Rappels de mécanique quantique

1. Description de l'état quantique d'une particule de masse *m*

Postulat 1 :

- tout système quantique est complètement défini à l'instant t par une fonction complexe $\Psi(\vec{r},t)$ appelée **fonction d'onde**.

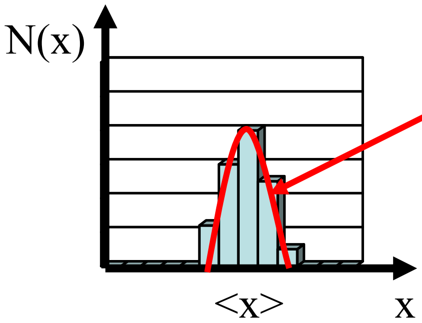
- toute superposit° linéaire $\Psi(\vec{r},t) = \sum_n \Psi_n(\vec{r},t)$ de fonct° d'ondes est une fonct° d'onde.

Postulat 2 :

- $\Psi^*(\vec{r},t) \times \Psi(\vec{r},t)$ est la **densité de probabilité de présence** de la particule au point $\vec{r}$, telle que : $\int \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \int \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\, d^3r$

2. La mesure

Si on effectue une mesure de position sur un grand nombre N de particules, toutes préparées dans le même état $\Psi(\vec{r},t)$, les résultats seront distribués selon la loi :



- $\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2$ = densité de probabilité de présence
- $<x> = \int x \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$ = valeur moyenne
- $\Delta x^2 = <x^2> - <x>^2$ = variance

Postulat 3 :

- à toute grandeur physique A (position, énergie,…) correspond un opérateur $\hat{A}$.
- Seuls résultats de mesure possibles : les **valeurs propres** de $\hat{A}$ tq $\hat{A}\Psi_n(\vec{r},t) = a_n \Psi_n(\vec{r},t)$, les $\Psi_n(\vec{r},t)$ étant les **états propres** de $\hat{A}$.
- La valeur moyenne de A vaut : $<a> = \int \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\, d^3r$
- Le résultat est certain $(\Delta a = 0)$ si le système est dans un état propre de $\hat{A}$: $\Psi = \Psi_n$
$$\Rightarrow \begin{cases} <a> = a_n \\ \Delta a = 0 \end{cases}$$

Grandeur physique	Opération sur la fonction d'onde
Position $x, y, z, \vec{r}$	Multiplication par $x, y, z, \vec{r}$
Impulsion $p_x, p_y, p_z, \vec{p}$	$\hat{P}_{x,y,z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x, y, z}$ $\quad \vec{P} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$
Energie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$	$\hat{E}_c = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
Energie potentielle $V(\vec{r})$	Multiplication par $V(\vec{r})$
Energie totale $E = E_c + V(\vec{r})$	HAMILTONIEN $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$