UNIVERSITE PAUL SABATIER
TOULOUSE III

INDIQUER LA NATURE DE L'EXAMEN OU DU CONCOURS ____________

N° CARTE D'ÉTUDIANT

SESSION : ____________

NOM du candidat : ____________

Prénoms : ____________

Date de naissance : 19

NOTE SUR 20

Je soussigné, déclare ne m'être pas inscrit dans une autre Université pour subir le même examen pendant la présente session.
Signature

COMPOSITION

Le candidat devra signer lisiblement son nom à la fin de la composition.

Epreuve de ____________

I 1°) $\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = \frac{\rho_{n\ell}(r)}{r} Y_\ell^m(\theta,\varphi)$

m t.q. la valeur propre de $L_z = \hbar m$.
ℓ t.q. la valeur propre de $L^2 = \hbar\, \ell(\ell+1)$
n t.q. la valeur propre de $H = -\frac{R_y}{n^2}$ $R_y \sim 13{,}6\,eV$.

2°) Densité de probabilité radiale :
$P_{rad}(r) = |\rho_{n\ell}(r)|^2$

$P_{rad}(r)dr$ est la probabilité de trouver l'électron entre à une distance comprise entre r et $r+dr$ du noyau.

$P_{ad}(\theta,\varphi) = |Y_\ell^m(\theta,\varphi)|^2$

$P_{ad}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ est la probabilité de trouver l'e^- dans une direction (θ,φ) à l'angle solide défini par $(d\theta, d\varphi)$ près.

3°) $\frac{3}{8\pi}\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2\theta = \frac{3}{4}\int_{-1}^{1}(1-\cos^2\theta)\,d\cos\theta$

$= \frac{3}{4}\left(2 - \frac{2}{3}\right) = 1$. calcul pour $Y_1^{\pm 1}$

$\frac{3}{4\pi}\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \cos^2\theta = \frac{3}{2}\int_{-1}^{1}\cos^2\theta\, d\cos\theta$

$= \frac{3}{2}\left(\frac{2}{3}\right) = 1$ calcul pour Y_1^0

La normalisation à 1 est une convention, qui permet de définir $P_{\alpha l}(\theta, \varphi)$ sans coefficient de normalisation.

4°) Les $\psi_{m=1}$, $\psi_{m=0}$ et $\psi_{m=-1}$ sont orthonormées entre elles.

donc $\psi_{m=0} \perp \psi_{m=1} + \psi_{m=-1}$

et $\psi_{m=0} \perp -\psi_{m=1} + \psi_{m=-1}$

de plus le produit scalaire de

$|m=1\rangle + |m=-1\rangle$ et de

$-|m=1\rangle + |m=-1\rangle$ est

$-\langle m=1|m=1\rangle + \langle m=-1|m=-1\rangle = 0$

normalisation $\| \mp|m=1\rangle + |m=-1\rangle \|^2$

$= \langle m=1|m=1\rangle + \langle m=-1|m=-1\rangle$

$= 2.$

Les fonctions normées sont :

ψ_{n10}

$\frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n1-1} - \psi_{n11}\right)$

$\frac{e^{i\beta}}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n11} + \psi_{n1-1}\right).$

5°) $\psi_{n10}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{f_{n1}(r)}{r}\cos\theta$

$= f(r)\cos\theta = f(r)\,\frac{z}{r}.$

$\frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n1-1} - \psi_{n11}\right) = e^{i\alpha}\sqrt{\frac{3}{16\pi}}\,\frac{f_{n1}(r)}{r}\sin\theta\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right)$

$= e^{i\alpha}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{f_{n1}(r)}{r}\sin\theta\cos\varphi$

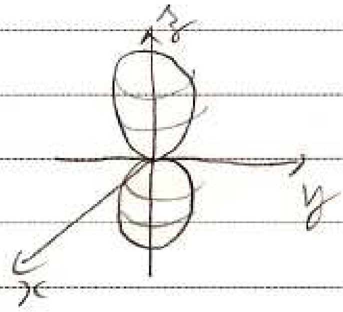
$= e^{i\alpha} f(r)\,\frac{x}{r}.$ on choisit $\alpha = 0$

$\frac{e^{i\beta}}{\sqrt{2}}\left(\psi_{n11} + \psi_{n1-1}\right) = e^{i\beta}\sqrt{\frac{3}{16\pi}}\,\frac{f_{n1}(r)}{r}\sin\theta\left(e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}\right)$

$= -ie^{i\beta} f(r)\sin\theta\sin\varphi = -ie^{i\beta} f(r)\,\frac{y}{r}$

On choisit $e^{i\beta} = i$

6°) Orbitale : dans la direction (θ, φ) : distance proportionnelle à $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$.



orbitale dont l'axe de symétrie est Oz et correspondant à $l = 1$ (état p)

$\Rightarrow p_z$.

p_x et p_y obtenues en remplaçant Oz par Ox et Oy respectivement.

7°) $\Psi(\vec{r}) = f(r) \dfrac{\lambda x + \mu y + \nu z}{r}$

On doit avoir $|\lambda|^2 + |\mu|^2 + |\nu|^2 = 1$

car $(\Psi_{nx}, \Psi_{ny}, \Psi_{nz})$ orthonormée.

si λ, μ, ν réels, on définit

$\vec{k} = \begin{vmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu \end{vmatrix}$ vecteur orthonormé

$\Psi(\vec{r}) = f(r) \dfrac{\vec{k} \cdot \vec{r}}{r}$ obtenu à partir de p_z en remplaçant Oz par l'axe porté par $\vec{k}$; orbitale "$p_{\vec{k}}$".

1) $\widehat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + \dfrac{1}{2}kx^2$

2) N : coefficient de normation

$\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = -2a\,\psi + 4a^2x^2\psi$; en reportant dans l'équation de Schrödinger :

$$E = \frac{\hbar^2}{m}a + x^2\left(\frac{k}{2} - \frac{2\hbar^2 2a^2}{m}\right)$$

E ne doit pas dépendre de x, d'où $a = \dfrac{\sqrt{km}}{2\hbar}$.

Finalement $E = \dfrac{1}{2}h\nu_0$ avec $\nu_0 = \dfrac{1}{2\pi}\sqrt{\dfrac{k}{m}}$.

3) a) $\widehat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx_1^2} + \dfrac{1}{2}kx_1^2 - \dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx_2^2} + \dfrac{1}{2}kx_2^2 + \dfrac{A}{R^3}x_1x_2$.

b) $x_1 = (u - v)/2$; $x_2 = (u + v)/2$

$$\frac{d^2}{dx_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial u\,\partial v} \quad ; \quad \frac{d^2}{dx_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} + 2\frac{\partial^2}{\partial u\,\partial v}$$

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{1}{4}\left(k + \frac{A}{R^3}\right)u^2 - \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{1}{4}\left(k - \frac{A}{R^3}\right)v^2 .$$

d'où $\widehat{H} = \widehat{H}'(u) + \widehat{H}''(v)$

avec $m' = m'' = \dfrac{m}{2}$; $k' = \dfrac{1}{2}\left(k + \dfrac{A}{R^3}\right)$; $k'' = \dfrac{1}{2}\left(k - \dfrac{A}{R^3}\right)$

$\widehat{H}$ se décomposant selon la somme de deux hamiltoniens indépendants, l'énergie de l'état fondamental est égale à la somme des énergies de l'état fondamental correspondant à chaque hamiltonien :

$$E = \frac{h}{4\pi}\left(\sqrt{\frac{k}{m} + \frac{A}{mR^3}} + \sqrt{\frac{k}{m} - \frac{A}{mR^3}}\right).$$

Développement au second ordre :

$$E = h\,\nu_0 - \frac{h\,\nu_0\,A^2}{8k^2R^6}$$