Fiche révision Méca Q I

- Notions de méca Q

- fonction d'onde : $\Psi(\vec{r}:t)$

  - $dP(\vec{r}:t) = |\Psi(\vec{r}:t)|^2 d^3\vec{r}$
  - $\langle \vec{r} \rangle = \int_V \vec{r}\, |\Psi(\vec{r}:t)|^2 d^3\vec{r}$

On peut faire pareil avec p

- $\tilde{\Psi}(\vec{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_V \Psi(\vec{r}:t)\, e^{-i/\hbar\, \vec{p}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{r}$

$\Rightarrow$ Une particule est une somme d'ondes planes

- Le spin
  - c'est un moment cinétique purement quantique
  - Fermions : spin $n + 1/2$ $\Rightarrow$ exclusion Pauli
  - Bosons : spin n : on peut avoir ttes particules avec m̂ énergie

- Innegalité Heisenberg : $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$

- Equation Schrödinger :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + V\Psi}$$

↳ Conservation proba :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

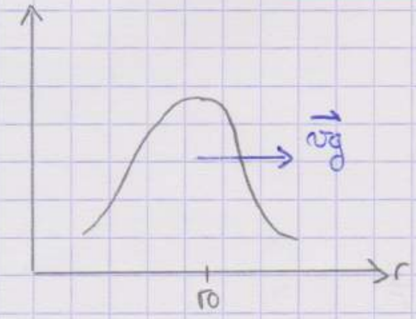
ρ = densité proba $= \Psi\Psi^* = |\Psi|^2$

$\vec{j}$ = courant proba $= \boxed{\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^* \overrightarrow{\text{grad}}\,\Psi - \Psi \overrightarrow{\text{grad}}\,\Psi^*\right)}$

• Paquet d'ondes libres

$$\psi(\vec{r};t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int g(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}\, d^3\vec{k}$$

avec $\boxed{\omega = \frac{p^2}{2m\hbar}}$ et $\boxed{p = \hbar k}$



$r_0(t) = r_0(0) + v_g t$

↳ $\boxed{v_g = d\omega/dk} = \hbar k_0/m$

$\boxed{v_\varphi = \omega/k}$

↳ paquet d'onde va à v_g, mais toutes les ondes du paquet n'ont pas même v

- Formalisme de la méca Q

• Espace de Hilbert : espace vectoriel avec produit scalaire hermitien

- $\langle \lambda\phi | \mu\psi \rangle = \langle \mu\psi | \lambda\phi \rangle^*$
  $= \lambda^* \mu \langle \phi | \psi \rangle$

- $B = (e_1, \dots, e_n)$ base $\Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle e_i | \psi \rangle |e_i\rangle$

- Opérateur adjoint :
  - $A^\dagger$: $\lambda|\chi\rangle = A\langle\psi|$
    $\lambda^*\langle\chi| = \langle\psi| A^\dagger$
  - $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

• Mesure :

- On ne peut mesurer que les valeurs propres d'un opérateurs
- $p(a_n) = |P_n|\psi\rangle|^2$ avec $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |a_n^i\rangle\langle a_n^i|$ projecteur
- Si on mesure $|\psi\rangle$ et qu'on trouve a_n $\Rightarrow$ $|\psi\rangle$ envoyé sur $\mathcal{E}_n$.

Fiche révision Méca Q II

- Evolution temporelle :

$$\boxed{i\hbar \cdot \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle}$$

↳ En projection sur $\langle x|$: $\boxed{\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial x}}$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial|\psi(x)\rangle}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x) + V\psi(x)}$$ (particule libre ds chp V)

- Particule ds champ potentiel infini

• $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma} \cdot n^2$ $\quad n \in \mathbb{N}^*$

$\Rightarrow E_0 \neq 0$ ⊕ energie confine ± si a petit

- Marche de potentiel

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = e^{ikx} + r\, e^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_{II}(x) = t\, e^{iqx} & x > 0 \end{cases}$$

$\Rightarrow r = \frac{k-q}{k+q}$ $\qquad t = \frac{2k}{k+q}$

$\boxed{R = \left|\frac{j^r}{j^i}\right| = |r|^2}$ $\qquad \boxed{T = \left|\frac{j^t}{j^i}\right| = \frac{q}{k}|t|^2}$ $\Rightarrow \boxed{R + T = 1.}$

- Atome d'hydrogène

• $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\hat{r}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - V(r)$

$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(\cdot r) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\vec{L}^2\right] - V(r)$

• Moment cinétiQ $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$

↳ $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$

↳ Valable aussi pour $\hat{S}$ et $\hat{J}$.

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{L}^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, m\rangle \\ \hat{L_z} |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle \end{cases}$$

↳ Fonction propre $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$

↳ $g(n) = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$

⚠ Manque apport du spin pour avoir bonne description

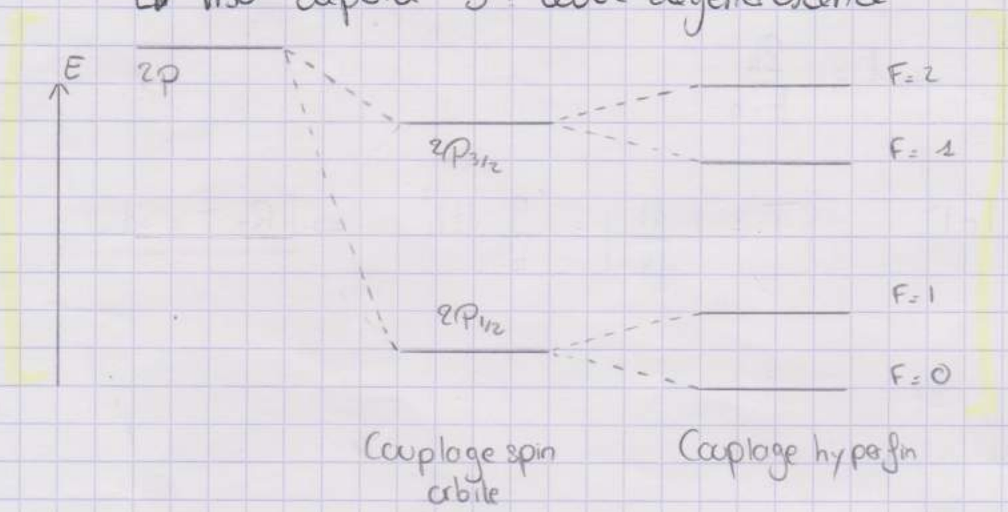
- Hamiltonien structure fine

$$\hat{H} = \hat{H_0} + \hat{W}_{spin\text{-}orb} + \hat{W}_{autre}$$

↳ couplage spin-orbite : $\begin{cases} \hat{W}_{SO} = \alpha \cdot \vec{L} \cdot \vec{S} \\ \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \end{cases}$ ⇝ $\hat{L}\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$

$$\Rightarrow \hat{W}_{SO} |L; S; J\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right)$$

↳ $\hat{W}_{SO}$ dépend J : levée dégénérescence



↳ couplage hyperfin vient des spins des protons

- Atome à plusieurs $e^\ominus$

monoélectronique

$$\hat{H} = \cancel{E_{cN}} + \sum E_{ce^\ominus} + \sum V_{Ne^\ominus} + \cancel{\sum\sum V_{ee}} \simeq \sum_i h_i = \sum_i E_{ce_i} + V^*_{Ne_i^\ominus}$$

Born Oppenheimer

champ moyen

Slater / Hartree Fock

Fiche Meca Q III

=> Separation variables $\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) \cdot Y_{\ell,m}(\theta; \varphi)$

↳ Hund, Pauli, Kleckowsky

- Molecules diatomiques
  ① resout configuration elec avec noyaux fixes
  ② utilise config par determiner position noyaux

↳ Noyaux : $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} + E_e(R) - E_{tot} \right) u_{n\ell}(R) = 0 \right]$

↳ minimum en E_0 => oscillateur harmonique

=> niveau energie : $\hbar\omega (n_v + 1/2) = E_n$

↳ $E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} (\ell+1)\ell$

- Theorie des perturbations

- $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}$
- $E(\lambda) = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots$
- $|\Psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots$

↳ On regarde aux differents ordres et on projette