<u>Correction questions de cours</u>

• Relation de fermeture $\sum_{i=1}^{N} P_i = \sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}$ opérateur identité
$\ll$ projection

$\Rightarrow$ s'assurer que la base est complète

• Phase temporelle $\Rightarrow$ eq Schrödinger dep du temps $\hat{H}|\psi_{(x,t)}\rangle = i\hbar \frac{\partial|\psi_{(x,t)}\rangle}{\partial t}$

$$|\psi(x,t)\rangle = |\varphi(x)\rangle|\phi(t)\rangle$$

$$\hat{H}|\varphi(x)\rangle|\phi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial|\varphi(x)\rangle|\phi(t)\rangle}{\partial t} = i\hbar|\varphi(x)\rangle\frac{\partial|\phi(t)\rangle}{\partial t}$$

$$= E|\varphi(x)\rangle|\phi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |\phi(t)\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

eq diff 1er ordre

$$\Rightarrow |\psi(x,t)\rangle = |\varphi(x)\rangle e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

• Cdt stationnarité H : $2\pi r = n\lambda$ n entier

périmètre = multiple entier longueur d'onde

avec $\lambda = \frac{h}{p}$ $\leftarrow$ q^té de mvt

$$2\pi r = n\frac{h}{p} \Leftrightarrow \underbrace{pr}_{m^t \text{ cinétique}} = \frac{h}{2\pi}\times n = n\hbar$$

$\Rightarrow$ on retrouve la quantification de $\vec{L}$ m^t cinétique (Bohr)

• $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ et par permutations circulaires

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x \text{ puis } [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

• $\vec{\mu} = i\vec{A}$ ($\vec{\mu}$: m^t magnétique ; $\vec{A}$: normale et surface)

$i = \frac{dq}{dt} = \frac{q}{t}$ avec $t = \frac{2\pi r}{v} \Rightarrow i = \frac{qv}{2\pi r}$

$\vec{A} = \pi r^2 \vec{n}$

$$= \frac{qv\pi r^2}{2\pi r}\vec{n} = \frac{qvr}{2}\vec{n} = \frac{q}{2m}\vec{L} \leftarrow m^t \text{ cinétique}$$

• Stern et Gerlach $\Rightarrow$ mise en évidence d'1 forme quantification spatiale (directions privilégiées)
celle du spin d'1 particule dotée d'1 m^t magnétique ds un gradient de champ magnétique $\vec{F} = \mu_z\frac{\partial B_z}{\partial z}\vec{e_z}$

• Ordre 1 en énergie $\Rightarrow$ $E_n^{(1)} = \langle\varphi_n^{(0)}|W|\varphi_n^{(0)}\rangle$

$|\varphi_n\rangle$ base
W perturbation $\ll H_0$

Traitement quantique

1) Définitions a) Proba de présence / densité de probabilité

$$\rho = |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 \quad \psi \text{ amplitude de probabilité}$$

b) Proba élémentaire dP $\quad dP = |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 d^3\vec{r}$

c) Proba de présence dans δV $\quad P = \int_{\delta V} dP$

2) État 1s. $\psi_{1s}(r,\theta,\varphi) = R_{10}(r)\, Y_{00}(\theta,\varphi)$

$$dP_r = \underbrace{|R_{10}(r)|^2 r^2}_{\rho(r)} dr \underbrace{\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |Y_{00}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi}_{\equiv 1 \text{ car orbitales sphériques normées}}$$

donc $dP_r = |R_{10}(r)|^2 r^2 dr$

ici $R_{10}(r) = \dfrac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0}$ $\quad \left(Y_0^0 = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\right) \Rightarrow dP_r = \dfrac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$.

proba de trouver l'e⁻ entre une sphère de rayon r et r+dr

3) Distance la plus probable $\Leftrightarrow$ densité de proba max

$$\frac{d\rho(r)}{dr} = \frac{4}{a_0^3}\left(2r - \frac{2}{a_0} r^2\right) e^{-2r/a_0} = 0 \Rightarrow r_p = a_0 \quad \text{rayon de Bohr.}$$

4) Proba de présence entre 0,9 a_0 et 1,1 a_0

$$P(r) = \int_0^r \rho(r')\,dr' = \int_0^r \frac{4r'^2}{a_0^3} e^{-2r'/a_0} dr'$$

Chgt de variable $X = r'/a_0 \Rightarrow P(r) = 4\int_0^{r/a_0} X^2 e^{-2X} dX$

2 intégrations par partie $\quad u = X^2 \; du = 2X\,dX$

$$v = -\frac{1}{2} e^{-2X} \; dv = e^{-2X} dX$$

$$\Rightarrow P(r) = 4\left\{\left[-\frac{X^2}{2} e^{-2X}\right]_0^{r/a_0} + \int_0^{r/a_0} X e^{-2X} dX\right\}$$

$$u = X \qquad du = dX$$

$$v = -\frac{1}{2} e^{-2X} \qquad dv = e^{-2X} dX$$

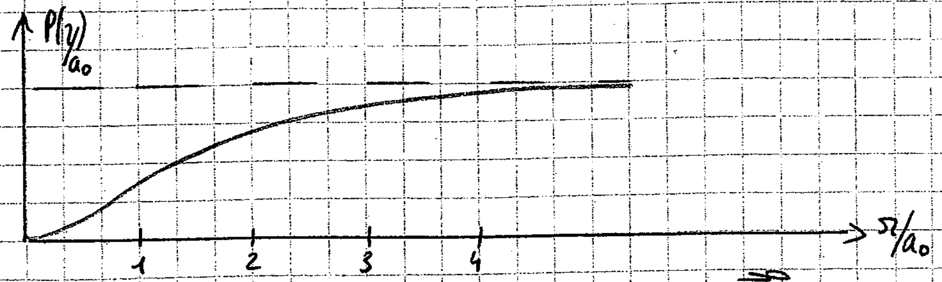
$$= 4 \left\{ \left[-\frac{X^2}{2} e^{-2X} \right]_0^{r/a_0} + \left[-\frac{X}{2} e^{-2X} \right]_0^{r/a_0} + \frac{1}{2} \int_0^{r/a_0} e^{-2X} dX \right\}$$

$$= 1 - e^{-\frac{2r}{a_0}} \left(2\frac{r^2}{a_0^2} + 2\frac{r}{a_0} + 1 \right)$$

r	0	$0{,}9a_0$	a_0	$1{,}1a_0$	$2a_0$	$3a_0$
$P(r)$	0	0,269	0,323	0,377	0,762	0,938

$\Rightarrow$ Proba $P(0{,}9a_0 < r < 1{,}1a_0) = 0{,}377 - 0{,}269 = 0{,}108$

5) Courbe $P(r)$.



6) Valeur moyenne $\langle r \rangle = \iiint \psi_{1s}^* \, r \, \psi_{1s} \, d^3\vec{v} = \int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 r \, dr$

$$\left[\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}} \right] \qquad = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} dr = \frac{4}{a_0^3} \frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4} = \frac{4 \times 3 \times 2 \, a_0^4}{a_0^3 \, 16} = \frac{3}{2} a_0$$

soit $\langle r \rangle_{1s} = \frac{3}{2} a_0$