Rappels (non exhaustifs) du cours pour le TD2

* L'état d'une particule quantique est entièrement déterminé par sa fonction d'onde $\varphi(\vec{r},t)$.

$\varphi(\vec{r},t)$ est une fonction à valeurs complexes.

Son module au carré représente la densité de probabilité de présence de la particule :

$|\varphi(\vec{r},t)|^2 d^3\vec{r} = \varphi^*(\vec{r},t)\varphi(\vec{r},t)\, d^3\vec{r}$ correspond à la probabilité de trouver la particule dans un petit volume $d^3\vec{r}$ autour de $\vec{r}$.

Normalisation de la fonction d'onde :

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\vec{r},t)|^2 d^3\vec{r} = 1$$

i.e. la probabilité de trouver la particule dans tout l'espace vaut 1

* Les grandeurs physiques sont représentées par des opérateurs linéaires (hermitiens) agissant sur la fonction d'onde.

Les grandeurs physiques dépendant exclusivement de la position sont représentées par des opérateurs multipliant la fonction d'onde

Exemples : - position $x \rightarrow$ opérateur $\hat{x}$ t.q. $\hat{x}\psi(\vec{r},t) = x\,\psi(\vec{r},t)$

- Energie potentielle $V(\vec{r},t) \longrightarrow$ opérateur $\hat{V}(\hat{r},t)$ t.q. $\hat{V}(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = V(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)$

Les grandeurs dépendant exclusivement de l'impulsion sont représentées par des opérateurs dérivant la fonction d'onde.

Exemples : - impulsion $\vec{p} \rightarrow$ opérateur $\hat{p}$ t.q. $\hat{p}\,\psi(\vec{r},t) = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)$

- énergie cinétique $T = \dfrac{p^2}{2m} \rightarrow$ opérateur $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$

t.q. $\hat{T}\psi(\vec{r},t) = \dfrac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)$

L'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ représente l'énergie totale de la particule.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)$$

* L'évolution de la fonction d'onde est régie par l'équation de Schrödinger :

$$\boxed{\begin{gathered} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\vec{r},t) = \hat{H}\varphi(\vec{r},t) \\ i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\varphi(\vec{r},t) \end{gathered}}$$

L'équation de Schrödinger est <u>linéaire</u>.

Si le potentiel $\hat{V}(\vec{r})$ ne dépend pas du temps, une méthode très fréquente pour résoudre l'équation de Schrödinger est de chercher les <u>fonctions propres du Hamiltonien</u> :

("Equation de Schrödinger indépendante du temps")

$$\hat{H}\varphi_E(\vec{r},t) = \underbrace{E}_{\substack{\text{valeur prore} \\ \text{(ou énergie propre)} \\ \text{de } \hat{H}}} \underbrace{\varphi_E(\vec{r},t)}_{\text{fonction propre de } \hat{H}}$$

Si à $t=0$ $\varphi(\vec{r},0) = \varphi_E(\vec{r})$ alors $\varphi(\vec{r},t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\varphi_E(\vec{r})$

On note que $|\varphi(\vec{r},t)|^2 = |\varphi_E(\vec{r})|^2$ est constant.

Les états propres du Hamiltonien sont donc appelés

<u>états stationnaires</u>

L'ensemble des fonctions propres de $\hat{H}$ forme une base sur laquelle toutes les fonctions d'ondes peuvent se décomposer.

i.e. il existe toujours des coefficients $c_E \in \mathbb{C}$ t.q.

$$\varphi(\vec{r}, t=0) = \sum_E c_E \varphi_E(\vec{r})$$

Et alors $$\varphi(\vec{r}, t) = \sum_E c_E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \varphi_E(\vec{r})$$