RÉSUMÉ DU COURS

L'ensemble des fonctions d'ondes $\mathcal{F}$ est un espace vectoriel sur le corps des complexes $\mathbb{C}$.

PRODUIT SCALAIRE (*Le résultat est un nombre complexe*)

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

Propriétés
- $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$
- $\psi(\vec{r})$ et $\varphi(\vec{r})$ sont orthogonales si $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi) = 0$

CARRÉ DE LA NORME (*Le résultat est un réel positif*)

$$(\psi, \psi) = \int_{\text{espace}} \psi^*(\vec{r}).\psi(\vec{r}).d^3r$$

OPÉRATEURS

$$A\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$$

Opérateur linéaire $\quad A(\lambda_1.\psi_1 + \lambda_2.\psi_2) = \lambda_1.A\psi_1 + \lambda_2.A\psi_2$

Somme de deux opérateurs $\quad (A + B)\psi(\vec{r}) = A\psi(\vec{r}) + B\psi(\vec{r})$

Produit de deux opérateurs $\quad AB\psi(\vec{r}) = A\big(B\psi(\vec{r})\big)$ (en général $AB \neq BA$)

Commutateur $\quad [A, B] = AB - BA$

Propriétés du commutateur

- $[A, A] = 0$
- $[A, B] = -[B, A]$
- $[A, (B + C)] = [A, B] + [A, C]$
- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
- $[A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0$

Opérateurs qui commutent $\quad AB = BA$ ou $[A, B] = 0$

« Elément de matrice » d'un opérateur entre deux (nombre complexe)

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

L'adjoint d'un opérateur

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

Propriétés de l'adjoint

- $A = (A^+)^+$
- $(\lambda.A)^+ = \lambda^*.A^+$
- $(A + B)^+ = A^+ + B^+$
- $(AB)^+ = B^+A^+$
- $[A, B]^+ = [B^+, A^+]$

Opérateur hermétique $\quad A = A^+$

Opérateur unitaire $\quad UU^+ = U^+U = \mathbb{I}$

Valeur moyenne d'un opérateur pour un état normé $\left((\psi,\psi)=1\right)$

$$\langle A\rangle=\int_{\text{espace}}\psi^*(\vec r).A\psi(\vec r).d^3r$$

Ecart quadratique moyen d'un opérateur (pour un état normé) $\Delta A=\sqrt{\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2}$

Valeurs propres et états propres d'un opérateur :

Equation aux valeurs propres

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

λ est un nombre complexe.
$\psi(\vec r)$ est dit état propre de l'opérateur A associé à la valeur propre λ.

- S'il existe un seul état $\psi(\vec r)$ associé à la valeur propre λ. On dit que la valeur propre λ est *non dégénérée*.
- S'il existe plusieurs états indépendants $\psi_i(\vec r)$ $(i=1,2,\dots,g)$ associés à la valeur propre λ. On dit que la valeur propre λ est *dégénérée* (g) *fois*.

Propriété :
Les valeurs propres d'un opérateur hermétique sont toujours réelles.
Les vecteurs propres d'un opérateur hermétique correspondants à des valeurs propres différentes sont tous orthogonaux.

BASE ORTHONORMÉE DANS $\mathcal{F}$

	Base discrète $\{u_i(\vec r)\}\in\mathcal{F}$	Base continue $\{w_\alpha(\vec r)\}\notin\mathcal{F}$
Relation d'orthonormalisation	$(u_i,u_j)=\delta_{ij}$	$(w_\alpha,w_{\alpha'})=\delta(\alpha-\alpha')$
Relation de fermeture	$\sum_i u_i(\vec r).u_i^*(\vec r')=\delta(\vec r-\vec r')$	$\int w_\alpha(\vec r).w_\alpha^*(\vec r').d\alpha=\delta(\vec r-\vec r')$
Développement d'une fonction d'onde	$\psi(\vec r)=\sum_i c_i.u_i(\vec r)$	$\psi(\vec r)=\int c(\alpha).w_\alpha(\vec r).d\alpha$
Composantes d'une fonction d'onde	$c_i=(u_i,\psi)=\int u_i^*(\vec r).\psi(\vec r).d^3r$	$c(\alpha)=(w_\alpha,\psi)=\int w_\alpha^*(\vec r).\psi(\vec r).d^3r$
Produit scalaire	$(\varphi,\psi)=\sum_i b_i^*.c_i$	$(\varphi,\psi)=\int b^*(\alpha).c(\alpha).d\alpha$
Carré de la norme	$(\psi,\psi)=\sum_i\lvert c_i\rvert^2$	$(\psi,\psi)=\int\lvert c(\alpha)\rvert^2.d\alpha$

SÉRIE DE TRAVAUX DIRIGÉS N° 03
ESPACE DES FONCTIONS D'ONDES – OPÉRATEURS LINÉAIRES

EXERCICE 01 :

1. Définir un opérateur.
2. Définir un opérateur linéaire.
3. Parmi ces opérateurs, lesquels sont linéaires ?

$$A\psi(x)=\sqrt{\psi(x)} \quad ; \quad B\psi(x)=\int \psi(x).dx \quad ; \quad C\psi(x)=\frac{d\psi(x)}{dx} \quad ; \quad D\psi(x)=\ln\big(\psi(x)\big) \quad ; \quad E\psi(x)=\psi^*(x)$$

4. Montrer que la somme ainsi que le produit de deux opérateurs linéaires sont aussi des opérateurs linéaires.
5. Montrer les propriétés suivantes (A, B et C sont des opérateurs linéaires) :
   - $[A,B]=-[B,A]$
   - $[A,(B+C)]=[A,B]+[A,C]$
   - $[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]$
   - $\big[A,[B,C]\big]+\big[C,[A,B]\big]+\big[B,[C,A]\big]=0$

EXERCICE 02 :

1. Donner l'équation qui définit l'adjoint d'un opérateur dans l'espace des fonctions d'ondes.
2. Déterminer les opérateurs adjoints des opérateurs suivants : $X=x$; $D_x=\frac{d}{dx}$; $P_x=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$
3. Quand est-ce qu'on dit qu'un opérateur est hermétique ?
4. Parmi les opérateurs précédents, lesquels sont hermétiques ?
5. Si A et B sont des opérateurs linéaires quelconques, montrer que :
   - $A=(A^+)^+$
   - $(\lambda.A)^+=\lambda^*.A^+$
   - $(A+B)^+=A^++B^+$
   - $(AB)^+=B^+A^+$
   - $[A,B]^+=[B^+,A^+]$
   - $A+A^+$; $i(A-A^+)$; AA^+ sont des opérateurs hermétiques.

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

EXERCICE 03 :

Soit dans un problème à une dimension, une particule dont la fonction d'onde est donnée par :

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

Où a et p_0 sont des constantes réelles, et N un coefficient de normalisation.

1. Déterminer N pour que $\psi(x)$ soit normée.
2. On mesure la position de la particule ; quelle est la probabilité pour que le résultat soit compris entre $-a/\sqrt{3}$ et $+a/\sqrt{3}$?
3. Calculer la valeur moyenne de l'impulsion d'une particule ayant $\psi(x)$ comme fonction d'onde.

<u>EXERCICE 04</u> : *Boite de potentiel à une dimension*

Les états stationnaires d'une particule de masse m enfermée dans une boite de potentiel à une dimension de longueur L sont décrit per les fonctions d'ondes suivantes :

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

1. Déterminer, en utilisant les fonctions $\psi_n(x)$, les énergies E_n des états stationnaires de la boite rectiligne.
2. Montrer que les états $\psi_n(x)$ sont orthonormés.
3. Calculer les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion de la particule, pour un état stationnaire de nombre quantique n quelconque.
4. Calculer les valeurs moyennes des observables X^2 et P^2 dans l'état stationnaire $\psi_n(x)$.
5. En déduire les écarts quadratiques moyens ΔX et ΔP, et vérifier le principe d'incertitude de Heisenberg.

Données :

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

<u>EXERCICE 05</u> (*) :

Soit dans un problème à une dimension, une particule dont la fonction d'onde est donnée par :

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

Où a est une constante réelle, et N une constante de normalisation.

1. Déterminer N pour que $\psi(x)$ soit normée.
2. On mesure la position de la particule ; quelle est la probabilité pour que le résultat soit compris entre $-a$ et $+a$?
3. Calculer les valeurs moyennes de la position X et de l'impulsion P d'une particule dans l'état $\psi(x)$.
4. Calculer la valeur moyenne $\langle X^2 \rangle$ d'une particule dans l'état $\psi(x)$.
5. En déduire l'écart quadratique moyen ΔX.

On peut utiliser le changement de variable $x = a.\tan(\theta)$

On donne : $2.\sin^2(\theta) = 1 - \cos(2\theta)$ et $2.\cos^2(\theta) = 1 + \cos(2\theta)$

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

Soit un système physique dont l'Hamiltonien à une dimension est donné par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

Tel que X est l'opérateur position et P l'opérateur quantité de mouvement suivant l'axe (OX), réalisant la règle de commutation canonique $[X, P] = i\hbar$. (X et P sont hermétiques).
m est la masse de la particule et ω est une constante positive.

1. En posant $\hat{X} = \left(\sqrt{m\omega/\hbar}\right) X$ et $\hat{P} = \left(1/\sqrt{m\omega\hbar}\right) P$. Montrer que H peut s'écrire sous la forme :
$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{X}^2\right)$$
2. Calculer le commutateur $[\hat{X}, \hat{P}]$.
3. On pose maintenant $a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)$. Trouver H en fonction de a et de a^+.
4. En déduire que H est hermétique.
5. Calculer le commutateur $[a, a^+]$.

EXERCICE 07 : ***Atome d'hydrogène***

La fonction d'onde correspondant à l'état fondamental de l'électron dans l'atome d'hydrogène ψ_{1s}, et l'énergie E_{1s} correspondant à cet état sont données par :

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

1. Déterminer la constante de normalisation N.
2. Calculer l'énergie cinétique moyenne $\langle T\rangle$ de l'état fondamental.
3. En déduire, en utilisant la relation $H = T + V$, la valeur moyenne de l'énergie potentielle $\langle V\rangle$ et la valeur moyenne de l'inverse de la distance électron–noyau $\langle 1/R\rangle$.
4. Calculer la valeur moyenne de l'opérateur position radiale $\langle R\rangle$.
5. En utilisant cette fonction d'onde, calculer la probabilité de présence dans une sphère de rayon $(4a_0)$. Le résultat est-il physiquement acceptable ?

On donne : Le Laplacien en coordonnées sphériques

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

Et l'intégrale

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