

résumé de mécanique quantique ch1-2 - Corentin qiutianyi

CH1 ondes et particules

P2 Énergie du photon : $E = hf = \hbar\omega$.

Spectre atomique : $hf = \Delta E$.

P10 Relation d'Einstein-Planck : $E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}$ ($E = pc$).

Relation de de Broglie : $E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}, \lambda = \frac{\hbar}{p}$.

Méthode : estimation $\lambda = h/p = h/mv$.

P16 $\psi(M, t)$ amplitude de probabilité. dim : $L^{-3/2}$ (espace).
 $\rho(M, t) = |\psi|^2 = \psi^*\psi$ densité de probabilité. dim : L^{-3} .

Unidimensionnelle : $dP_{x,t,dx} = \rho(x, t)dx = |\psi(x, t)|^2dx$.

3 dimensions : $dP_{M,t,dV_M} = \rho(M, t)dV_M = |\psi(M, t)|^2dV_M$.

Proba de trouver ... dans V : $P_{t,V} = \int_V \rho(M, t)dV_M$.

P17 Normalisation : $\int_E |\psi|^2 dV_M = 1$. Unidim : $E = \mathbb{R}$.
Densité de probabilité invariante par multiplication par $e^{i\alpha}$.

P18 Notation de Dirac : $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* \psi_2 dV_M$.

Hermitien sesquilinear à gauche. $||\psi|| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$.

P19 Ortho : $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$. Normé : $\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1$.

P20 Position moyenne : $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x, t)dx$ (1D).

$\langle O\vec{M} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} O\vec{M}\rho(M, t)dV_M$ (3D).

$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.

En général $\langle f(M, t) \rangle = \int_E \psi^*(M, t)f(M, t)\psi(M, t)dx$

P21 Distribution de Gauss 1D : $f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$.

Normalisée. $\langle x \rangle = \mu$. $\Delta x = \sigma$.

Fonction d'onde : $\psi_L(x) = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4L^2}}$.

$|\psi_L|^2$ distribution de Gauss 1D. $\langle x \rangle = x_0$. $\Delta x = L$.

P22 Distribution de Dirac : $\delta(x - x_0) = \lim_{L \rightarrow 0} \psi_L^2(x)$.

$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk$.

Méthode échantillonnage : $f(x_0) = \int_{\mathbb{R}} f(x)\delta(x - x_0)dx$.

Positions et incertitudes $\langle x \rangle = x_0$. $\Delta x = 0$

P23 Onde de de Broglie : OPPM.

1D : $\psi_P(x, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right]$. $E = \frac{p^2}{2m}$.

3D : remplacer x par le vecteur position.

P24 OPPM normalisable si $x \in [-\frac{L_{max}}{2}, +\frac{L_{max}}{2}]$.

$\psi_P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L_{max}}} \exp \left[\frac{i}{\hbar}(px - Et) \right]$.

$L_{max} \gg \lambda_{\text{caractéristique}}$.

Grandeur physiques ne dépendent pas de L_{max} .

P27 Représentation impulsion.

$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p)e^{ipx/\hbar}dp$ (TF).

$g(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ipx/\hbar}dx$.

P32 Parseval-Plancherel : $f_1(x) \leftrightarrow g_1(p); f_2(x) \leftrightarrow g_2(p)$.

$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1^* f_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g_1^*(p) g_2(p) dp$.

P34 $f(x) \rightarrow \psi(x, t)$ $g(p) \rightarrow \phi(p, t)$.

Représentation en position/impulsion.

P36-37 Dirac : $\psi(x) = \delta(x - x_0)$.

$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \cdot \begin{cases} \langle x \rangle = x_0 \\ \Delta x = 0, \Delta p \rightarrow +\infty \end{cases}$

Broglie : $\psi(x) = Ae^{ip_0x/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$.

$\phi(p) \propto \delta(p - p_0) \cdot \begin{cases} \Delta x \rightarrow +\infty \\ \Delta p = 0, \langle p \rangle = p_0 \end{cases}$.

Gauss : $\langle p \rangle = 0$. $\Delta p = \frac{\hbar}{2L}$. $\langle x \rangle = x_0$. $\Delta x = L$. $\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}}$.

P38 Mesure d'impulsion $dP_{x,t,dx} = |\psi(x, t)|^2 dx$.

$dP_{p,t,dp} = |\phi(p, t)|^2 dp$.

P39-40 $g(p) \Rightarrow \langle g \rangle = \int \phi^* g \phi dp$ $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$.

$\langle p \rangle = \int \phi^* p \phi dp = \int \psi^* \hat{p} \psi dx$ avec $\boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$ (1D).

En dimension 3 les dérivées deviennent le gradient.

P43 : $\psi_{p_0}(x, t) = A \exp \frac{i}{\hbar}(p_0 x - Et)$. $\hat{p}\psi_{p_0} = p_0 \psi_{p_0}$.

État propre de \hat{p} , valeur propre p_0 .

P45 : Inversement : $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$.

P47 : Opérateurs utiles. ① Position $x \rightarrow \hat{x}$.

② Potentielle : $V(x, t) \rightarrow \hat{V}(x, t)$. ③ $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

④ $E_{\text{cinétique}} : E_c = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

⑤ $E_{\text{mécanique}} : \boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x, t)}$ Hamiltonien.

P48-50 Heisenberg : $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (Gaussienne \rightarrow égalité).

ODG : $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$.

P51-52 $\lambda \ll L$: classique | $\lambda \sim L$: quantique.

P56 : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$.

ΔE : largeur spectrale d'un niveau d'énergie. Δt : durée de vie.
La durée de vie est infinie dans un état stationnaire.

CH2 mécanique ondulatoire

P3-4 : ES : $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$ (variables M, t).

$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$ (variable x, t).

P5 : Broglie : $V = 0$. ψ_P satisfait ES. $E = \frac{p^2}{2m}$.

P7-8 : $V(M, t) \rightarrow V(M)$. $\psi(M, t) = \tilde{\psi}(M)\chi(t)$.

$\psi(M, t) = \tilde{\psi}(M) \exp(-iEt/\hbar)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{\psi} \frac{1}{\tilde{\psi}} + V = E = i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \chi(t)$$

$$\hat{H}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi} \quad \chi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

P9 ES indépendance du temps. $\hat{H}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi}$.

États propres \rightarrow états stationnaires $\tilde{\psi}_n$.

Méthode : $\psi = \sum C_n \tilde{\psi}_n(M) e^{-iE_n t/\hbar}$.

Étape 1 : $\hat{H}\tilde{\psi}_n = E_n \tilde{\psi}_n$.

Étape 2 : $\psi(M, t=0) = \sum C_n \tilde{\psi}_n(M)$ (Conditions initiales).

Étape 3 : $\psi(M, t) = \sum C_n \tilde{\psi}_n(M) e^{-iE_n t/\hbar}$.

P10 État stationnaire : valeur moyenne de toute grandeur physique indépendante du temps.

P11 Courant de proba : $\vec{J} = \text{Re} \left(\frac{1}{m} \psi^* \hat{p} \psi \right)$.

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \vec{\text{grad}}\psi - \psi \vec{\text{grad}}\psi^* \right).$$

P15-16 Particule libre de potentiel nul

$$\textcircled{1} \quad \hat{H}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi} \rightarrow \psi_p = \exp(ipx/\hbar). \quad E = p^2/2m.$$

$$\textcircled{2} \quad \psi(x, 0) = \int \frac{g(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi_p dp. \quad g(p) \text{ l'amplitude de proba de } p.$$

$$\psi(M, t=0) = \sum_n C_n \tilde{\psi}_n(M) \text{ avec } C_n \leftrightarrow \frac{g(p)}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\psi(M, t) = \sum_n C_n \tilde{\psi}_n(M) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\textcircled{3} \quad \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int g(p) \exp(ipx/\hbar) \exp(-iEt/\hbar) dp.$$

P19-20 Barrière de potentiel. Discontinuité finie/infinie.

On applique $\int_{-\epsilon}^{\epsilon}$ à l'éq $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\tilde{\psi}}{dx^2} + V(x)\tilde{\psi} = E\tilde{\psi}$.

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2\tilde{\psi}}{dx^2} dx = [\tilde{\psi}']_{-\epsilon}^{\epsilon} = -\frac{2\hbar^2}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} (E - V(x))\tilde{\psi} dx.$$

$V(x)$ finie : $\tilde{\psi}'$ continue. Discontinue si $V(x)$ infinie.

P22-25 Marche de potentiel $0 < E < V_0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi = 0.$$

$E > V \rightarrow e^{\pm ikx}$ oscillation. $E < V \rightarrow e^{\pm qx}$ exponentielle.

- $x < 0$. $V = 0$, $E > V$. $\psi = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$. $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.
- $x > 0$. $V(x) = V_0$, $E < V_0$. $\psi(x) = \gamma e^{-qx}$. $q = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}(V_0 - E)$. (onde évanescente).

Continuité en $x = 0$. ψ continue : $\alpha + \beta = \gamma$.

ψ' continue : $ik(\alpha - \beta) = -q\gamma$.

Courant : $\vec{J}_{\text{incident}} = |\alpha|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x$.

$\vec{J}_{\text{réfléchi}} = -|\beta|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x$. $R = |\frac{\beta}{\alpha}|^2 = 1$.

$\vec{J}_{\text{évanescante}} = 0$. Effet tunnel $L \approx \frac{1}{2q}$.

P26-27 Marche, $E > V_0$.

Même sauf : $x > 0$. $\psi(x) = \gamma e^{ik'x}$. $k' = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}(E - V_0)$.

Continuité : $\alpha + \beta = \gamma$ et $ik(\alpha - \beta) = ik'\gamma$.

$$\vec{J}_i = |\alpha|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x \quad R = |\frac{\beta}{\alpha}|^2 = (\frac{k-k'}{k+k'})^2. \quad T = |\frac{\gamma}{\alpha}|^2 \cdot \frac{k'}{k}.$$

$$\vec{J}_r = -|\beta|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x.$$

$$\vec{J}_t = |\gamma|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x. \quad R + T = 1.$$

P28 Marche $E < 0 \Rightarrow \alpha = \gamma = 0$ par continuité.

P29-30 Barrière $0 < E < V_0$.

• $x < 0$: $\psi = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$. $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ondulatoire.

• $0 < x < a$: $\psi = \gamma e^{qx} + \delta e^{-qx}$. $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ exponentielle.

• $x > a$: $\psi = \varepsilon e^{ikx} \rightarrow$ ondulatoire.

ψ et ψ' continue en $0, a \Rightarrow 4$ éqs.

P33 Barrière $E > V_0$.

Même sauf $0 < x < a$: $\psi = \gamma e^{-ik'x} + \delta e^{ik'x}$. $k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$.

P35-38 Puits infinis $\psi(x) = 0$ si $x \in]-\infty, 0] \cup [a, +\infty[$.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E)}{\hbar^2} \psi = 0$$

• $0 < x < a$: $\tilde{\psi}(x) = C_1 \cos kx + iC_2 \sin kx$. $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

$$\text{CL} : C_1 = 0. \quad C_2 \sin ka = 0 \Rightarrow ka = n\pi. \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad n \in \mathbb{N}^*.$$

Normalisation : $\tilde{\psi}_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. Énergie quantifiée.

P39-42 États stationnaires \rightarrow base orthonormée, complète.

$[f(x) = \sum C_n \tilde{\psi}_n(x) \quad \langle \psi_n | f \rangle = C_n]$ projection].

Mesurer l'énergie : $E = \text{une des } E_n$.

La proba associée à E_n est $P(E_n) = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 = |C_n|^2$.

$$\langle E \rangle = \sum E_n P(E_n) = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle.$$

P48-55 Puits fini. $E > 0 \rightarrow$ état de diffusion.

$-V_0 < E < 0$ état lié.

États liés $-V_0 < E < 0$. Ondulatoire dedans et décroissance exponentielle à l'extérieur.

• $x > a/2$: $\psi(x) = A_1 e^{-qx}$. $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)}$.

• $-a/2 < x < a/2$: $\psi(x) = A_2 \cos kx + A'_2 \sin kx$. $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$.

• $x < -a/2$: $\psi(x) = A_3 e^{qx}$.

Continuité : 4 équations.

Spectre : nombre fini d'énergies discrètes (énergie négative).

Les états de diffusion forment un continuum (énergie positive).

Méthodes vues

- Estimation de l'ODG par Heisenberg en **TD1 Ex1 Q1**
- Égalité de la relation de Heisenberg atteinte pour une forme Gaussienne **TD1 Ex2 Q1**
- Calcul par normalisation et transformations de Fourier.
- Séparation des composants spatiaux et temporels dans l'ES, sous condition que V ne dépend que de x . Voir **CH2 P7-8**
- Savoir écrire les formes de k et k'
- Savoir associer un terme comme e^{ikx} à une onde progressive vers la droite ($+x$) et e^{-ikx} vers la gauche ($-x$).
- Calcul du courant de proba **CH2 P11**
- Étude dans un potentiel cste par morceaux en 2 étapes :
 1. résolution explicite de l'équation différentielle qui donne les solutions ondulatoires/exponentielles
 2. déterminer les constantes en s'inspirant des conditions de continuité ou par la condition de normalisation.
- Comprendre le sens physique de la continuité de ψ (la probabilité ne saute pas). Distinguer les deux cas : saut de proba finie/infinie.
- Étude dans un puits : voir **CH2 P35-38** et **CH2 P48-55**
- Savoir que $\langle x \rangle = 0$ pour un état stationnaire symétrique. Comprendre le lien entre parité de la fonction et intégrale nulle.