 93

OSCILLATEUR HARMONIQUE BIDIMENSIONNEL

1. COORDONNEES CARTESIENNES.

1-1 $V(x,y) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$

1-2 $V(x,y) = V_1(x) + V_2(y)$ permet de séparer les variables sous la forme $\Psi(x,y) = X(x)Y(y)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)\Psi(x,y) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\Psi(x,y) = E\Psi(x,y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}\right] + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2) = E = E_1 + E_2$$

qui se décomple en deux équations aux valeurs propres

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2X = E_1X$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2Y = E_2Y$$

dont les solutions sont celles de l'oscillateur harmonique 1d

$$E_1 = \mathcal{E}_p = \left(p+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad p \in \mathbb{N}$$

$$E_2 = \mathcal{E}_q = \left(q+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad q \in \mathbb{N}$$

$$X(x) = \Psi_p(x) = (\pi b^2)^{-1/4}(2^p p!)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2b^2}} H_p\left(\frac{x}{b}\right)$$

$$Y(y) = \Psi_q(y) = (\pi b^2)^{-1/4}(2^q q!)^{-1/2} e^{-\frac{y^2}{2b^2}} H_q\left(\frac{y}{b}\right)$$

$$\Psi_{p,q}(x,y) = \Psi_p(x)\Psi_q(y)$$

$$E_N = \mathcal{E}_p + \mathcal{E}_q = (p+q+1)\hbar\omega = (N+1)\hbar\omega$$

$$N = p+q = 0, 1, 2, \ldots$$

$N = 0$	$p = 0$	$q = 0$	$d_0 = 1$
$N = 1$	$p = 1$	$q = 0$	$d_1 = 2$
	$p = 0$	$q = 1$	
$N = 2$	$p = 2$	$q = 0$	$d_2 = 3$
	$p = 1$	$q = 1$	
	$p = 0$	$q = 2$	

$$d_N = N + 1$$

$$\Psi_{00}(x,y) = (\pi b^2)^{-1/2} \exp - \frac{x^2+y^2}{2b^2}$$

$$\Psi_{10}(x,y) = (\pi b^2)^{-1/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \times 2\frac{x}{b} \exp - \frac{x^2+y^2}{2b^2}$$

$$\Psi_{01}(x,y) = (\pi b^2)^{-1/2} \frac{1}{\sqrt{2}} 2\frac{y}{b} \exp - \frac{x^2+y^2}{2b^2}$$

$$b = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$

(1-3) $\Psi_p(x)$ est une fonction paire si p est pair et impaire si p est impair :

$$\Psi_p(-x) = (-1)^p \Psi_p(x)$$

Par réflexion spatiale :

$$\boxed{\begin{aligned} \Psi_{p,q}(-x,-y) &= (-1)^{p+q} \Psi_{p,q}(x,y) \\ \Psi_N(-x,-y) &= (-1)^N \Psi_N(x,y) \end{aligned}}$$

(2) COORDONNEES POLAIRES :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi(\rho,\varphi) + \frac{1}{2} m\omega^2 \rho^2 \Psi(\rho,\varphi) = E\Psi(\rho,\varphi)$$

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\cdot\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\cdot$$

$$\psi(\rho,\varphi) = R(\rho)\Phi(\varphi)$$

(2-1) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Phi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right) + \frac{R}{\rho^2}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}\right]$$

$$+\frac{1}{2}m\omega^2 R\Phi = ER\Phi$$

$\times \frac{\rho^2}{R\Phi}$:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\rho}{R}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right) + \frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^4 - E\rho^2 = 0}$$

(2-2) Deux fonctions de deux variables différents sont égales pour toute valeur de variables si elles sont constantes :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\rho}{R}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^4 - E\rho^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \text{cte}$$

On pose $\frac{\hbar^2}{2m}\alpha$ cette constante

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \alpha$$

$$\Phi(\varphi) \sim e^{\sqrt{\alpha}\varphi} + e^{-\sqrt{\alpha}\varphi}$$

Or $\Phi(\varphi+2\pi) = \Phi(\varphi)$ impose que Φ soit périodique

donc $$\sqrt{\alpha} = im, \quad m \in \mathbb{Z}$$

$$\boxed{\Phi(\varphi) = e^{im\varphi} \qquad m \in \mathbb{Z}}$$

(2-3) Equation radiale :

$$-\frac{\rho}{R}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR}{d\rho}\right)+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\rho^4-\frac{2mE}{\hbar^2}\rho^2=-m^2$$

$$\tilde{\rho}=\frac{\rho}{b} \qquad b^2=\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\rho=\tilde{\rho}b \qquad \frac{\partial}{\partial\rho}=\frac{1}{b}\frac{\partial}{\partial\tilde{\rho}}$$

$$-\frac{\tilde{\rho}b}{R}\frac{1}{b^2}\frac{d}{d\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}b\frac{dR}{d\tilde{\rho}}\right)+\frac{\tilde{\rho}^4b^4}{b^4}-\frac{2mE}{\hbar^2}\tilde{\rho}^2b^2=-m^2$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{\hbar}{m\omega}=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$E=(N+1)\hbar\omega$$

$$\frac{\tilde{\rho}}{R}\frac{d}{d\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}\frac{dR}{d\tilde{\rho}}\right)-\tilde{\rho}^4+2(N+1)\tilde{\rho}^2-m^2=0$$

$$\boxed{\frac{\tilde{\rho}}{R}\left[\frac{dR}{d\tilde{\rho}}+\tilde{\rho}\frac{d^2R}{d\tilde{\rho}^2}\right]-\tilde{\rho}^4+2(N+1)\tilde{\rho}^2-m^2=0} \qquad (1)$$

(2-4) $E_1=2\hbar\omega$

$N=1$

dégénérescence $d_1=2$, on cherche donc deux solutions.

les fonctions cartésiennes sont de la forme

$$x\,e^{-(x^2+y^2)/2b^2}$$

$$y\,e^{-(x^2+y^2)/2b^2}$$

(2-5) on essaie donc

$$R(\tilde{\rho})\sim\tilde{\rho}\,e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

$$\frac{dR}{d\tilde{\rho}}=(1-\tilde{\rho}^2)\,e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

$$\frac{d^2R}{d\tilde{\rho}^2}=(1-\tilde{\rho}-2\tilde{\rho}+\tilde{\rho}^3)\,e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

que l'on remplace dans (1) :

$$1 - \tilde{\rho}^2 - 3\tilde{\rho}^2 + \tilde{\rho}^4 - \tilde{\rho}^4 + 4\tilde{\rho}^2 - m^2 = 0$$

soit $\quad m^2 = 1$

$$\boxed{m = \pm 1}$$

On a finalement les deux solutions cherchées (non normées) :

$$\Psi(\rho,\varphi) \sim \tilde{\rho}\, e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2} e^{\pm i\varphi}$$

2-6 $\quad \Psi(\rho,\varphi) = A \frac{\rho}{b} e^{-\frac{1}{2}\frac{\rho^2}{b^2}} e^{\pm i\varphi}$

$\Psi_{10}(x,y) \pm i\Psi_{01}(x,y)$ donne

$$\sqrt{2}\,(\pi b^2)^{-1/2} \frac{1}{b}(x \pm iy)\, e^{-\frac{\rho^2}{2b^2}}$$

$$= \sqrt{2}\,(\pi b^2)^{-1/2} \frac{1}{b}(\rho\cos\varphi \pm i\rho\sin\varphi)\, e^{-\rho^2/2b^2}$$

$$= \sqrt{2}\,(\pi b^2)^{-1/2} \frac{1}{b}\, \rho\, e^{-\rho^2/2b^2} e^{\pm i\varphi}$$

qu'il faut diviser par $\sqrt{2}$ pour obtenir des solutions normées en ρ, φ car Ψ_{10} et Ψ_{01} sont normées.

On a donc

$$\boxed{\Psi_{\underset{N}{1},\underset{m}{\pm 1}}(\rho,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{\underset{p}{1}\underset{q}{0}}(x,y) \pm i\,\Psi_{01}(x,y)\right)}$$

2-7 En cartésiennes la réflexion spatiale s'écrit :

$$\Psi_N(-x,-y) = (-1)^N \Psi_N(x,y)$$

on doit donc avoir en coordonnées polaires

$$\psi_{N,m}(\rho, \varphi+\pi) = (-1)^N \psi_{N,m}(\rho, \varphi)$$

$$\text{or } \psi_{N,m}(\rho, \varphi+\pi) = (e^{i\pi})^m \psi_{N,m}(\rho, \varphi)$$

$$= (-1)^m \psi_{N,m}(\rho, \varphi)$$

ce qui exige

$$(-1)^N = (-1)^m$$

donc N et m doivent être de même parité.

Au niveau N donné, les valeurs permises de m sont les entiers positifs et négatifs de même parité que N.

(2.8) d : valeur maximale de $|m|$ au niveau N. La fonction radiale correspondante s'écrit par hypothèse (confirmée par le cas $N=1$) :

$$R_{N,\ell}(\tilde{\rho}, \varphi) \sim \tilde{\rho}^N e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

que l'on reporte dans (1) :

$$\frac{dR}{d\tilde{\rho}} = (N\tilde{\rho}^{N-1} - \tilde{\rho}^{N+1}) e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

$$\frac{d^2R}{d\tilde{\rho}^2} = (N(N-1)\tilde{\rho}^{N-2} - (N+1)\tilde{\rho}^N - N\tilde{\rho}^N + \tilde{\rho}^{N+2}) e^{-\frac{1}{2}\tilde{\rho}^2}$$

$$\tilde{\rho}\frac{d^2R}{d\tilde{\rho}^2} = (\tilde{\rho}^{N+3} - (2N+1)\tilde{\rho}^{N+1} + N^2\tilde{\rho}^{N-1} - N\tilde{\rho}^{N-1})$$

$$\frac{\tilde\rho}{R}\left[\frac{dR}{d\tilde\rho}+\tilde\rho\frac{d^2R}{d\tilde\rho^2}\right]=\frac{1}{\tilde\rho^{N-1}}e^{\frac12\tilde\rho^2}\left[\tilde\rho^{N+3}-(2N+2)\tilde\rho^{N+1}\right.$$

$$\left.+N^2\tilde\rho^{N-1}-N\tilde\rho^{N-1}+N\tilde\rho^{N-1}\right]e^{-\frac12\tilde\rho^2}$$

$$=\left(\tilde\rho^4-(2N+2)\tilde\rho^2+N^2\right)$$

et (1) conduit à

$$\tilde\rho^4-(2N+2)\tilde\rho^2+N^2-\tilde\rho^4+(2N+2)\tilde\rho^2-l^2=0$$

soit $l^2=N^2$

ou $\boxed{l=N}$ si on retient la valeur positive.

(2-9) Résumé :

E	N	p	q	l	m	d
$\hbar\omega$	0	0	0	0	0	1
$2\hbar\omega$	1	1 0	0 1	1	1 −1	2
$3\hbar\omega$	2	2 0 1	0 2 1	2	2 0 −2	3
$4\hbar\omega$	3	3 2 1 0	0 1 2 3	3	3 1 −1 −3	4

3. TRANSFORMATION DE SCHWINGER :

3-1 $$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r,\theta,\varphi) - \frac{e^2}{r}\psi(r,\theta,\varphi) = E_H\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$e^2 = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

$$\Delta = \Delta_r - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \quad \text{où} \quad \Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\cdot\right)$$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\,\cdot)$$

et $$\hat{L}^2 Y_{\ell_H}^{m_H} = \hbar^2 \ell_H(\ell_H+1) Y_{\ell_H}^{m_H}$$

Par séparation des variables $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,Y_{\ell_H}^{m_H}(\theta,\varphi)$ on obtient l'équation radiale

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell_H(\ell_H+1)}{r^2}R - \frac{e^2}{r}R = E_H R} \quad (2)$$

3-2 $$r = \frac{1}{2}\rho^2 \quad \text{et} \quad F = \rho R$$

$$rR = \frac{1}{2}\rho F \qquad dr = \rho\,d\rho \qquad \frac{d}{dr} = \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}$$

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR) = \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{1}{2}\rho F\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{F}{\rho} + \frac{dF}{d\rho}\right)$$

$$= \frac{1}{2\rho}\underbrace{\left(\frac{1}{\rho}\frac{dF}{d\rho} + \frac{d^2F}{d\rho^2}\right)}_{\Delta_\rho \text{ en polaires}} - \frac{1}{\rho^2}F\Big)$$

donc $$\frac{d^2}{dr^2}(rR) = \frac{1}{2\rho}\left(\Delta_\rho F - \frac{1}{\rho^2}F\right)$$

L'équation (2) devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{\rho^2}\frac{1}{2\rho}\left(\Delta_\rho F - \frac{1}{\rho^2}F\right) + \frac{\hbar^2}{2m}\ell_H(\ell_H+1)\underbrace{\frac{4F}{\rho^5}}_{\frac{R}{r^2}} - e^2\underbrace{\frac{2F}{\rho^3}}_{\frac{R}{r}} = E_H\frac{F}{\rho}$$

On multiplie cette équation par ρ^3 :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\rho F + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{F}{\rho^2} + \frac{\hbar^2}{2m}4\ell_H(\ell_H+1)\frac{F}{\rho^2} - 2e^2F = E_H\rho^2 F$$

et on l'arrange pour retrouver une équation d'oscillateur harmonique en polaire :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\rho F + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\ell_H(\ell_H+1)+1}{\rho^2}F - E_H\rho^2 F = 2e^2 F}$$

que l'on doit comparer à

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{nH} + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2\psi_{nH} = E_{nH}\psi_{nH}$$

$$\downarrow \quad \psi_{nH} = R_{nH}\Phi_{nH}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta_\rho + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)R_{nH}\Phi_{nH} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\rho R_{nH} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m_{nH}^2 R_{nH}}{\rho^2}\right)\Phi_{nH}$$

c'est-à-dire après simplification de Φ_{nH} :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\rho R_{nH}(\rho) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m_{nH}^2}{\rho^2}R_{nH}(\rho) + \frac{1}{2}m\omega^2\rho^2 R_{nH}(\rho) = E_{nH}R_{nH}(\rho)}$$

La comparaison des termes amène à poser les correspondances suivantes :

$$\begin{cases} R_{OH}(\rho) = F(\rho) \\ \frac{1}{2}\mu\omega^2 = -E_H \\ E_{OH} = 2e^2 \\ m_{OH}^2 = 4\ell_H^2 + 4\ell_H + 1 = (2\ell_H + 1)^2 \end{cases}$$

(3-3) La correspondance entre les moments cinétiques conduit à

$$\ell_H = \frac{1}{2}(|m_{OH}| - 1)$$

qui ne peut être un entier positif (pour l'atome d'hydrogène) que si $|m_{OH}|$ est un entier impair. La correspondance n'est possible qu'après avoir sélectionné les solutions de l'oscillateur harmonique avec N impair d'après ce qui précède. On a alors

$$E_{OH} = (N+1)\hbar\omega = 2n\hbar\omega \qquad n = 1, 2, \ldots$$

d'où

$$E_H = -\frac{1}{2}\mu\omega^2 = -\frac{1}{2}\mu\frac{(\hbar\omega)^2}{\hbar^2}$$

$$= -\frac{1}{2}\mu\left(\frac{E_{OH}}{2n}\right)^2\frac{1}{\hbar^2}$$

$$= -\frac{1}{2}\mu\frac{4e^4}{4n^2}\frac{1}{\hbar^2}$$

$$= -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$

En introduisant le rayon de Bohr $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ on a :

$$\boxed{E_H = -\frac{e^2}{2n^2 a_0}} \qquad n = 1, 2, 3\ldots \qquad \frac{e^2}{2a_0} = 13{,}6\ \text{eV}$$

3.4 La partie radiale de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène s'obtient aussi par la correspondance :

$$R_H(r) = \frac{1}{\rho} F_{OH}(\rho) \qquad \rho^2 = 2r$$

Pour $N = 1$, $n = 1$ $\quad F_{OH}(\rho) \sim \rho e^{-\rho^2/2b^2}$

avec $b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{\hbar}{m}\frac{\hbar}{\hbar\omega} = \frac{\hbar^2}{m}\frac{2}{E_{OH}} = \frac{\hbar^2}{me^2} = a_0$

$$\underline{\frac{1}{\rho} F_{OH}(\rho) \sim e^{-r/a_0}}.$$

3.5

E_{OH}	N	ℓ_{OH}	m_{OH}	n	E_H	ℓ_H	m_H
$\hbar\omega$	0	0	0				
$2\hbar\omega$	1	1	1 −1	1	$-\frac{e^2}{2a_0}$	0	0
$3\hbar\omega$	2	2	2 0 −2				
$4\hbar\omega$	3	3	3 1 −1 −3	2	$-\frac{e^2}{8a_0}$	1 0	1 0 −1 0