PHYS-F-203
Mécanique Quantique

Serge Massar

Notes de Cours 2018-19

Avertissement : ces notes ont été rédigées pour servir d'aide mémoire lors du cours ex-cathedra. Elles ne sont ni complètes, ni pédagogiques, ni exemptes d'erreur. Il est vivement recommandé de compléter le cours par l'étude du livre de référence.

Relations de de Broglie

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \end{cases} \longrightarrow \lambda = \frac{2\pi}{|k|} = \frac{h}{|p|}$$

éqt. de Schrödinger

$\Psi(\vec{r},t)$ = fonction d'onde

Equation Classique

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$\hbar \cdot i\frac{1}{\Psi}\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}\left(-\cancel{\frac{1}{\hbar}}\hbar^2\frac{1}{\Psi}\Delta\Psi\right) + V(\vec{r}) \Leftarrow$$

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

- éqt linéaire
- satisfait les relations de de Broglie

Remarque

éqt. d'onde

$$\left(\frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2\right)A = 0$$

$$A(x,t) = A\cos(\omega t - kx)$$
$$= A\,e^{i(\omega t - kx)}$$

$$\longrightarrow \omega = \frac{i}{A}(\partial_t A)$$

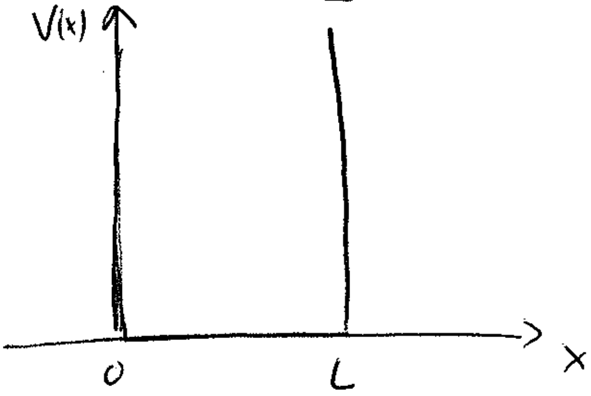
$$k_x = -i\frac{1}{A}(\partial_x A)$$

$$k_x^2 = -\frac{1}{A^2}(\partial_x A)^2$$
$$= -\frac{1}{A}(\partial_x^2 A)$$

$$k^2 = -\frac{1}{A}(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2)A$$
$$= -\frac{1}{A}\Delta A$$

Puit de Potentiel infini à 1 dimension

(plus tard puit de pot. fini



$$V(x) = +\infty \text{ si } x<0$$
$$= 0 \text{ si } 0<x<L$$
$$= +\infty \text{ si } x>L$$

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x)\psi$$

1°) séparation de variables $\psi(x,t) = \chi(t)\,\varphi(x)$

$$\longrightarrow i\hbar\frac{1}{\chi}\partial_t\chi = \frac{1}{\varphi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi\right) + V(x) = E$$

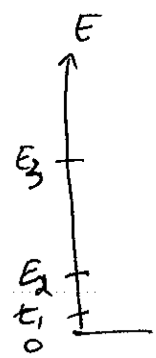
$$\longrightarrow \chi = \chi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi + V(x)\varphi = E\varphi$$

cdts. au bord $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$

pour $0<x<L$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = E\varphi \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \longrightarrow -\partial_x^2\varphi = k^2\varphi$

$$\longrightarrow \varphi = \alpha\sin(kx) + \beta\cos(kx).$$



cdt. au bord $\beta = 0$

$kL = n\pi$ $\quad n=1,2,\ldots$ $\qquad \boxed{k_n = \frac{n\pi}{L}} \qquad \boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2 n^2}{L^2}}$

$$\psi_n(x,t) = A e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$\longrightarrow$ quantification de l'énergie

Solution générale $\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \longrightarrow$ à 3 dim

Onde plane

$\cancel{\psi = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{ikx}}$

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$$

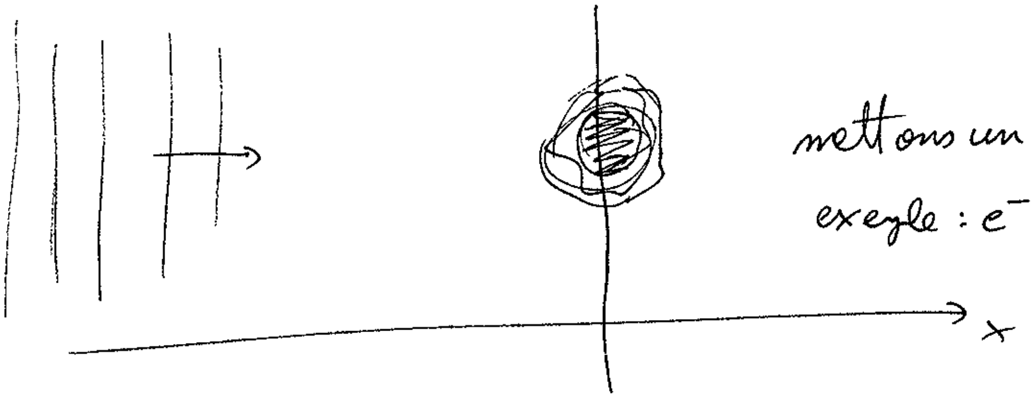
séparation de variables.

$\rightarrow \psi = A e^{-i\frac{Et}{\hbar}} e^{i\vec{k}.\vec{x}}$ $\quad \vec{k} = \hbar \vec{p} \quad |k|^2 = \hbar^2 p^2 = \hbar^2\, 2mE$

particule d'energie E qui se déplace dans direction $\vec{k}$

par exemple $\psi = A e^{-i\frac{Et}{\hbar}} e^{ikx}$ se déplace ds direction $+x$

Collisions : interprétation de Born



(ponctuel)

mettons un obstacle en $(0,0,0) = O$

exemple : e^- qui rencontre un atome

$\rightarrow$ l'éq. à résoudre est $i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r})\psi$

$\hookrightarrow$ localisé autour de O.

~~et cdt. au bord : pour x → ±∞ ∂ψ~~

énergie E : $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V(r)\varphi = E\varphi$

et cdt. au bord : pour $x \to -\infty$, $\varphi = A e^{ikx}$

$\longrightarrow$ une partie de l'onde va continuer tout droit

$\longrightarrow$ une partie sera diffusée dans toutes les directions

~~pour grand~~ ~~Rkx~~ à ~~grande~~ grande distance ondes planes ds toutes les direc.

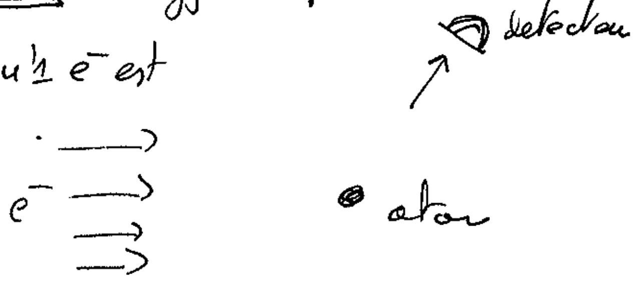
$$\varphi(\vec{x}) = A e^{ikx} + \int d^3k\, \alpha(\vec{k})\, e^{i\vec{k}.\vec{x}}$$

$\hookrightarrow$ onde incidente.

$\hookrightarrow$ onde diffusée. ~~αkkz~~

<u>Born</u> : – MQ décrit simultanément <u>toutes</u> les diffusions possibles

– mais ds labo on ne trouve qu'<u>1</u> e^- est diffusé ds 1 direction donnée ·



→ décrit les <u>probabilités</u> de diffusion ds direction $\vec{k}$

<u>Remarque 1</u> : on peut montrer que c'est $\dfrac{|\alpha(\vec{k})|^2}{|A|^2}$ qui donne la proba. d'être diffusé ds direction $\vec{k}$

(car $\displaystyle\int d\vec{k}\ \frac{|\alpha(\vec{k})|^2}{|A|^2} = 1$)

<u>Remarque 2</u> : $\begin{cases} \text{Proba = artefact car théorie incomplète} \\ \text{ou Proba : intrinsèque} \end{cases}$

Interprétation probabiliste : $\left\{\begin{array}{l}\text{densité de probabilité} \\ \text{courant de probabilité}\end{array}\right.$

$\psi(\vec{r},t)$ solution de $\quad i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec{r})\psi.$

normalisée : $\int d\vec{r}\;|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1 \longrightarrow$ on va montrer que si c'est vrai à 1 instant, vrai tout le temps.

$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 =$ densité de proba : proba de trouver la particule en $\vec{r}$ à l'instant t.

$\longrightarrow$ équation de continuité $\qquad \vec{J}$ = courant de probabilité

$$\partial_t\rho(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) = 0$$

$$-i\hbar\partial_t\bar{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\psi} + V\bar{\psi}$$

$$\rho = \bar{\psi}\psi$$

$$i\hbar\partial_t\rho = \left(i\hbar\partial_t\bar{\psi}\right)\cdot\psi + \bar{\psi}\left(i\hbar\partial_t\psi\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\bar{\psi}(\Delta\psi) - \psi(\Delta\bar{\psi})\right]$$

$$\longrightarrow \partial_t\rho + \frac{\hbar}{2mi}\left[\bar{\psi}(\Delta\psi) - \psi(\Delta\bar{\psi})\right] = 0$$

$$\longrightarrow \partial_t\rho + \frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left[\bar{\psi}(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\bar{\psi})\right] = 0$$

$$\longrightarrow \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\bar{\psi}(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\bar{\psi})\right]$$

$$= \frac{1}{m}\,\mathrm{Im}\left[\hbar\,\bar{\psi}(\vec{\nabla}\psi)\right]$$

$$\frac{d}{dt}\int d^3\vec{r}\;|\psi(\vec{r},t)|^2 = \int d^3\vec{r}\;\partial_t\rho(\vec{r},t) = -\int d^3\vec{r}\;\vec{\nabla}\cdot\vec{J} = -\iint_{\infty} d\vec{S}\cdot\vec{J} = 0$$

si ψ s'annulle à l'∞.

$\varphi = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} e^{-iEt}$ (⚠ pas normalisée).

$\vec{J} = \frac{1}{m} \mathrm{Im}\left(\hbar \bar{A} e^{-ikx} e^{+iEt} \cdot i\vec{k} A e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} e^{-iEt}\right) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}$

$\varphi = \int d^3k \, \alpha(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} e^{-iEt}$. $= \iint_S d^2\vec{S} \cdot \vec{J}$ pour $S \to \infty$

$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}\left(\int d^3k' \, \bar{\alpha}(\vec{k}') \cdot e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}} \cdot \int d^3k \, \alpha(\vec{k}) i\vec{k} \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\right)$

$\int d^3x \, \vec{J} = \frac{\hbar}{m} \int d^3\vec{k} \, |\alpha(\vec{k})|^2$

Paquet d'Onde à 1 dimension

(A) Vitesse de Phase et Vitesse de Groupe

Onde $e^{-i\omega(k)t}\, e^{ikx}$

$\omega(k)$ = relation de dispersion

exemple : particule quantique $\omega = E/\hbar = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$k = p/\hbar$

$$\boxed{\text{vitesse de phase} = \frac{\omega(k)}{k} \left(= \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m}\right) = \text{vitesse de déplacement des crêtes des ondes}}$$

Paquet d'Onde

$$A(t,x) = \int dk\, g(k-k_0)\, e^{-i\omega(k)t}\, e^{ikx}$$

$\longrightarrow$ se ramener à une intégrale gaussienne.

$g(k-k_0)$: centré sur k_0
de faible largeur Δ

$$g(k-k_0) \simeq e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta^2}}$$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \omega'(k-k_0) + \frac{\omega''}{2}(k-k_0)^2$$

$\boxed{\omega' = \text{vitesse de groupe}}$

ω'' = dispersion

$$\longrightarrow A(t,x) \simeq e^{-i\omega(k_0)t}\, e^{ik_0 x} \int dk\, g(k-k_0)\, e^{-i(k-k_0)[\omega' t + x]} \quad (8)$$

(on néglige ω'' car Δ très petit).

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{= G(\omega' t - x) \simeq e^{-\frac{(\omega' t - x)^2}{2}\Delta^2}}$$

$$\boxed{\begin{array}{l}\longrightarrow \text{le centre du paquet d'onde se déplace à la vitesse} \\ V_g = \text{vitesse de groupe} = \dfrac{\partial \omega}{\partial k} = \omega'\end{array}}$$

particule quantique $\dfrac{\partial \omega}{\partial k} = \dfrac{\hbar k}{m} = \dfrac{p}{m} = V_{classique}$