

# résumé de mécanique quantique ch1-2 - Corentin qiutianyi

## CH1 ondes et particules

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

Spectre atomique :  $hf = \Delta E$ .  $h = 6.63 \times 10^{-34} Js$

**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).

$\langle O\vec{M} \rangle = \int O\vec{M}\rho(M, t)dV_M$  (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 gaussienne :  $\psi_L(x) = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4L^2}}$ .

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

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

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

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 avec  $p$  et  $\lambda$  uniques.

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, transformations de Fourier

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

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

**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** :  $\psi_{p_0}(x, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_0x - Et)\right]$ .  $\hat{p}\psi_{p_0} = p_0\psi_{p_0}$ .

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

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

$\Delta E$  : largeur spectrale d'un niveau d'énergie.  $\Delta t$  : 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 :  $V = 0$ .  $\psi_P$  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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$E > V \rightarrow e^{\pm ikx}$  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  $x = 0$ .  $\psi$  continue :  $\alpha + \beta = \gamma$ .

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

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

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

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

**P26-27** Marche,  $E > V_0$ . Haute énergie

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

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

$$\vec{J}_i = |\alpha|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x \quad \vec{J}_r = -|\beta|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{e}_x \quad \vec{J}_t = |\gamma|^2 \frac{\hbar k'}{m} \vec{e}_x.$$

$$R = |\beta|^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2. \quad T = \left|\frac{\gamma}{\alpha}\right|^2 = \frac{k'}{k} \quad R+T=1.$$

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

Énergie négative impossible.

**P29-30** Barrière  $0 < E < V_0$ . Faible énergie

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

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

**P33** Barrière  $E > V_0$ . Haute énergie

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  $x \in ]-\infty, 0] \cup [a, +\infty[$ .

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$$

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

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

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  $P(E_n) = |\langle \tilde{\psi}_n | \psi \rangle|^2 = |C_n|^2$ .

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

**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  $\psi$  (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 et intégrale nulle.

bon courage