SOLUTIONS DE LA SÉRIE DE TD N° 03
ESPACE DES FONCTIONS D'ONDES – OPÉRATEURS LINÉAIRES

EXERCICE 01 :

1. Définir un opérateur.

Un opérateur agit sur une fonction d'onde pour donner une autre fonction d'onde

$$A \text{ est un opérateur} \quad \Leftrightarrow \quad A\psi(x) = \chi(x)$$

2. Définir un opérateur linéaire.

$$A \text{ est un opérateur linéaire} \quad \Leftrightarrow \quad A\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) = \lambda.A\psi(x) + \mu.A\varphi(x)$$

3. Parmi ces opérateurs, lesquels sont linéaires ?

- $A\psi(x) = \sqrt{\psi(x)}$

$$A\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) = \sqrt{\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)} \neq \lambda.\sqrt{\psi(x)} + \mu.\sqrt{\varphi(x)}$$

Cet opérateur n'est pas linéaire.

- $B\psi(x) = \int \psi(x).dx$

$$B\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) = \int \big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big).dx = \lambda.\int \psi(x).dx + \mu.\int \varphi(x).dx$$

Cet opérateur est linéaire.

- $C\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$

$$C\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) = \frac{d\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big)}{dx} = \lambda.\frac{d\psi(x)}{dx} + \mu.\frac{d\varphi(x)}{dx}$$

Cet opérateur est linéaire.

- $D\psi(x) = \ln\big(\psi(x)\big)$

$$D\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) = \ln\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) \neq \lambda.\ln\big(\psi(x)\big) + \mu.\ln\big(\varphi(x)\big)$$

Cet opérateur n'est pas linéaire.

- $E\psi(x) = \psi^*(x)$

$$E\big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big) = \big(\lambda.\psi(x) + \mu.\varphi(x)\big)^* = \lambda^*.\psi^*(x) + \mu^*.\varphi^*(x) \neq \lambda.\psi^*(x) + \mu.\varphi^*(x)$$

Cet opérateur n'est pas linéaire.

4. Montrer que la somme ainsi que le produit de deux opérateurs linéaires sont aussi des opérateurs linéaires.

$$A \text{ est un opérateur linéaire} \Leftrightarrow A\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=\lambda.A\psi(x)+\mu.A\varphi(x)$$
$$B \text{ est un opérateur linéaire} \Leftrightarrow B\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=\lambda.B\psi(x)+\mu.B\varphi(x)$$

La somme de deux opérateur est définie par

$$(A+B)\psi(x)=A\psi(x)+B\psi(x)$$

D'où

$$(A+B)\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=A\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)+B\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)$$

En utilisant la linéarité de A et B

$$(A+B)\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=\lambda.A\psi(x)+\mu.A\varphi(x)+\lambda.B\psi(x)+\mu.B\varphi(x)$$

Comme $A\psi(x), A\varphi(x), B\psi(x), B\varphi(x)$ sont des fonctions d'ondes, alors :

$$(A+B)\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=\lambda.\big(A\psi(x)+B\psi(x)\big)+\mu.\big(A\varphi(x)+B\varphi(x)\big)$$

En réutilisant la définition de la somme de deux opérateurs

$$(A+B)\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=\lambda.(A+B)\psi(x)+\mu.(A+B)\varphi(x)$$

Donc l'opérateur $(A+B)$ est linéaire.

Le produit de deux opérateur est définie par

$$AB\psi(x)=A\big(B\psi(x)\big)$$

D'où

$$AB\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=A\Big(B\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)\Big)$$

En utilisant la linéarité de B

$$AB\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=A\big(\lambda.B\psi(x)+\mu.B\varphi(x)\big)$$

Comme $B\psi(x), B\varphi(x)$ sont des fonctions d'ondes, alors, nous pourrons utiliser la linéarité de A :

$$AB\big(\lambda.\psi(x)+\mu.\varphi(x)\big)=\lambda.AB\psi(x)+\mu.AB\varphi(x)$$

Donc l'opérateur AB est linéaire.

5. Montrer les propriétés suivantes (A, B et C sont des opérateurs linéaires) :

- $[A,B]=-[B,A]$

$$[A,B]\psi(x)=AB\psi(x)-BA\psi(x)$$

Comme $AB\psi(x), BA\psi(x)$ sont des fonctions d'ondes

$$[A,B]\psi(x)=-BA\psi(x)+AB\psi(x)=-\big(BA\psi(x)-AB\psi(x)\big)=-[B,A]\psi(x)$$

D'où

$$[A,B]=-[B,A]$$

- $[A,(B+C)]=[A,B]+[A,C]$

$$[A,(B+C)]\psi(x)=A(B+C)\psi(x)-(B+C)A\psi(x)$$
$$[A,(B+C)]\psi(x)=AB\psi(x)+AC\psi(x)-BA\psi(x)-CA\psi(x)$$
$$[A,(B+C)]\psi(x)=AB\psi(x)-BA\psi(x)+AC\psi(x)-CA\psi(x)=[A,B]\psi(x)+[A,C]\psi(x)$$

Donc

$$[A,(B+C)]=[A,B]+[A,C]$$

- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

$$[A, BC]\psi(x) = ABC\psi(x) - BCA\psi(x)$$
$$[A, BC]\psi(x) = ABC\psi(x) - BAC\psi(x) + BAC\psi(x) - BCA\psi(x)$$
$$[A, BC]\psi(x) = (AB - BA)C\psi(x) + B\big(AC\psi(x) - CA\psi(x)\big) = [A, B]C\psi(x) + B[A, C]\psi(x)$$

Donc

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

- $\big[A, [B, C]\big] + \big[C, [A, B]\big] + \big[B, [C, A]\big] = 0$

$$\big[A, [B, C]\big]\psi(x) = A[B, C]\psi(x) - [B, C]A\psi(x)$$
$$\big[A, [B, C]\big]\psi(x) = A\big(BC\psi(x) - CB\psi(x)\big) - (BC - CB)A\psi(x)$$
$$\big[A, [B, C]\big]\psi(x) = ABC\psi(x) - ACB\psi(x) - BCA\psi(x) + CBA\psi(x) \quad \ldots\ldots\ldots \; (1)$$

$$\big[C, [A, B]\big]\psi(x) = C[A, B]\psi(x) - [A, B]C\psi(x)$$
$$\big[C, [A, B]\big]\psi(x) = C\big(AB\psi(x) - BA\psi(x)\big) - (AB - BA)C\psi(x)$$
$$\big[C, [A, B]\big]\psi(x) = CAB\psi(x) - CBA\psi(x) - ABC\psi(x) + BAC\psi(x) \quad \ldots\ldots\ldots \; (2)$$

$$\big[B, [C, A]\big]\psi(x) = B[C, A]\psi(x) - [C, A]B\psi(x)$$
$$\big[B, [C, A]\big]\psi(x) = B\big(CA\psi(x) - AC\psi(x)\big) - (CA - AC)B\psi(x)$$
$$\big[B, [C, A]\big]\psi(x) = BCA\psi(x) - BAC\psi(x) - CAB\psi(x) + ACB\psi(x) \quad \ldots\ldots\ldots \; (3)$$

En faisant la somme des trois équations $(1), (2)$ et (3).

$$\big[A, [B, C]\big]\psi(x) + \big[C, [A, B]\big]\psi(x) + \big[B, [C, A]\big]\psi(x) = 0$$

Donc

$$\big[A, [B, C]\big] + \big[C, [A, B]\big] + \big[B, [C, A]\big] = 0$$

EXERCICE 02 :

1. Donner l'équation qui définit l'adjoint d'un opérateur dans l'espace des fonctions d'ondes.

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\psi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).A^+\varphi(x).dx\right)^*}$$

Ou

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(A^+\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx}$$

2. Déterminer les opérateurs adjoints des opérateurs suivants :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).X\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(X^+\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).X\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).x.\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x.\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx$$

D'où

$$\boxed{X^+ = x}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).D_x\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(D_x^+\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).D_x\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx$$

En intégrant par parties

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx = [\varphi^*(x).\psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi^*(x)}{dx}\psi(x)dx$$

Comme des fonctions et sont de carré sommable, alors :

$$\psi(\pm\infty) = \varphi(\pm\infty) = 0$$

D'où

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(D_x^+\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)^*.\psi(x)dx$$

Et

$$\boxed{D_x^+ = -\frac{d}{dx}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).P_x\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(P_x^+\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).P_x\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}dx$$

En intégrant par parties

$$\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx = \frac{\hbar}{i}[\varphi^*(x).\psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi^*(x)}{dx}\psi(x)dx$$

Comme des fonctions et sont de carré sommable, alors :

$$\psi(\pm\infty) = \varphi(\pm\infty) = 0$$

D'où

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(D_x^+\varphi(x)\right)^*.\psi(x).dx=\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)^*.\psi(x)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi(x)}{dx}\right)^*.\psi(x)dx$$

Et

$$\boxed{P_x^+=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}}$$

3. Quand est-ce qu'on dit qu'un opérateur est hermétique ?

Un opérateur est dit hermétique s'il est égal à son adjoint : $A=A^+$. Ou bien :

$$\int_{\text{espace}}\varphi^*(\vec{r}).A\psi(\vec{r}).d^3r=\int_{\text{espace}}\left(A\varphi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r$$

4. Parmi les opérateurs précédents, lesquels sont hermétiques ?

$$X^+=x=X \qquad \text{cet opérateur est hermétique}$$

$$D_x^+=-\frac{d}{dx}=-D_x \qquad \text{cet opérateur n'est pas hermétique}$$

$$P_x^+=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}=P_x \qquad \text{cet opérateur est hermétique}$$

5. Si A et B sont des opérateurs linéaires quelconques, montrer que :

- $A=(A^+)^+$

En utilisant la définition de l'adjoint, calculons :

$$\left(\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).A\psi(x).dx\right)^*\right)^*=\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).A^+\varphi(x).dx\right)^*=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).(A^+)^+\psi(x).dx$$

Comme

$$\left(\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).A\psi(x).dx\right)^*\right)^*=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).A\psi(x).dx$$

Donc

$$A=(A^+)^+$$

- $(\lambda.A)^+=\lambda^*.A^+$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).\lambda.A\psi(x).dx=\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).(\lambda.A)^+\varphi(x).dx\right)^*$$

D'autre part

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).\lambda.A\psi(x).dx=\lambda.\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).A\psi(x).dx=\lambda.\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).A^+\varphi(x).dx\right)^*$$

Donc

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(x).\lambda.A\psi(x).dx=\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).\lambda^*.A^+\varphi(x).dx\right)^*$$

En comparant, il vient que

$$(\lambda.A)^+=\lambda^*.A^+$$

- $(A+B)^+ = A^+ + B^+$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).(A+B)\psi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).(A+B)^+\varphi(x).dx\right)^*$$

D'autre part

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).(A+B)\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\psi(x).dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).B\psi(x).dx$$

Donc

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).(A+B)\psi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).A^+\varphi(x).dx\right)^* + \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).B^+\varphi(x).dx\right)^*$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).(A+B)\psi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).(A^+ + B^+)\varphi(x).dx\right)^*$$

En comparant, il vient que

$$(A+B)^+ = A^+ + B^+$$

- $(AB)^+ = B^+A^+$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).(AB)\psi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).(AB)^+\varphi(x).dx\right)^*$$

D'autre part

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).(AB)\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\big(B\psi(x)\big).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\chi(x).dx$$

Avec $\chi(x) = B\psi(x)$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\chi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x).A^+\varphi(x).dx\right)^* = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x).\xi(x).dx\right)^*$$

Avec $\xi(x) = A^+\varphi(x)$. Donc

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\chi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^*(x).\chi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^*(x).B\psi(x).dx$$

Et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x).A\chi(x).dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).B^+\xi(x).dx\right)^* = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).B^+A^+\varphi(x).dx\right)^*$$

En comparant, il vient que

$$(AB)^+ = B^+A^+$$

- $[A,B]^+ = [B^+,A^+]$

En utilisant les propriétés précédentes

$$[A,B]^+ = (AB-BA)^+ = (AB)^+ - (BA)^+ = B^+A^+ - A^+B^+ = [B^+,A^+]$$

- En utilisant les propriétés précédentes

$$(A+A^+)^+ = A^+ + (A^+)^+ = A^+ + A = A + A^+ \qquad \text{hermétique}$$

$$\big(i(A-A^+)\big)^+ = i^*(A-A^+)^+ = -i(A^+ - (A^+)^+) = -i(A^+ - A) = i(A-A^+) \qquad \text{hermétique}$$

$$(AA^+)^+ = (A^+)^+A^+ = AA^+ \qquad \text{hermétique}$$

6. Montrer que les valeurs propres d'un opérateur hermétique sont réelles.

Calculons la valeur moyenne d'un opérateur hermétique A sur un de ses vecteurs propres $\psi(\vec{r})$ (normé). En utilisant l'équation aux valeurs propres

$$A\psi(\vec{r}) = \lambda.\psi(\vec{r})$$

Nous trouvons

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(\vec{r}).A\psi(\vec{r}).d^3r = \int \psi^*(\vec{r}).\lambda\psi(\vec{r}).d^3r = \lambda$$

Utilisons maintenant la définition de l'opérateur hermétique $A = A^+$.

$$\int \psi^*(\vec{r}).A\psi(\vec{r}).d^3r = \int \left(A^+\psi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r = \int \left(A\psi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r$$

Ce qui donne

$$\langle A\rangle = \int \left(A\psi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r = \int \left(\lambda\psi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r = \lambda^*$$

Ce qui donne finalement

$$\lambda = \lambda^* \qquad \Rightarrow \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$

7. Montrer que les vecteurs propres d'un opérateur hermétique correspondants à des valeurs propres différentes sont tous orthogonaux.

Ecrivons l'équation aux valeurs propres d'un opérateur linéaire A pour deux valeurs propres différentes $(\lambda \neq \mu)$.

$$A\psi(\vec{r}) = \lambda.\psi(\vec{r}) \quad \text{et} \quad A\varphi(\vec{r}) = \mu.\varphi(\vec{r})$$

Tel que $\psi(\vec{r})$ et $\varphi(\vec{r})$ sont des vecteurs propres associés respectivement aux valeurs propres λ et μ.

Utilisons maintenant la définition de l'opérateur hermétique $A = A^+$.

$$\int \varphi^*(\vec{r}).A\psi(\vec{r}).d^3r = \int \left(A^+\varphi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r = \int \left(A\varphi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r$$

Ce qui donne

$$\int \varphi^*(\vec{r}).\lambda\psi(\vec{r}).d^3r = \int \left(\mu\varphi(\vec{r})\right)^*.\psi(\vec{r}).d^3r$$

λ et μ étant des constantes réelles (propriété précédente), nous avons donc

$$\lambda\int \varphi^*(\vec{r}).\psi(\vec{r}).d^3r = \mu^*\int \varphi^*(\vec{r}).\psi(\vec{r}).d^3r$$

Et

$$(\lambda-\mu)\int \varphi^*(\vec{r}).\psi(\vec{r}).d^3r = 0$$

Comme $(\lambda - \mu \neq 0)$ c'est le produit scalaire qui (φ,ψ) est nul.

$$(\varphi,\psi) = \int \varphi^*(\vec{r}).\psi(\vec{r}).d^3r = 0$$

Les deux vecteurs $\psi(\vec{r})$ et $\varphi(\vec{r})$ sont donc orthogonaux.

EXERCICE 03 :

$$\psi(x) = N\frac{e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}}{\sqrt{x^2+a^2}}$$

1. Normalisation

$$(\psi,\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\psi(x).dx = 1$$

$$|N|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\frac{p_0}{\hbar}x}.e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}}{x^2+a^2}dx = |N|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{x^2+a^2}dx = 1$$

On utilise le changement de variable suivant

$$x = a.\tan\theta \qquad \Rightarrow \qquad x^2+a^2 = \frac{a^2}{\cos^2\theta} \qquad \text{et} \qquad dx = \frac{a}{\cos^2\theta}d\theta$$

Ce qui donne

$$|N|^2\int_{-\pi/2}^{+\pi/2}\frac{\cos^2\theta}{a^2}\frac{a}{\cos^2\theta}d\theta = \frac{|N|^2}{a}\int_{-\pi/2}^{+\pi/2}d\theta = \frac{|N|^2}{a}[\theta]_{-\pi/2}^{+\pi/2} = 1$$

Finalement

$$|N|^2 = a/\pi \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{|N| = \sqrt{a/\pi}} \qquad \text{et} \qquad N = \left(\sqrt{a/\pi}\right).e^{i\phi}$$

Est un facteur de phase globale qui n'a pas d'influence sur la probabilité de présence. Donc

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}}{\sqrt{x^2+a^2}}}$$

2. Probabilité de présence

$$P\left(-a/\sqrt{3} \le x \le +a/\sqrt{3}\right) = \int_{-a/\sqrt{3}}^{+a/\sqrt{3}}\psi^*(x).\psi(x).dx$$

$$P\left(-a/\sqrt{3} \le x \le +a/\sqrt{3}\right) = \frac{a}{\pi}\int_{-a/\sqrt{3}}^{+a/\sqrt{3}}\frac{1}{x^2+a^2}dx$$

En utilisant le même changement de variable, avec $x = \pm a/\sqrt{3} \quad \Rightarrow \quad \theta = \pm\pi/6$

$$P\left(-a/\sqrt{3} \le x \le +a/\sqrt{3}\right) = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi/6}^{+\pi/6}\frac{\cos^2\theta}{a^2}\frac{a}{\cos^2\theta}d\theta = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi/6}^{+\pi/6}d\theta$$

$$P\left(-a/\sqrt{3} \le x \le +a/\sqrt{3}\right) = \frac{1}{\pi}[\theta]_{-\pi/6}^{+\pi/6} = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{6}-\left(-\frac{\pi}{6}\right)\right)$$

Donc

$$\boxed{P\left(-a/\sqrt{3} \le x \le +a/\sqrt{3}\right) = \frac{1}{3}}$$

3. Valeur moyenne de l'opérateur impulsion P pour l'état $\psi(x)$ normé.

$$\langle P\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).P\psi(x).dx$$

$$\langle P\rangle = \frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\frac{p_0}{\hbar}x}}{\sqrt{x^2+a^2}}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(\frac{e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}}{\sqrt{x^2+a^2}}\right)dx$$

Or

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}}{\sqrt{x^2+a^2}}\right) = \frac{d}{dx}\left(e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}(x^2+a^2)^{-1/2}\right) = i\frac{p_0}{\hbar}e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}(x^2+a^2)^{-1/2} - x.e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}(x^2+a^2)^{-3/2}$$

Ce qui donne

$$\langle P\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}(x^2+a^2)^{-1/2}\left(i\frac{p_0}{\hbar}(x^2+a^2)^{-1/2} - x.(x^2+a^2)^{-3/2}\right)dx$$

Qui est une somme d'intégrales

$$\langle P\rangle = i\frac{p_0}{\hbar}\frac{\hbar}{i}\frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}(x^2+a^2)^{-1}dx - \frac{\hbar}{i}\frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}x.(x^2+a^2)^{-2}dx$$

Comme la focntion est normée

$$\frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}(x^2+a^2)^{-1}dx = \frac{a}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{x^2+a^2}dx = 1$$

Reste à calculer

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x.(x^2+a^2)^{-2}dx = \frac{1}{2}\left[\frac{(x^2+a^2)^{-1}}{-1}\right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

Nous avons finalement

$$\boxed{\langle P\rangle = p_0}$$

EXERCICE 04 : ***Boite de potentiel à une dimension***

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)$$

1. Equation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + V.\psi_n(x) = E_n.\psi_n(x)$$

Avec $(V = 0)$ à l'intérieur de la boite de potentiel $(0 \leq x \leq L)$
En dérivant

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} = -\left(n\frac{\pi}{L}\right)^2\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) = -\left(n\frac{\pi}{L}\right)^2\psi_n(x)$$

Et en remplaçant dans l'équation de Schrödinger

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m.L^2}n^2}$$

2. Normalisation

$$(\psi_n, \psi_n) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x).\psi_n(x).dx = \int_0^L\psi_n^*(x).\psi_n(x).dx$$

$$(\psi_n, \psi_n) = \frac{2}{L}\int_0^L\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right).dx = \frac{1}{L}\int_0^L 1 - \cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

$$(\psi_n, \psi_n) = \frac{1}{L}\left[x - \frac{L}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L = \frac{1}{L}\left((L-0) - \frac{L}{2n\pi}(\sin(2n\pi) - \sin(0))\right)$$

Ce qui donne

$$\boxed{(\psi_n, \psi_n) = 1}$$

Les états $\psi_n(x)$ sont donc normés.

Orthogonalité

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x).\psi_{n'}(x).dx = \int_0^L\psi_n^*(x).\psi_{n'}(x).dx \qquad (n \neq n')$$

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \frac{2}{L}\int_0^L\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right).\sin\left(n'\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

En écrivant que

$$\sin(\alpha).\sin(\beta) = \left(\frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i}\right)\left(\frac{e^{i\beta} - e^{-i\beta}}{2i}\right) = \frac{1}{2}\cos(\alpha - \beta) - \frac{1}{2}\cos(\alpha + \beta)$$

Nous avons

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \frac{1}{L}\int_0^L\cos\left((n - n')\frac{\pi}{L}x\right).dx - \frac{1}{L}\int_0^L\cos\left((n + n')\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \frac{1}{L}\left(\frac{L}{(n-n')\pi}\big(\sin((n-n')\pi) - \sin(0)\big)\right) - \frac{1}{L}\left(\frac{L}{(n+n')\pi}\big(\sin((n+n')\pi) - \sin(0)\big)\right)$$

Et donc

$$\boxed{(\psi_n, \psi_{n'}) = 0} \qquad (n \neq n')$$

Les états $\psi_n(x)$ sont donc orthogonaux.

3. Valeur moyenne de l'opérateur position X pour un état $\psi_n(x)$ normé.

$$\langle X\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x).X\psi_n(x).dx$$

$$\langle X\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x.\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right).dx = \frac{1}{L}\int_0^L x.dx - \frac{1}{L}\int_0^L x.\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

Intégrons par parties

$$\int_0^L x.\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right).dx = \left[\frac{L}{2n\pi}x.\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L - \frac{L}{2n\pi}\int_0^L \sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

$$\int_0^L x.\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right).dx = \left[\frac{L}{2n\pi}x.\sin\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L + \left(\frac{L}{2n\pi}\right)^2\left[\cos\left(2n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L = 0$$

D'où

$$\langle X\rangle = \frac{1}{L}\int_0^L x.dx = \frac{1}{L}\left[\frac{x^2}{2}\right]_0^L \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle X\rangle = \frac{L}{2}}$$

Valeur moyenne de l'opérateur impulsion P pour un état $\psi_n(x)$ normé.

$$\langle P\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x).P\psi_n(x).dx$$

$$\langle P\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right).\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\right).dx = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{L}\left(n\frac{\pi}{L}\right)\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right).\cos\left(n\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

D'où

$$\langle P\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{L}\left[\frac{1}{2}\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\right]_0^L \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle P\rangle = 0}$$

4. Valeur moyenne de l'opérateur X^2 pour un état $\psi_n(x)$ normé.

$$\langle X^2\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x).X^2\psi_n(x).dx$$

$$\langle X^2\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x^2.\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

En utilisant (intégration par parties)

$$\int x^2\sin^2(x).dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4} - \frac{1}{8}\right).\sin(2x) - \frac{x.\cos(2x)}{4}$$

Et le changement de variable

$$n\frac{\pi}{L}x = y \qquad \Rightarrow \qquad dx = \frac{L}{n\pi}dy \quad \text{et} \quad x^2 = \left(\frac{L}{n\pi}\right)^2 y^2$$

D'où

$$\langle X^2\rangle = \frac{2}{L}\left(\frac{L}{n\pi}\right)^3\left[\frac{y^3}{6} - \left(\frac{y^2}{4} - \frac{1}{8}\right).\sin(2y) - \frac{y.\cos(2y)}{4}\right]_0^{n\pi}$$

Finalement

$$\boxed{\langle X^2\rangle = \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)L^2}$$

Valeur moyenne de l'opérateur P^2 pour un état $\psi_n(x)$ normé.

$$\langle P^2\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x).P^2\psi_n(x).dx$$

$$\langle P^2\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right).(-\hbar^2)\frac{d^2}{dx^2}\left(\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\right).dx = \frac{2\hbar^2}{L}\left(n\frac{\pi}{L}\right)^2\int_0^L \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right).\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right).dx$$

Comme l'état $\psi_n(x)$ est normé, nous avons

$$(\psi_n,\psi_n) = \frac{2}{L}\int_0^L \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right).dx = 1$$

D'où

$$\boxed{\langle P^2\rangle = \hbar^2\left(n\frac{\pi}{L}\right)^2 = \hbar^2k^2}$$

5. Les écart quadratiques moyens sont donnés par

$$\Delta X = \sqrt{\langle X^2\rangle - \langle X\rangle^2} \quad \Rightarrow \quad \Delta X = \sqrt{\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2n^2\pi^2}\right)L^2 - \frac{L^2}{4}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta X = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{1}{3}-\frac{2}{n^2\pi^2}}}$$

$$\Delta P = \sqrt{\langle P^2\rangle - \langle P\rangle^2} \quad \Rightarrow \quad \Delta P = \sqrt{\hbar^2\left(n\frac{\pi}{L}\right)^2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta P = \hbar\frac{\pi}{L}n}$$

$$\boxed{\Delta X.\Delta P = \left(\pi\sqrt{\frac{n^2}{3}-\frac{2}{\pi^2}}\right).\frac{\hbar}{2}}$$

Puisque $n \geq 1$ alors $\Delta X.\Delta P \geq 1{,}136.\hbar/2$ ce qui est compatible avec le principe d'incertitude.

EXERCICE 05 :

$$\psi(x) = \frac{N}{x^2 + a^2}$$

1. Normalisation

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\psi(x).dx = 1 \qquad \Rightarrow \qquad |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(x^2+a^2)^2} dx = 1$$

On utilise le changement de variable suivant

$$x = a.\tan\theta \qquad \Rightarrow \qquad x^2 + a^2 = \frac{a^2}{\cos^2\theta} \qquad \text{et} \qquad dx = \frac{a}{\cos^2\theta} d\theta$$

Ce qui donne

$$|N|^2 \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \left(\frac{\cos^2\theta}{a^2}\right)^2 \frac{a}{\cos^2\theta} d\theta = \frac{|N|^2}{a^3} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \cos^2\theta\,.d\theta = 1$$

$$\frac{|N|^2}{2a^3} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 1 + \cos 2\theta\,.d\theta = \frac{|N|^2}{2a^3} \left[\theta + \frac{1}{2}\sin 2\theta\right]_{-\pi/2}^{+\pi/2} = 1$$

Finalement

$$|N|^2 = 2a^3/\pi \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{|N| = \sqrt{2a^3/\pi}} \qquad \text{et} \qquad N = \left(\sqrt{2a^3/\pi}\right).e^{i\phi}$$

$e^{i\phi}$ est un facteur de phase globale pouvant être omis. Donc

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{x^2 + a^2}}$$

2. Probabilité de présence

$$P(-a \le x \le +a) = \int_{-a}^{+a} \psi^*(x).\psi(x).dx$$

$$P(-a \le x \le +a) = \frac{2a^3}{\pi} \int_{-a}^{+a} \frac{1}{(x^2+a^2)^2} dx$$

En utilisant le même changement de variable, avec $x = \pm a \quad \theta = \pm\pi/4$

$$P(-a \le x \le +a) = \frac{2}{\pi} \int_{-\pi/4}^{+\pi/4} \cos^2\theta\,.d\theta = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/4}^{+\pi/4} 1 + \cos 2\theta\,.d\theta$$

$$P(-a \le x \le +a) = \frac{1}{\pi}\left[\theta + \frac{1}{2}\sin 2\theta\right]_{-\pi/4}^{+\pi/4} = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{2} + 1\right)$$

Donc

$$\boxed{P(-a \le x \le +a) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\right) \approx 0{,}818}$$

3. Valeur moyenne de l'opérateur position X pour l'état $\psi(x)$ normé.

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).X\psi(x).dx$$

$$\langle X \rangle = \frac{2a^3}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x}{(x^2+a^2)^2} dx = \frac{a^3}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} 2x.(x^2+a^2)^{-2}.dx$$

$$\langle X \rangle = \frac{2a^3}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x}{(x^2+a^2)^2} dx = \frac{a^3}{\pi} \left[\frac{(x^2+a^2)^{-1}}{-1}\right]_{-\infty}^{+\infty} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle X \rangle = 0}$$

Valeur moyenne de l'opérateur impulsion P pour l'état $\psi(x)$ normé.

$$\langle P\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).P\psi(x).dx$$

$$\langle P\rangle = \frac{2a^3}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2+a^2}\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x^2+a^2}\right)dx = -\frac{\hbar}{i}\frac{2a^3}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2x}{(x^2+a^2)^3}dx$$

D'où

$$\langle P\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{2a^3}{\pi}\left[\frac{(x^2+a^2)^{-2}}{-2}\right]_{-\infty}^{+\infty} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle P\rangle = 0}$$

4. Valeur moyenne de l'opérateur position X^2 pour l'état $\psi(x)$ normé.

$$\langle X^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).X^2\psi(x).dx$$

$$\langle X^2\rangle = \frac{2a^3}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{x^2}{(x^2+a^2)^2}dx = \frac{a^3}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} 2x.(x^2+a^2)^{-2}.dx$$

On utilise le changement de variable suivant

$$x = a.\tan\theta \qquad \Rightarrow \qquad x^2+a^2 = \frac{a^2}{\cos^2\theta} \qquad \text{et} \qquad dx = \frac{a}{\cos^2\theta}d\theta$$

Donc

$$\langle X^2\rangle = \frac{2a^3}{\pi}\int_{-\pi/2}^{+\pi/2} a^2.\tan^2\theta\,.\left(\frac{\cos^2\theta}{a^2}\right)^2\frac{a}{\cos^2\theta}d\theta = \frac{2a^2}{\pi}\int_{-\pi/2}^{+\pi/2}\tan^2\theta\,.\cos^2\theta\,d\theta$$

$$\langle X^2\rangle = \frac{2a^2}{\pi}\int_{-\pi/2}^{+\pi/2}\sin^2\theta\,.d\theta = \frac{a^2}{\pi}\int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 1-\cos 2\theta\,.d\theta$$

$$\langle X^2\rangle = \frac{a^2}{\pi}\left[\theta - \frac{1}{2}\sin 2\theta\right]_{-\pi/2}^{+\pi/2} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle X^2\rangle = a^2}$$

5. L'écart quadratique moyen

$$\Delta X = \sqrt{\langle X^2\rangle - \langle X\rangle^2} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\Delta X = a}$$

EXERCICE 06 : ***Opérateur création et annihilation***

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \qquad \text{et} \qquad [X,P] = i\hbar$$

1. Nouvelle expression du Hamiltonien.

$$\begin{cases} \hat{X} = \left(\sqrt{m\omega/\hbar}\right) X \\ \hat{P} = \left(1/\sqrt{m\omega\hbar}\right) P \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} X = \left(\sqrt{\hbar/m\omega}\right)\hat{X} \\ P = \left(\sqrt{m\omega\hbar}\right)\hat{P} \end{cases}$$

D'où

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 = \frac{\left(\sqrt{m\omega\hbar}.\hat{P}\right)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hat{X}\right)^2 \qquad \text{et donc} \qquad \boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2\right)}$$

2. Commutateur

$$\left[\hat{X},\hat{P}\right] = \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P - \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$$

$$\left[\hat{X},\hat{P}\right] = \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = \frac{1}{\hbar}(XP - PX) = \frac{1}{\hbar}i\hbar \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\left[\hat{X},\hat{P}\right] = i}$$

3. Puisque X et P sont hermétiques, alors $\hat{X} = \left(\sqrt{m\omega/\hbar}\right)X$ et $\hat{P} = \left(1/\sqrt{m\omega\hbar}\right)P$ sont aussi hermétiques.

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right) \quad \Rightarrow \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X}^+ - i\hat{P}^+\right) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\hat{P}\right)$$

$$\begin{cases} a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right) \\ a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\hat{P}\right) \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+) \\ \hat{P} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(a - a^+) \end{cases}$$

En remplaçant dans H.

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2\right) = H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{1}{2}(a - a^+)^2 + \frac{1}{2}(a + a^+)^2\right)$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{4}\left(-(-aa^+ - a^+a) + (aa^+ + a^+a)\right) \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{H = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a)}$$

4. Puisque $(aa^+)^+ = (a^+)^+a^+ = aa^+$ et que $(a^+a)^+ = a^+(a^+)^+ = a^+a$ alors

$$H^+ = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a)^+ = \frac{\hbar\omega}{2}\left((aa^+)^+ + (a^+a)^+\right) = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a) = H$$

Donc H est hermétique.

5. Calcul du commutateur $[a, a^+]$.

$$[a,a^+] = aa^+ - a^+a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\hat{P}\right) - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} - i\hat{P}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)$$

$$[a,a^+] = \frac{1}{2}\left(\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)\left(\hat{X} - i\hat{P}\right) - \left(\hat{X} - i\hat{P}\right)\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)\right)$$

$$[a,a^+] = \frac{1}{2}\left(\left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i\hat{P}\hat{X} - i\hat{X}\hat{P}\right) - \left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - i\hat{P}\hat{X} + i\hat{X}\hat{P}\right)\right)$$

$$[a,a^+] = i\hat{P}\hat{X} - i\hat{X}\hat{P} = -i\left[\hat{X},\hat{P}\right]$$

Comme $\left[\hat{X},\hat{P}\right] = i$ on trouve : $\boxed{[a,a^+] = 1}$

EXERCICE 07 : ***Atome d'hydrogène***

$$\psi_{1s}(r) = N.\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \qquad ; \qquad E_{1s} = -\frac{mK^2e^4}{2\hbar^2} = -\frac{Ke^2}{2a_0}$$

1. **Normalisation**

$$\int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).d^3r = 1$$

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = 1$$

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |N|^2 e^{-2r/a_0}.r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = 4\pi|N|^2\int_0^{+\infty} r^2.e^{-2r/a_0}.dr = 1$$

On utilise

$$\int_0^{+\infty} x^n.\exp(-a.x)\,.dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Alors

$$4\pi|N|^2\frac{2!}{(2/a_0)^3} = \pi|N|^2.a_0^3 = 1$$

D'où

$$\boxed{|N| = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}}.\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}$$

2. **Valeur moyenne** de l'opérateur énergie cinétique T à l'état normé $\psi_{1s}(r)$.

$$T = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

En coordonnées sphériques le Laplacien Δ s'écrit

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2.\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2.\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Mais comme la fonction $\psi_{1s}(r)$ ne dépend que de r.

$$\Delta\psi_{1s}(r) = \frac{\partial^2\psi_{1s}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi_{1s}(r)}{\partial r} = \left(-\frac{1}{a_0}\right)^2\psi_{1s}(r) + \frac{2}{r}\left(-\frac{1}{a_0}\right)\psi_{1s}(r)$$

Et

$$T\psi_{1s}(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{1s}(r) = -\frac{\hbar^2}{2ma_0}\left(\frac{1}{a_0} - \frac{2}{r}\right)\psi_{1s}(r)$$

Et la valeur moyenne

$$\langle T\rangle = \int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).T\psi_{1s}(r).d^3r$$

Donc

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0}\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\left(\frac{1}{a_0} - \frac{2}{r}\right)\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi$$

Qui peut être écrite sous la forme d'une somme de deux intégrales

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi + \frac{\hbar^2}{ma_0}\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi$$

Avec

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = 1 \qquad \text{(normalisation)}$$

Et

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\int_0^{+\infty} r.e^{-2r/a_0}.dr = \frac{4}{a_0^3}\frac{1!}{(2/a_0)^2} = \frac{1}{a_0}$$

Donc

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}1 + \frac{\hbar^2}{ma_0}\frac{1}{a_0} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}}$$

3. **Energie moyenne** de l'opérateur Hamiltonien H.

$$\langle H\rangle = \int_{\text{espace}}\psi_{1s}^*(r).H\psi_{1s}(r).d^3r \qquad \text{avec} \qquad H\psi_{1s}(r) = E_{1s}.\psi_{1s}(r)$$

Donc

$$\langle H\rangle = E_{1s}\int_{\text{espace}}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).d^3r = E_{1s} \qquad (\psi_{1s}(r) \quad \text{normé})$$

Comme

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = E_{1s}$$

On peut écrire

$$\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} + \langle V\rangle = -\frac{mK^2e^4}{2\hbar^2}$$

Ce qui donne

$$-\frac{mK^2e^4}{2\hbar^2} = -\frac{Ke^2}{2a_0} \qquad \Rightarrow \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{mKe^2} \qquad \text{et} \qquad \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{\hbar^2}{2ma_0}\frac{mKe^2}{\hbar^2} = \frac{Ke^2}{2a_0}$$

Et finalement

$$\boxed{\langle V\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} - \frac{Ke^2}{2a_0} = -\frac{Ke^2}{a_0}}$$

$$V = -\frac{Ke^2}{R} \qquad \Rightarrow \qquad \langle V\rangle = -Ke^2\left\langle\frac{1}{R}\right\rangle = -\frac{Ke^2}{a_0} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\left\langle\frac{1}{R}\right\rangle = \frac{1}{a_0}}$$

4. **Valeur moyenne** de l'opérateur position radiale $\langle R\rangle$.

$$\langle R\rangle = \int_{\text{espace}}\psi_{1s}^*(r).R\psi_{1s}(r).d^3r$$

D'où

$$\langle R\rangle = \int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).r.\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi$$

Et

$$\langle R\rangle = \int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r^3.e^{-2r/a_0}.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\int_0^{+\infty} r^3.e^{-2r/a_0}.dr = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\frac{3!}{(2/a_0)^4}$$

Donc

$$\boxed{\langle R\rangle = \frac{3}{2}a_0}$$

5. Probabilité de présence dans une sphère de rayon $(4a_0)$.

$$P(0 \le r \le 4a_0) = \int_0^{4a_0}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.drd\theta d\varphi$$

D'où

$$P(0 \le r \le 4a_0) = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\int_0^{4a_0} r^2.e^{-2r/a_0}.dr$$

Qui s'intègre par parties

$$\int_0^{4a_0} r^2.e^{-2r/a_0}.dr = \left[r^2\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\right]_0^{4a_0} + a_0\int_0^{4a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr = -8.a_0^3.e^{-8} + a_0\int_0^{4a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr$$

$$\int_0^{4a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr = \left[r\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\right]_0^{4a_0} + \frac{a_0}{2}\int_0^{4a_0} e^{-2r/a_0}.dr = -2.a_0^2.e^{-8} + \frac{a_0}{2}\left[\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\right]_0^{4a_0}$$

Donc

$$\int_0^{4a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr = -2.a_0^2.e^{-8} - \frac{a_0^2}{4}(e^{-8}-1) = -\frac{9}{4}a_0^2.e^{-8} + \frac{a_0^2}{4}$$

$$\int_0^{4a_0} r^2.e^{-2r/a_0}.dr = -8.a_0^3.e^{-8} - \frac{9}{4}a_0^3.e^{-8} + \frac{a_0^3}{4} = -\frac{41}{4}a_0^3.e^{-8} + \frac{a_0^3}{4}$$

En remplaçant

$$P(0 \le r \le 4a_0) = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\left(-\frac{41}{4}a_0^3.e^{-8} + \frac{a_0^3}{4}\right) = 1 - 41.e^{-8}$$

Et

$$\boxed{P(0 \le r \le 4a_0) = 0{,}9862}$$