M2R MA
Des modèles quantiques à la matière condensée – Partie I

Examen — 1ère session 2009–2010
18 décembre 2009 — 1 heure 30

Les notes de cours manuscrites et tapuscrites sont autorisées.
On peut faire référence sans démonstration à des résultats obtenus en cours.

Autour de l'ion hydrogénoïde

On considère l'ion hydrogénoïde constitué d'un noyau de charge $Z = 1$ et de masse M et d'un seul électron. (On se place en unités atomiques.)

Questions

1. A-t-on intérêt à considérer des spins pour écrire un modèle de Schrödinger pour l'ion hydrogénoïde ?

2. Écrire l'équation de Schrödinger pour l'ion hydrogénoïde en précisant bien les variables de la fonction d'onde.

3. Expliciter l'approximation de Born–Oppenheimer dans $H^1(\mathbb{R}^3)$ pour la recherche de l'état fondamental pour ce modèle.

4. On se place dans le repère barycentrique.
   (a) Écrire l'hamiltonien de l'équation de Schrödinger dans les variables du centre de masse barycentrique $\mathbf{x}_\mathrm{G}$ (ne pas oublier de pondérer par la masse) et de la position relative $\mathbf{x}_\mathrm{r}$ de l'électron par rapport au noyau. Montrer que cet hamiltonien se décompose en un hamiltonien ne dépendant que de $\mathbf{x}_\mathrm{G}$ et un autre ne dépendant que de $\mathbf{x}_\mathrm{r}$.

   (b) Que peut-on en déduire sur le problème de minimisation associé.

   (c) Comparer avec l'approximation de Born–Oppenheimer de la question 3.

5. Étude du problème radial.
   (a) Écrire l'équation d'Euler–Lagrange associée au problème de minimisation (électronique).

   (b) Montrer que si $\phi \in H^1(\mathbb{R}^3)$ est solution de cette équation alors $|\phi|$ en est aussi solution.

   (c) En déduire que ϕ est une fonction radiale : $\phi(\mathbf{x}) = f(|\mathbf{x}|) = f(r)$ et donner l'équation d'Euler–Lagrange vérifiée par f.

   (d) Montrer que cette équation admet une solution exponentiellement décroissante de la forme $\exp(-\alpha r)$. Expliciter α et l'énergie associée.

Quelques outils au dos . . .

Formule du laplacien en coordonnées sphériques

$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

Règle de composition dans H^1

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^n$, $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction lipschitzienne et $u \in H^1(\Omega)$. Alors $F(u) \in H^1(\Omega)$. De plus, si on note N l'ensemble des points où F n'est pas dérivable, alors N est de mesure nulle (dans $\mathbb{R}$) et on a presque partout

$$\nabla F(u) = \begin{cases} F'(u)\nabla u, & \text{si } u \notin N, \\ 0, & \text{si } u \in N. \end{cases}$$