$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ (d'une particule libre)
$\rightarrow \vec{\text{grad}}(\ )$ pour $\vec{p}$.

relation de de Broglie

M.Q

$\vec{p} = \hbar \vec{k}$. $\vec{v_g} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$E_{photon} = h \cdot \nu = \omega \cdot \hbar$ $h = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s $\overbrace{\frac{1}{2} m v^2}^{E} = \frac{1}{2} p \cdot v$.

$\hookrightarrow \underbrace{\frac{1}{2} m^2 v^2}_{E \cdot m} = \frac{1}{2} p^2 \rightarrow \boxed{p = \sqrt{2mE}}$

$p_{photon} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ $\boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi}}$ $\vec{J} = |\psi|^2 \cdot \frac{\hbar \vec{k}}{m}$.

$E = h\nu = \hbar\omega$.

$\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$ (effets quantiques lorsque λ_{DB} est inf. de plusieurs ordres de grandeur aux dist. caract. du système étudié).

La description complète de l'état dynamique (→ totalité des grandeurs physiques.) d'une particule quantique, de masse m, à un instant t dans un référentiel R, se fait au moyen d'une fonction d'onde $\psi(m,t)$ à valeurs complexes. La probabilité de présence de la particule, à l'instant t, dans un vol. mésoscopique $d\tau$ centré au point M est donnée par la relation:

$$dP(m,t) = \psi(m,t) \cdot \psi^*(m,t) \cdot d\tau = |\psi(m,t)|^2 d\tau.$$

$\psi(x,t)$: amplitude de probabilité.

$|\psi(x,t)|^2$: densité de probabilité. → accessible à la mesure.

$$\int_D |\psi(x,t)|^2 \cdot dx = 1.$$

Équation de Schrödinger (Postulat fondamental). Linéaire.

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

On appelle état stationnaire un état du système caractérisé par une fonction d'onde factorisée sous la forme $\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot f(t)$ où φ et f sont à priori deux fonctions à valeurs complexes.

$$\int_D |\psi(x,t)|^2 dx = |f(t)|^2 \int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

$f(t)$ indép. du temps (car stat). on choisit $|f(t)| = 1$

$$\rightarrow \int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1.$$

on écrit $\psi(x,t) = \varphi(x) \exp(i\alpha(t))$

La densité de probabilité de présence $|\Psi(x,t)|^2$ associée à un état stat. est indep. du temps.

On injecte $\Psi(x,t) = \varphi(x) \exp(i\alpha(t))$ dans l'éq. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \Psi(x,t)$$

$$-\hbar\dot{\alpha}(t)\varphi(x) \exp(i\alpha(t)) = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) \cdot \exp(i\alpha(t)) + V(x) \cdot \varphi(x) \exp(i\alpha(t))$$

$$\varphi(x) \cdot \underbrace{\left[-\hbar\dot{\alpha} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} - V(x)\right]} = 0.$$

$$-\hbar\dot{\alpha}(t) = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x)}_{\text{indep du temps}}$$

donc $\dot{\alpha}(t)$ indep du temps. $\dot{\alpha} = -\omega$.

donc $-\hbar\dot{\alpha}(t) = \boxed{\hbar \cdot \omega = E}$

Équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)}$$

Appelée éq. aux valeurs propres.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$ Hamiltonien.

Cette éq. montre que les solutions de $\varphi(x)$ sont les fonctions propres de l'opérateur $\hat{H}$ associées aux valeurs propres E.

<u>Inégalité de Heisenberg.</u>

$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$ indéterminations statistiques

↳ amplitude des fluctuations

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$\tau . \Delta\omega \geq \frac{1}{2}$ avec $E = \hbar\omega$

on obtient l'inégalité temps - énergie:

$$\boxed{\tau \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}}$$

→ temps caract. d'évolution

pas même statut que l'autre inégalité car τ désigne une durée caract. d'évolution et pas une dispersion statist.

Dans le cas d'un état stationnaire (indep du temps) on peut dire que $\tau \to \infty$ donc $\Delta E \to 0$. <u>L'énergie associée à un état stationnaire est parfaitement définie</u>

oscillateur harmonique. $E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2$, $E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

où $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \to k = \omega^2 m$

S: action. = E T

→ énergie ; = période

[limite classique: $S \gg \hbar$
quantique: $S \simeq \hbar$

action = énergie × durée

action = quantité de mvt × distance

action^2 = énergie × masse × longueur^2.

Ppe quantique de Bohr: Dans les conditions où les résultats classiques et quantiques doivent concorder, la théorie quantique doit se ramener au résultat classique.

On appelle particule quantique libre une particule quantique évoluant dans le vide sans intéraction. (énergie potentielle nulle si isolée). $V(x) = 0$.

donc
$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

États stationnaires d'une particule quantique libre :

$\Psi(x,t) = \varphi(x).\exp(-i\omega t)$. où $\varphi(x)$ est solution de l'éq. de Schröd. indép. du temps. avec $V(x)=0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \underbrace{+\hbar\omega}_{=E}\varphi(x)$$

ou
$$\boxed{\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \underbrace{\frac{2m\omega}{\hbar}}_{k^2}\varphi(x) = 0}$$

$r^2 + \frac{2m\omega}{\hbar} = 0$

$r = \pm\sqrt{-\frac{2m\omega}{\hbar}}$

* si $\omega < 0 \rightarrow \varphi(x) = A.\exp(Kx) + B\exp(-Kx)$.
  diverge donc pas acceptable

* $\omega = 0 \rightarrow \varphi(x) = Ax + B$. diverge donc $A=0$.
  contrainte de normalisation : $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$.
  $B^2 . \infty = 1 \quad B = 0$.
  Fonction d'onde nulle → pas d'intérêt.

* $\omega > 0 \rightarrow \varphi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$. avec $k = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$ réelle.

$$\boxed{\Psi(x,t) = A.\exp(i(kx-\omega t)) + B\exp(-i(kx+\omega t))} \quad \text{OPPH.}$$
$$= \exp(-i\omega t).[A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)].$$

$|\Psi(x,t)|^2 = |A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)|^2$. État stationnaire car densité de probabilité ne dépend pas de t.

Relation de dispersion. on injecte $\Psi(x,t)$ dans (1)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$
$$-i\hbar i\omega\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\Psi(x,t)$$
$$\cancel{\hbar}\omega = +\frac{\hbar^{\cancel{2}}}{2m}k^2 \rightarrow \boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}}$$

vitesse de phase : $\boxed{v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}}$ elle dépend de k : dispersive.

$$\boxed{v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}}$$ vitesse de groupe.

$$dP = |\Psi(x,t)|^2 dx = \underbrace{v_g}_{\frac{p}{m}}\underbrace{|\Psi(x,t)|^2}_{\rho}dt = \underbrace{\frac{\hbar k}{m}|\Psi(x,t)|^2}_{=\vec{J}(x,t)} dt$$

analogie EM : $\vec{j} = \rho\vec{v}$

Paquets d'ondes

Superposition de deux ondes monochromatiques de même amplitude, en phase en $x=0$ à $t=0$, pulsations ω_1 et ω_2. avec $\omega_1 > \omega_2$.

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \cdot \cos(\omega_1 t - k_1 x) + \Psi_0 \cdot \cos(\omega_2 t - k_2 x).$$

supposons ω_1 et ω_2 voisines.

$$\omega_m = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2} \qquad \delta\omega = \frac{\omega_1 - \omega_2}{2} \ll \omega_m$$

$$k_m = \frac{k_1 + k_2}{2} \qquad \delta k = \frac{k_1 - k_2}{2} \ll k_m.$$

Amplitude: $\cos(a) + \cos(b) = 2\cos\left(\frac{a+b}{2}\right)\cos\left(\frac{a-b}{2}\right)$

$$\Psi(x,t) = 2\Psi_0 \cdot \cos\left(\frac{(\omega_1+\omega_2)t - (k_1+k_2)x}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{(\omega_1-\omega_2)t + (k_2-k_1)x}{2}\right).$$

$$\Psi(x,t) = 2\Psi_0 \cdot \cos\left(\omega_m t - k_m x\right) \cdot \cos\left(\delta_m \cdot t - \delta_k \cdot x\right).$$

$$= \Psi_m(x,t) \cdot \cos(\omega_m t - k_m x).$$

le signal rapide $\cos(\omega_m t - k_m x)$ se propage à la $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$
l'enveloppe du signal (fuseau de modulation) se propage à la $v_g = \frac{\delta\omega}{\delta k} \approx \frac{d\omega}{dk}$.

En superposant un nb plus important d'ondes planes prog. monoch, nous pouvons essayer de réduire encore l'extension de l'enveloppe du signal. Paquet de $2N+1$ ondes planes de pulsations ω_n voisines autour de la valeur moyenne ω_m.

$\omega_n = \omega_m + n \cdot \delta\omega \quad (-N \leq n \leq N)$ largeur spectrale $\Delta\omega = 2N\delta\omega$.

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=-N}^{N} A_0 \cdot \cos(\omega_n t - k_n x) \qquad \Delta\omega \ll \omega_m.$$

Durée des bouffées est d'autant plus réduite que le nb d'onde ppm superposées et donc la largeur spectrale $\Delta\omega$ sont grandes.