

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

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 : $dP_{x,t,dx} = \rho(x, t)dx = |\psi(x, t)|^2 dx$.
3 dimensions : $dP_{M,t,dV_M} = \rho(M, t)dV_M = |\psi(M, t)|^2 dV_M$.
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 sesquilinéaire 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 $x \in \left[-\frac{L_{max}}{2}, +\frac{L_{max}}{2}\right]$.
 $\psi_P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L_{max}}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right]$.
 $L_{max} \gg \lambda_{caractéristique}$.
Grandeurs 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 : $\psi(x) = A e^{ip_0 x/\hbar} e^{-iEt/\hbar}$.

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

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

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 $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (1D).
En dimension 3 les dérivées deviennent le gradient.

P43 : $\psi_{p_0}(x, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_0 x - Et)\right]$. $\hat{p} \psi_{p_0} = p_0 \psi_{p_0}$.
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 $E_{cinétique}$: $E_c = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$.
⑤ $E_{mécanique}$: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x, t)$ 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 : $V(M, t) \rightarrow V(M)$. $\psi(M, t) = \tilde{\psi}(M) \chi(t)$.
 $\psi(M, t) = \tilde{\psi}(M) \exp(-iEt/\hbar)$.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \tilde{\psi} \frac{1}{\tilde{\psi}} + V = E = i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) \\ \hat{H} \tilde{\psi} = E \tilde{\psi} \quad \chi(t) = e^{-iEt/\hbar} \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$E > V \rightarrow e^{\pm i k x}$ oscillation. $E < V \rightarrow e^{\pm q x}$ exponentielle.

• $x < 0$. $V = 0, E > V$. $\psi = \alpha e^{i k x} + \beta e^{-i k x}$. $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

• $x > 0$. $V(x) = V_0, E < V_0$. $\psi(x) = \gamma e^{-q x}$. $q = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} (V_0 - E)$.
(onde évanescence).

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

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

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

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

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

P26-27 Marche, $E > V_0$.

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

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

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

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

$\vec{J}_t = |\gamma|^2 \frac{\hbar k'}{m} \vec{e}_x$. $R + T = 1$.

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

P29-30 Barrière $0 < E < V_0$.

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

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

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

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

P33 Barrière $E > V_0$.

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

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

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

• $0 < x < a$: $\tilde{\psi}(x) = C_1 \cos kx + i C_2 \sin kx$. $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

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

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.

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

Mesurer l'énergie : $E =$ 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.

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

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

• $x < -a/2$: $\psi(x) = A_3 e^{q x}$.

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**
- 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.
- Étude dans un puits : voir **CH2 P35-38** et **CH2 P48-55**