

Néca Q



I) Approche ondulatoire :

* Dualité onde corpuscule : lumière = photons : particules de masse nulle et d'impulsion $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c}$

↳ Louis de Broglie : "toute matière est dotée d'une onde associée" : $\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$ et $\vec{p} = \hbar \vec{k}$.

* Particule décrite par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t) \Rightarrow$ $dP(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r}$.
 (Proba que la particule soit dans $d^3\vec{r}$ autour de $\vec{r}$ à t.)

* Condition de Normalisation : $\iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$

* Equation d'évolution : Equation de Schrödinger (1925) :

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

* Particule libre : $V=0 \Rightarrow$ les ondes planes sont solutions de l'équation de Schrödinger.

$$\Rightarrow \Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \text{ avec } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{Problème : } \iint_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = |A|^2 \iint_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} = +\infty$$

→ 2 solutions : * boîte finie avec $|\Psi|^2 = 0$ en dehors $\Rightarrow |A|^2 = \frac{1}{L^3}$.

* paquets d'onde : $\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint g(\vec{k}) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) d^3\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint g(\vec{k}) A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3\vec{k}$

avec $\iiint |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$ et $g(\vec{k}) = \text{TF de } \Psi(\vec{r}, 0)$

* Relation d'incertitude de Heisenberg :

$$\Delta \vec{r} \Delta \vec{p} \geq \frac{\hbar}{2} \text{ avec } \Delta a^2 = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2$$

→ démo pour un paquet d'onde. On choisit l'origine tel que $\langle \vec{r} \rangle = \vec{0}$
 $\langle \vec{p} \rangle = \vec{0}$

* Courant de densité de proba : $\iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 d^3\vec{r} = 1$ donc $|\Psi|^2 \nearrow$ dans une région $\Rightarrow |\Psi|^2 \searrow$ dans une autre.
 $\Rightarrow$ courant de densité de probabilité.

On a $\frac{\partial |\Psi(\vec{r}, t)|^2}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$ avec $\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Re} \left(\Psi^* \left(\hbar \vec{\nabla} \right) \Psi \right)$

Démo : écrire l'éq. Schro + son conjugué harmonique et calculer $\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi \Psi^*}{\partial t}$

III) Formalisme de Dirac.

1^{er} principe de la MQ : Principe de superposition.

A chaque système physique est associé un espace de Hilbert $\mathcal{E}_H$. L'état du système est défini à chaque instant, par un vecteur norme $|\psi(t)\rangle$ de $\mathcal{E}_H$.

• Définitions :

• Soit $\hat{A}$ un opérateur de $\mathcal{E}_H$. L'opérateur adjoint, noté $\hat{A}^\dagger$, est défini par :

$$\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = (\langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle)^* \quad \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$$

• Si $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, on dit que $\hat{A}$ est hermitien ou auto-adjoint.

• Si $\hat{A}$ est autoadjoint alors $\langle a \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = (\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle)^* = (\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle)^* = \langle a \rangle_\psi^*$.

$\Rightarrow \hat{A} = \hat{A}^\dagger \Rightarrow \langle a \rangle = \langle a \rangle^* \Rightarrow$ la valeur moyenne de $\hat{A}$ est réelle.

$$\hat{P}_\psi |\psi\rangle = \frac{\langle \psi | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

• Projecteur : on appelle projecteur sur l'état $|m\rangle$, noté $\hat{P}_m$, l'opérateur défini par :

$$\hat{P}_m = |m\rangle \langle m|$$

• Projecteur sur un sous-espace : Soit $\{|m\rangle, m \in \mathbb{N}\}$ une BOV de ce s.e.s. alors :

$$\hat{P}_V = \sum_{m \in \mathbb{N}} |m\rangle \langle m|$$

• Relation de fermeture : Soit $\{|m\rangle\}$ une BOV de $\mathcal{E}_H$, alors

$$\sum_m \hat{P}_m = \mathbb{1}$$

• Théorème spectral : L'ensemble des vecteurs propres ortho-normalisés d'un opérateur auto-adjoint forme une base hilbertienne de $\mathcal{E}_H$.

2^{ème} principe de la MQ : mesure des grandeurs physiques.

a) A toute grandeur physique A est associée un opérateur linéaire auto-adjoint $\hat{A}$: $\hat{A}$ est l'observable représentant A .

b) Soit $|\psi\rangle$ l'état dans lequel se trouve le système au moment où l'on effectue la mesure de A . Les résultats possibles de la mesure sont les valeurs propres de $\hat{A}$.

c) Soit P_a le projecteur sur le s.e.s. associé à la vp a_a . La probabilité de trouver a_a lors d'une mesure est :

$$S(a_a) = \|\hat{P}_a |\psi\rangle\|^2 = \|\hat{P}_a |\psi\rangle\|^2$$

d) Immédiatement après le résultat d'une mesure ayant donné a_a , le nouvel état du système est :

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_a |\psi\rangle}{\|\hat{P}_a |\psi\rangle\|}$$

- 3^{ème} principe de la MQ : Evolution dans le temps.

Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état d'un système à l'instant t . Tant que le système n'est soumis à aucune observation, son évolution au cours du temps est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

- Relations de commutations : $\forall \alpha, \beta \in \{1, 2, 3\}$

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta}$$

Ehrenfest :
$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} [H, A]$$