Corrigé type de l'examen de rattrapage du module mécanique quantique 2 (3ème année P.F et PM 2024)

Exercice 1 :

(a)

$$L^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta,\varphi) \quad 0{,}5$$

$$L^2\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2(\theta)e^{2i\varphi}\right) = \hbar^2 l(l+1)\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2(\theta)e^{2i\varphi}\right)\cdots(1)$$

- Calcule le premier terme de l'équation (1) :

$$L^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = -\hbar^2\left[\frac{1}{sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2(\theta)e^{2i\varphi}\right)$$

$$= -\hbar^2\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}[(4cos(\theta)^2 - 2sin(\theta)^2) - 4]$$

$$= -\hbar^2\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}[(4(1-sin(\theta)^2) - 2sin(\theta)^2) - 4] = 6\hbar^2\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right) \quad 1$$

En substituant ce résultat dans l'équation (1)

$$6\hbar^2\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right) = \hbar^2 l(l+1)\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2(\theta)e^{2i\varphi}\right) \Rightarrow 6 = l(l+1) \Rightarrow l = 2 \quad 0{,}5$$

$$L_Z\psi(r,\theta,\varphi) = \hbar m\psi(r,\theta,\varphi) \Rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi) = \hbar m\psi(r,\theta,\varphi) \quad 0{,}5$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right) = \hbar m\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right)$$

$$\frac{\hbar}{i}2i\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right) = \hbar m\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right) \Rightarrow m = 2 \quad 0{,}5$$

0,5

(b)

$$L_-\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\, Y_l^m(\theta,\varphi) \quad 0{,}5$$

$$L_-\, Y_2^2(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{2(2+1) - 2(2-1)}\, Y_2^1(\theta,\varphi)$$

$$L_-\, Y_2^2(\theta,\varphi) = 2\hbar\, Y_2^1(\theta,\varphi) \quad 0{,}5$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = \frac{1}{2\hbar}L_-\, Y_2^2(\theta,\varphi)$$

Où :

$$L_- = -\hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - icot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \quad 0{,}5$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = -\frac{1}{2\hbar}\hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - icot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right)$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - icot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(e^{2i\varphi}sin(\theta)^2\right)$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{-i\varphi}\left(e^{2i\varphi}2sin(\theta)cos(\theta) + 2e^{2i\varphi}cot(\theta)sin(\theta)^2\right)$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}e^{i\varphi}sin(\theta)cos(\theta) \quad 1$$

Exercice 2:

1. la partie radiale $R_{20}(r)$, de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène en utilisant l'expression $(III.1.37)$: pour $n = 2\ et\ l = 0 \Rightarrow k_{max} = 2 - 0 - 1 = 1$ 0,5

$$c_k = \frac{2(k+l)/n - 2}{k^2 + k(2l+1)}c_{k-1} \Rightarrow c_1 = \frac{2(1+0)/2 - 2}{1^2 + 1(2\times 0 + 1)}c_0 = -\frac{1}{2}c_0 \quad 0,5$$

$$v(x) = x^{l+1}\sum_{k=0}^{k_{max}=1} c_k x^k = x(c_0 + c_1 x) = x\left(c_0 - \frac{1}{2}c_0 x\right) = xc_0\left(1 - \frac{x}{2}\right) \quad 0,5$$

$$u(x) = v(x)e^{-\alpha x} \Rightarrow u(x) = c_0\left(1 - \frac{x}{2}\right)xe^{-\alpha x} \quad 0,5$$

$$x = r/a_0\ et\ \alpha = 1/n \Rightarrow u(r) = c_0\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad 0,5$$

$$R_{20}(r) = \frac{u(r)}{r} = \frac{c_0}{a_0}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad 0,5$$

La condition de normalisation :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^{+\infty} r^2\psi^*(r)\psi(r)dr = 1$$

$$\frac{|C_0|^2}{a_0^2}\int_0^{+\infty} r^2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}}dr = 1 \Rightarrow \frac{|C_0|^2}{a_0^2}2a_0^3 = 1 \Rightarrow C_0 = \sqrt{\frac{1}{2a_0}}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad 0,5$$

2. la densité probabilité radiale $P(r)$.

$$P(r) = r^2\psi^*(r)\psi(r) = \frac{1}{2a_0^3}r^2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \quad 1$$

3. les rayons des sphères les plus probables :

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0 \Rightarrow \frac{1}{2a_0^3}\left[\left(2r\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 - \frac{r^2}{a_0}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\right)e^{-\frac{r}{a_0}} - \frac{r^2}{a_0}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}}\right] = 0$$

0,5

$$\frac{1}{2a_0^3}\left[r\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{a_0}}\left(2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) - \frac{r}{a_0} - \frac{r}{a_0}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\right)\right] = 0 \Rightarrow 4 - \frac{r}{a_0} = 0 \Rightarrow r$$

$$\frac{1}{2a_0^3}\left[r\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{a_0}}\left(\frac{r^2}{2a_0^2} - \frac{3r}{a_0} + 2\right)\right] = 0$$

$$r = 0, r = 2a_0, r = (3-\sqrt{5}), r = (3+\sqrt{5})$$

0,25 0,25 0,25 0,25

Exercice 3

(a) les valeurs propres exactes de H.

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & C \\ 0 & -1 & C \\ C & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de H sont les racines de l'équation $det[H - \lambda I] = 0$,

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & C \\ 0 & -1-\lambda & C \\ C & 0 & 2-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (1-\lambda)(-1-\lambda)(2-\lambda) - C^2(-1-\lambda) = 0$$

$$(-1-\lambda)[(1-\lambda)(2-\lambda) - C^2] = 0$$

donc:

$$\lambda_1 = \frac{3-\sqrt{1+4C^2}}{2}, \quad \lambda_2 = -1, \quad \lambda_3 = \frac{3+\sqrt{1+4C^2}}{2}$$

0,5 0,5 0,5

(b) les valeurs propres en utilisant la perturbation du second ordre,

La correction de second ordre de l'énergie peut s'écrire

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 = E_n^0 + \langle\varphi_n^0|W|\varphi_n^0\rangle + \sum_{k\neq n} \frac{|\langle\varphi_k^0|W|\varphi_n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$ 0,25

où les vecteurs $|\varphi_n^0\rangle$ sont les vecteurs propres de H_0 qui sont:

$$|\varphi_1^0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_2^0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_3^0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

0,25 0,25 0,25

correspondant aux valeurs propres de H_0 $E_1^0 = 1$, $E_2^0 = -1$ et $E_3^0 = 2$ respectivement.

la correction de premier ordre

$$E_1^1 = \langle\varphi_1^0|W|\varphi_1^0\rangle = (1 \quad 0 \quad 0)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$ 0,25

$$E_2^1 = \langle\varphi_2^0|W|\varphi_2^0\rangle = (0 \quad 1 \quad 0)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$ 0,25

$$E_3^1 = \langle\varphi_3^0|W|\varphi_3^0\rangle = (0 \quad 0 \quad 1)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$ 0,25

la correction de deuxième ordre

$$E_1^2 = \sum_{k\neq 1} \frac{|\langle\varphi_k^0|W|\varphi_1^0\rangle|^2}{E_1^0 - E_k^0} = \frac{|\langle\varphi_2^0|W|\varphi_1^0\rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0} + \frac{|\langle\varphi_3^0|W|\varphi_1^0\rangle|^2}{E_1^0 - E_3^0}$$ 0,25

$$\langle\varphi_2^0|W|\varphi_1^0\rangle = (0 \quad 1 \quad 0)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$ 0,25

$$\langle\varphi_3^0|W|\varphi_1^0\rangle = (0 \quad 0 \quad 1)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = C$$ 0,25

$$E_1^2 = \frac{0}{1-(-1)} + \frac{C^2}{1-2} = -C^2$$ 0,25

$$E_1 = E_1^0 + E_1^1 + E_1^2 = 1 + 0 + (-C^2) = 1 - C^2$$ 0,25

$$E_2^2 = \sum_{k\neq 2} \frac{|\langle\varphi_k^0|W|\varphi_2^0\rangle|^2}{E_2^0 - E_k^0} = \frac{|\langle\varphi_1^0|W|\varphi_2^0\rangle|^2}{E_2^0 - E_1^0} + \frac{|\langle\varphi_3^0|W|\varphi_2^0\rangle|^2}{E_2^0 - E_3^0}$$ 0,25

$$\langle\varphi_1^0|W|\varphi_2^0\rangle = (1 \quad 0 \quad 0)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$ 0,25

$$\langle\varphi_3^0|W|\varphi_2^0\rangle = (0 \quad 0 \quad 1)\begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$ 0,25

$$E_2^2 = \frac{0}{-1-1} + \frac{0}{-1-2} = 0 \qquad 0{,}25$$

$$E_2 = E_2^0 + E_2^1 + E_2^2 = -1 + 0 + 0 = -1 \qquad 0{,}25$$

$$E_3^2 = \sum_{k\neq 3} \frac{\left|\langle \varphi_k^0 | W | \varphi_3^0 \rangle\right|^2}{E_3^0 - E_k^0} = \frac{\left|\langle \varphi_1^0 | W | \varphi_3^0 \rangle\right|^2}{E_3^0 - E_1^0} + \frac{\left|\langle \varphi_2^0 | W | \varphi_3^0 \rangle\right|^2}{E_3^0 - E_2^0} \qquad 0{,}5$$

$$\langle \varphi_1^0 | W | \varphi_3^0 \rangle = (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = C \qquad 0{,}25$$

$$\langle \varphi_2^0 | W | \varphi_3^0 \rangle = (0 \quad 1 \quad 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & C \\ 0 & 0 & C \\ C & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = C \qquad 0{,}25$$

$$E_3^2 = \frac{C}{2-1} + \frac{C}{2-(-1)} = \frac{4}{3}C \qquad 0{,}25$$

$$E_3 = E_3^0 + E_3^1 + E_3^2 = 2 + 0 + \frac{4}{3}C = 2 + \frac{4}{3}C \qquad 0{,}25$$

(c) Comparaison entre les résultats des parties (a) et B).

Le valeurs exactes et leurs développement limite	Le valeurs approchées
$E_1 = \lambda_1 = \frac{3-\sqrt{1+4C^2}}{2} \approx 1 - C^2$ 0,5	$E_1 \approx 1 - C^2$
$E_2 = \lambda_2 = -1$	$E_2 = -1$
$E_3 = \lambda_3 = \frac{3+\sqrt{1+4C^2}}{2} \approx 2 + C^2$ 0,5	$E_3 \approx 2 + \frac{4}{3}C$

Où nous avons développons $\frac{3\mp\sqrt{1+4C^2}}{2}$ dans une série binomiale limite:

$$\frac{3 \mp \sqrt{1+4C^2}}{2} = \frac{3 \mp (1+2C^2)}{2} + \cdots \qquad \text{où} \quad C^2 \ll 1$$