

1/8

10-04-12

Mécanique Quantique

$\propto$: proportionnelle

I - Intro à la théorie des quanta

2 concepts de la γ classique : ondes et particules

Ondes = ondes électromagnétiques se déplacent à la vitesse de la lumière.

$\rightarrow$ phéno de diffraction = tâche d'Airy.

Particules : Impulsion $p = mv$ (onde : $E = pc$)

3 gdes théories marquant la γ classique :

- Mécan^a newtonienne
- Therm^a classique
- Electromagnétisme et opt^a

③ Thomson : a déf l'électron $\hat{=}$ une particule fondamentale

② I. Young : lumière $\hat{=}$ une onde, Diffraction et Interférences

① Maxwell : la lum est une onde électromagnét^a

$\rightarrow$ on déf 2 gdes : long d'onde et fréq par une on

$\lambda [m]$

$\nu [s^{-1}] = [Hz]$

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

La lum $\hat{=}$ une particule diff

• Rayonnem^t du corps noir : tt corps $\otimes$ réfléchissant chauffé emit un γ

Planck $\rightarrow E_n = n h \nu$

$\otimes$ petite ~~diff~~ n^o par $n=1$: $E_n = h \nu$

Rappel : $E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$ avec $p = mv$

Photon : quantum de lum $E(\text{photon}) = h \nu$

N^o cinét^a des photo-électrons (Planck-Einstein) $E_c = h \nu - W$

$\rightarrow$ cette eq voit bien la lum $\hat{=}$ une particule

W : travail de matière

L de Broglie

$$E = pc \longrightarrow pc = h\nu \longleftarrow E = h\nu$$
$$\lambda = \frac{h}{p}$$

→ Généralisé à des particules matérielles $p = mv$

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Impulsion $\propto \frac{1}{\text{longueur d'onde}}$ $\Rightarrow$ Dualité onde-particule

② Nous étudierons : le modèle "Noyau Ponctuel" de Rutherford
planétaire de Bohr

③ Particule α = noyau d'hélium

Le diamètre d'un atome $\approx 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm} = 1 \text{ \AA}$ Angström
noyau $\approx 10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ fm}$ femto

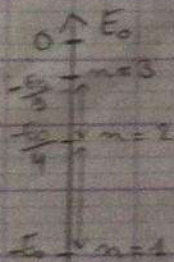
④ Modèle planétaire de Bohr

force centrifuge : fait partir l'objet) équilibre entre
attraction : le rapproche) les deux.

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

E_0 correspond au syst. d'hydrogène

$n=1$: $E_1 = -13,6 \text{ eV}$ @ petite n'y possible



④ Résumé

échelle macroscopique

particules ont un comportement ondulatoire

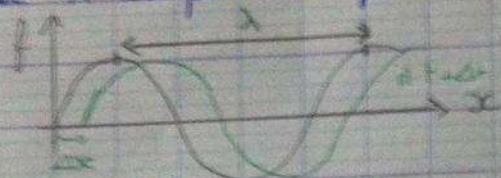
échanges d'énergie se font par sauts discrets (...)

11.04.12

II. Concepts de la MQ

Ondes : (planes)

fonct. périodique de l'espace : $f(x+\lambda) = f(x)$
 Avec λ la période spatiale (ie : la long. d'onde).



$$f(x) = A e^{ikx} = A (\cos(kx) + i \sin(kx))$$

amplitude $\swarrow$
 onde $\searrow$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ en m}^{-1}$$

Déphasement de l'onde

Période T : tps mis par l'onde pour se déplacer de λ

vit. de l'onde : $v = \frac{\lambda}{T} = \frac{\omega}{k}$

pulsat. $\omega = 2\pi\nu$

freq. de l'onde : $\nu = \frac{1}{T}$

À $t_0 + \Delta t$: $x' = x \pm vt = x \pm \frac{\omega}{k} t$ $\rightarrow$ vit. de phase

$\omega \pm k \Rightarrow kx' = kx \pm \omega t$

Forme de l'onde plane : $f(x) = A e^{i(kx \pm \omega t)}$

Convent. : propagat. vers $x > 0$ qd $t \uparrow$: $f(x) = A e^{i(kx - \omega t)}$

1) Descript. d'une particule quantique

Postulat

En MQ, une particule est décrite par un état $|\Psi(t)\rangle$ représenté par la fonct. d'onde.

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

Informat. de $|\Psi\rangle$

$$\left. \begin{aligned} k &= \frac{2\pi}{\lambda} \\ \lambda &= \frac{h}{p} \end{aligned} \right\} k = \frac{2\pi}{h} p = \frac{p}{\hbar} \quad \text{avec } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\left. \begin{aligned} \omega &= 2\pi \nu \\ E &= h \nu \end{aligned} \right\} \omega = 2\pi \cdot \frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$

la ^{d'onde} fonction d'onde Ψ sur la particule: p et C.
 $\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$

Sens Ψ de la fct d'onde!

Rappel: Interférences



À l'entrée: $\Psi_{in}(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$

À la sortie: $\Psi_{out}(x, t) = \Psi_a + \Psi_b$

Proba pour que la particule (décrite par Ψ) atteigne l'écran au pt C: $P(C) = |\Psi_{out}|^2 = |\Psi_a + \Psi_b|^2$

Analogie

Méca ondulatoire

Ψ : amplitude du champ $\vec{E}$

Ψ^2 : Intensité lumineuse

i.e.: densité d'ny

Méca Q.

Ψ : ampli. de proba. pas de sens Ψ

$|\Psi|^2$: densité

proba de trouver la particule ds

l'espace infinitesimal dV : $dP = |\Psi|^2 dV$

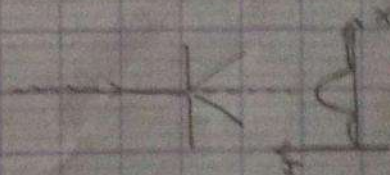
$|\Psi|^2$: densité de proba de présence de la particule

proba de présence: $P = \int_{-\infty}^{+\infty} dP = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dV = 1$ condit° de normalisation de la fct d'onde

$\Rightarrow \Psi$ doit étre une fct de carrés sommables

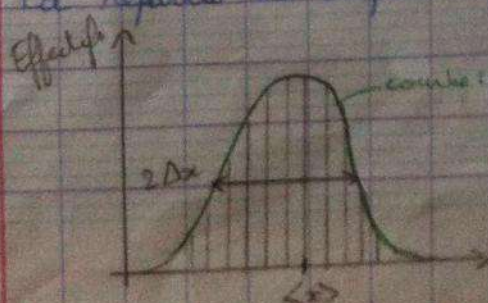
Interprétation probabiliste

Exemple: diffraction



N particules préparées ds le Ψ état $|\Psi\rangle$.

La répartition des impacts des N particules suit la densité de proba $|\Psi(x)|^2$



N mesures caractérisées par:

- valeur attendue $\langle x \rangle$
- dispersion Δx

$$\langle x \rangle = \int x |\Psi(x)|^2 dx$$

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

11.04.12

II 2) Eq d'évolut^o des fct d'ondes

Eq de Schrödinger

• Solut^o de la forme: $\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)}$

→ Dérivat^o par rapport au tps t:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega A e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \Psi$$

$$\text{Or } E = h\nu = \hbar \omega$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi$$

$$\Leftrightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E \Psi} \quad \leftarrow \text{opérateur (différentiel)}$$

Eq aux valeurs propres: $\hat{A}$ opérateur $\hat{A} \Psi = \alpha \Psi$

Def: opérateur $\hat{E}$

$$\boxed{\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$

• Dérivat^o par rapport à x (2 fois)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik A e^{i(kx - \omega t)} = ik \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi$$

$$\text{Or } p = \hbar k$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad \text{avec } \left. \begin{array}{l} p^2 = m^2 v^2 \\ E = \frac{1}{2} m v^2 \end{array} \right\} p^2 = 2mE$$

$$\text{Donc: } \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi \Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = E \Psi} \quad (A) \quad \leftarrow \text{opérateur } \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Pour une particule libre, donc soumise à aucun potentiel

$$E = E_0 + V = 0$$

$$\Rightarrow (A) = (B) \Leftrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)}$$

Eq de Schrödinger
pour une particule libre

$$\Leftrightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi = \hat{E} \Psi$$

Cas $V \neq 0$. Modif de P ny totale

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \longleftrightarrow \text{on MQ opérateur } \frac{p^2}{2m} + \hat{V}$$

$$\text{On a } \hat{V}\psi = V\psi$$

V valeur du potentiel

Eq de Schrödinger générale

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \right) \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t)$$

↳ opérateur HAMILTONIEN $\hat{H}$

$$\hat{H} |\psi\rangle = \hat{E} |\psi\rangle$$

3) Principe de superposition

Expérience des interférences



En C: $\psi_c = \psi_1 + \psi_2$, ces fct d'ondes peuvent s'additionner

pple fondamentale

Soit ψ_1, ψ_2 2 fct d'ondes qq

Alors $\Psi = \alpha \psi_1 + \beta \psi_2$ est aussi une fct d'onde

$$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

⇒ $\{ \psi(x,t) \}$ constitue un espace vectoriel de fct complexe + condit° de normalisat° : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$

Espace de Hilbert : espace de fct de courbes sommables

Compatibilité avec l'équat° de Schrödinger

↳ OK car la combinaison liné° de solut° d'une équation diff est aussi solution.

Définit° Π scalaire

Soit ψ et ϕ deux fct d'onde.

Π scal° étendu à $\mathbb{C}$ l'espace :

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int \psi^*(x,t) \phi(x,t) dx$$

4) Principe de correspondance et observable

1 mesure $\rightarrow$ son résultat est aléatoire.
On utilise des opérateurs pour représenter les qtes observables.
À chaque grandeur Ψ (classique) correspond un opérateur de la mécanique quantique. Cet opérateur = l'observable.

position $\vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} \Psi = \vec{r} \Psi$

impulsion $\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Psi = \hbar \vec{k} \Psi$

énergie $E \rightarrow \hat{E} \Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hbar \omega \Psi$

Hamiltonien $E_c + V \rightarrow \hat{H} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + V \right) \Psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \Psi$

5) Théo des grandeurs physiques

grandeur Ψ $A \rightarrow$ opérateur $\hat{A}$ qui agit sur Ψ
Les valeurs propres de $\hat{A}$ sont les seules valeurs mesurables et correspondent aux états propres $|\Phi_n\rangle$ de l'opérateur A .

$$\hat{A} |\Phi_n\rangle = \alpha_n |\Phi_n\rangle$$

$\{|\Phi_n\rangle\}$: états normés et orthogonaux entre eux.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi_n(\vec{r})|^2 dV = 1 \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_p^*(\vec{r}) \cdot \Phi_n(\vec{r}) dV = 0$$

$$= \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle \quad \quad \quad = \langle \Phi_p | \Phi_n \rangle$$

• Probabilité d'obtenir un résultat propre de $\hat{A}$.

$\hat{A}$, opérateur de valeurs propres distinctes α_n

$|\Psi\rangle$ état qq se décompose sur la base $\{|\Phi_n\rangle\}$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\Phi_n\rangle$$

la proba d'obtenir α_n : module carré de la composante de $|\Psi\rangle$ le long de $|\Phi_n\rangle$.

$$P(\alpha_n) = |\langle \Phi_n | \Psi \rangle|^2 = |\langle \Phi_n | \sum_n c_n |\Phi_n\rangle|^2$$

$$= \langle \Phi_n | c_1 |\Phi_1\rangle + \langle \Phi_n | c_2 |\Phi_2\rangle + \dots + \langle \Phi_n | c_n |\Phi_n\rangle + \dots + \langle \Phi_n | c_N |\Phi_N\rangle$$

$$= |c_1 \underbrace{\langle \Phi_n | \Phi_1 \rangle}_{=0} + \dots + \underbrace{c_n \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle}_1 + \dots + c_N \underbrace{\langle \Phi_n | \Phi_N \rangle}_{=0}|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{P(\alpha_n) = |c_n|^2}$$

* Dégénérescence

Le n^{e} α_n peut correspondre à $\neq |\Phi_n\rangle$.

Si α_n est dégénéré g fois

$$\text{Alors } P(\alpha_n) = \sum_{k=1}^g |C_{n,k}|^2$$

On doit avoir $\sum |C_n|^2 = 1$ (const. de normalisation car $|\Phi_n\rangle$ état normé)

* Valeur moyenne (attendue) de l'opérateur $\hat{A}$

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) (\hat{A} \psi(x, t)) dx$$

$\in \mathbb{R}$

$\in \mathbb{R}$

$\rightarrow$ * complexe conjugué

Prop. des observables

$\hat{A}$ linéaire : Si $\hat{A}|\Phi_1\rangle = |\Psi_1\rangle$ et $\hat{A}|\Phi_2\rangle = |\Psi_2\rangle$

Alors $\hat{A}(\alpha|\Phi_1\rangle + \beta|\Phi_2\rangle) = \alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle$

$\hat{A}$ hermitien : $\int \psi_1^* (\hat{A} \psi_2) dx = \int (\hat{A} \psi_1)^* \psi_2 dx$

* Valeur moyenne de qdq opérateurs

position $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2 dx$

impulsion $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$

Energie $\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{H} \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi dx$

Incertitude sur la moyenne : $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

NB : la moyenne et l'incertitude $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$

dependent de la forme de $\psi(x, t)$ $\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$

3/8 MQ

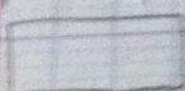
11.06.11 (Ex 5: Théorème sur grandeur φ)

Exemple

Etats de polarisation du photon (principe de décomposition spectrale)

$\vec{y}$ = vecteur polarisation

source
photon inconnue

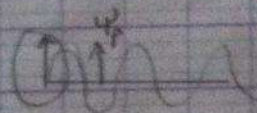


→ 3
analyser

Analyseur : 2 résultats possibles

photon passe 1 $\rightarrow |\Phi_1\rangle = \vec{e}_x$

bloque 0 $\rightarrow |\Phi_0\rangle = \vec{e}_y$



Soit $|\Psi\rangle = |\Phi_1\rangle \Rightarrow 1$ à 100%

$|\Psi\rangle = |\Phi_0\rangle \Rightarrow 0$

$|\Psi\rangle$ fait angle θ avec $\vec{e}_x$.

Prédiction des probas d'obtenir les résultats propres (0 ou 1)

$$|\Psi\rangle = \cos\theta |\Phi_1\rangle + \sin\theta |\Phi_0\rangle$$

$$= \cos\theta \vec{e}_x + \sin\theta \vec{e}_y$$

$$P(1) = (\cos\theta)^2 \quad P(0) = (\sin\theta)^2 \quad P(1) + P(0) = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$$

$$P(0) = (\sin\theta)^2$$

Si $\theta = 30^\circ$, alors $P(1) = \frac{3}{4}$

* Paradoxe du chat de Schrödinger



1st "Cl" se désintègre $\rightarrow \alpha^-$
Là $t = 60 \text{ min}$

$$\text{À } t = 60 \text{ min} \quad \Psi_{\text{tot}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + \Psi_0)$$

$$\Rightarrow \Psi_{\text{tot}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\text{vivant}} + \Psi_{\text{mort}}) \quad \text{superposition des états}$$

Observation $\Rightarrow$ réduit de l'état du chat

$$\text{À } t = 120 \text{ min} \quad \Psi_{\text{tot}} = 0,15 \Psi_1 + 0,985 \Psi_0$$

c) Paquet d'onde et principe d'incertitude de Heisenberg
 Fct d'onde $\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$ (onde plane)

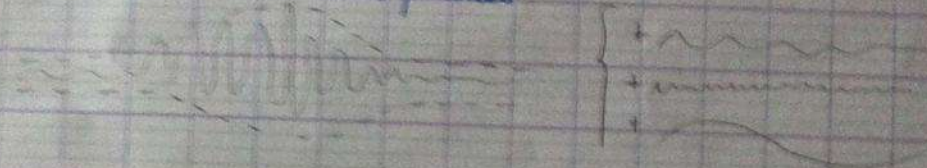
Est non normalisable

Proba de présence: $P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx$

$$\Rightarrow P = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{i(kx - \omega t)} e^{-i(kx - \omega t)} dx$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty \quad ?? \quad \otimes$$

Solution: Σ d'ondes planes



Paquet d'onde 1D:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Normalisé

$$\text{À } t=0 \quad \Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(k) e^{ikx} dk$$

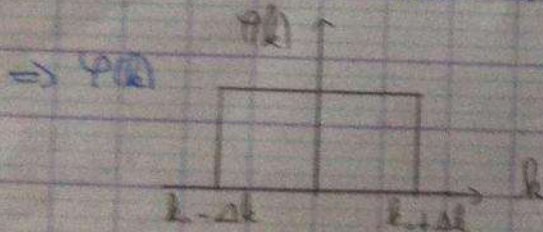
$\varphi(k)$: transformée de Fourier de $\Psi(x, 0)$

$$\text{On a } \varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

$\varphi(k)$: Spectre des fréquences spatiales du paquet d'ondes.

Extension spatiale du paquet d'ondes: type cos(kx)

Ex: Superposition d'ondes sinusoïdales V , amplitude $A\sqrt{2\pi}$
 vecteurs d'onde $k \in [k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$



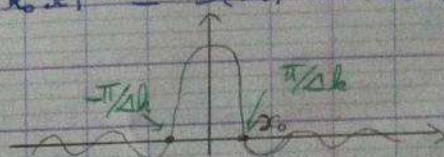
$$\text{On cherche } \Psi(x, 0) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \cos(kx) dk$$

$$\Rightarrow \Psi(x, 0) = A \left[\frac{\sin(kx)}{x} \right]_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} = A \frac{\sin((k_0 + \Delta k)x) - \sin((k_0 - \Delta k)x)}{x}$$

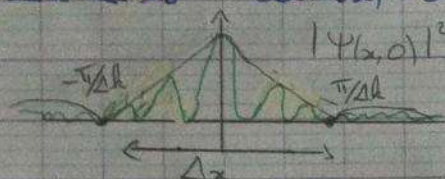
$\sin(a+b) - \sin(a-b) = 2 \cos a \sin b$

$$\Rightarrow \Psi(x, 0) = 2A \frac{\sin(\Delta k x)}{x} \cos(k_0 x)$$

$$= 2A \Delta k \underbrace{\frac{\sin(\Delta k x)}{\Delta k \cdot x}}_{S(x)} \cos(k_0 x) = S(x) \cos(k_0 x)$$



Si $\Delta k \ll k_0$ $\cos(k_0 x)$ oscille rapidement modélisé par $S(x)$.



$S(x)$ s'annule pour $\Delta k \cdot x = n\pi \Leftrightarrow x = \frac{n\pi}{\Delta k} \quad n \in \mathbb{Z}^*$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}}$$

$$\Delta k \cdot \Delta x = 2\pi$$

$$\Delta x \uparrow \text{ si } \Delta k \downarrow$$

Cas limite: $\Delta k \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta x \rightarrow \infty$



Evolution du paquet d'onde ds le tps:

$$\text{Particule libre: } \begin{cases} E = \frac{p^2}{2m} & (\text{particule}) \\ E = \hbar \omega & (\text{onde}) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{p^2}{2m\hbar} \quad \text{or } p = \hbar \cdot k \quad (\text{issue de } \lambda = \frac{h}{p})$$

$$\omega = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2m\hbar} \Leftrightarrow \boxed{\omega = \frac{\hbar \cdot k^2}{2m}}$$

$$\text{Onde planes: vitesse de phase } v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar(k)}{2m}$$

$$\text{Milieu de propagat° dispersif: } v_g = f(k)$$

Soient deux ondes planes du paquet : (k_1, ω_1) et (k_2, ω_2)
 porteur de q ondes en phase (interférences constructives)

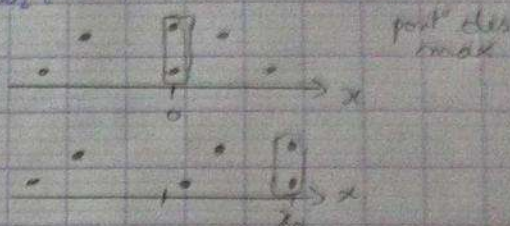
$$\text{car } k_1 x - \omega_1 t = k_2 x - \omega_2 t$$

$$\Rightarrow x = \frac{\omega_1 - \omega_2}{k_1 - k_2} t$$

$$x = v t$$

$$\text{À } t=0, x=0$$

$$\text{On a } x = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} t$$



Dans paquet d'onde : $\Delta \omega \rightarrow 0, \Delta k \rightarrow 0$

$$\Rightarrow x = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{\omega_0} t \quad \text{vitesse de groupe}$$

Principe d'incertitudes de Heisenberg

Extension spatiale du paquet d'ondes : $\Delta x \Delta k = 2\pi$

Pour onde de Broglie : $p = \hbar k$ avec $k \in [k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k]$

$$\Rightarrow \Delta p = \hbar \Delta k$$

$$\text{Donc } \Delta x \frac{\Delta p}{\hbar} = 2\pi$$

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p = 2\pi \hbar = h$$

→ En MQ on ne peut pas déterminer avec une précision ∞ à la fois la position et la vitesse de la particule

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

La 4^e relation d'incertitude :

de l'ny
 Mesure de la particule traversant une fenêtre d'analyse de
 largeur Δx .

Particule d'impulsion $p_x = m v_x$

$$\text{Noy classique : } E = \frac{p_x^2}{2m}$$

$$\text{Dérivée : } dE = \frac{2 p_x dp_x}{2m}$$

$$\text{Soit } \Delta E = \frac{\hbar}{2m} \Delta p_x$$

On particule observable p't la t'p de
 traversée de la fenêtre d'observat.

$$\Delta x = v \Delta t$$

$$\Rightarrow \Delta E = \frac{\Delta x}{\Delta t} \Delta p$$

avec $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\text{On a } \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

MQ
4/8

03.05.19 (I) a)

1^{er} théorème d'incertitude : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

Largeur moyenne des raies spectrales

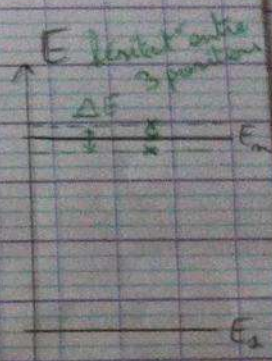
Transition $E_n \rightarrow E_m$ (laine fondamentale)

ΔE durée de vie de l'état excité

Avec dérivée de l'état $E = E_n$ p.p.t. $\Delta E = \Delta E_n$

E_n ne peut pas être connue au mieux : $\Delta E \geq \frac{\hbar}{2\Delta t}$

Seul E_n est ainsi parfaitement définie



III. Applicat^{ns} des concepts:

1) Etat stationnaire (points et bornes du potentiel)

Etat stationnaire

Solut^{ns} indépendantes des t de l'éq de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x, t) \quad (*)$$

Solut^{ns} à variables séparées : $\Psi(x, t) = \phi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$ → dans (*)

$$\hookrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) \cdot e^{-iEt/\hbar} + V(x) \phi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar} = \underbrace{E}_{E} \phi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) + V(x) \phi(x) = E \phi(x)$$

→ Eq de Schrödinger stationnaire : $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi(x) = E \phi(x)$

$\hat{H} \phi(x) = E \phi(x)$

$\phi(x)$: état d'eq définie $\Delta E = 0$.

$$\Delta t \rightarrow \infty$$

Système figé de la t .

Cours le modèle Planét^{re} de l'atome (Bohr) est [Eaux].

Particule soumise à $V(x) = V_0$: $\phi(x) = ?$

$\uparrow$
 V_0

Syst à résoudre : $-\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) + V_0 \phi(x) = E \phi(x)$
 $\Leftrightarrow \phi''(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \phi(x) = 0$

Solution : $\phi(x) = A e^{nx}$
 $\phi'(x) = A n e^{nx}$
 $\phi''(x) = A n^2 e^{nx}$

$$\Rightarrow A n^2 e^{nx} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} A e^{nx} = 0$$

$$\Rightarrow n^2 + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = 0$$

$$\Rightarrow n = \pm \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Plus cas :

• $E < V_0$: $\phi(x) = A e^{\beta x} + B e^{-\beta x}$ avec $\beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

• $E > V_0$: $\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$
 (cas particulier $k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$)

Cas particulier : $E = V_0 \rightarrow \phi(x) = Ax + B$

$E > V_0$: $\phi(x)$ onde plane e^{ikx} progressive $-x \rightarrow +x$

$E < V_0$: $\phi(x)$ onde évanescente $e^{-\beta x}$ $\downarrow$

La partie très courte.

Vecteur d'onde : $k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$ $\hbar^2 k^2 = 2m(E - V_0)$

$\Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$
 peut prendre n'importe quelle valeur.
 Énergie cinétique.

$2\pi x = h$

Long d'onde : $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V_0)}}$ Long d'onde de De Broglie

Etat d'avg certaine $\Rightarrow$ état stationnaire

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$$

$$\Psi(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) dx$$

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx$$

Ψ : solutⁿ de Eq Schrödinger stationnaire

$$\hat{H} \Psi(x, t) = E \cdot \Psi(x, t)$$

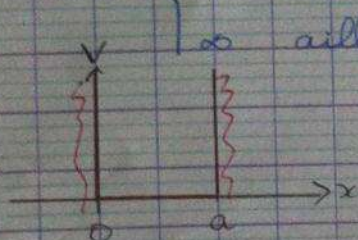
$$\Rightarrow \langle E \rangle = E \int \Psi^* \Psi dx = E \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx$$

$$\langle E^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{H} (\hat{H} \Psi) dx = E \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx = E \cdot E = E^2$$

$$\text{Donc } \Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0 \quad \text{CQED}$$

Particule dans un puits de potentiel ∞ profond :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \forall x \in [0; a] \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$



La particule n'existe qu'à l'intérieur du puits.

Conclu : $\phi(x=0) = \phi(x=a) = 0$

Soit particule d'avg $E > 0$. Entre 0 et a $E > V(x)$.

Eq de Schrödinger entre $x=0$ et $x=a$.

$$\phi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0$$

$$\rightarrow \text{Solution : } \phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Conclu : $\phi(x=0) = 0$

(Caron $\phi(x=0)=0$)

$$\Leftrightarrow A + B = 0 \Leftrightarrow A = -B$$

$$\phi(x) = A \left(\frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i \sin(kx)} \right)$$

$$\boxed{\phi(x) = C \sin(kx)} \quad C \in \mathbb{C}$$

$$\text{On } \phi(x=a)=0 \Leftrightarrow C \sin(ka)=0$$

$$\begin{aligned} \sin(ka) &= 0 \Leftrightarrow ka = n\pi \quad n \in \mathbb{N}^* \\ &\Leftrightarrow k = \frac{n\pi}{a} \end{aligned}$$

$$\boxed{\phi(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)}$$

k quantifié $\Rightarrow E$ et λ quantifiés

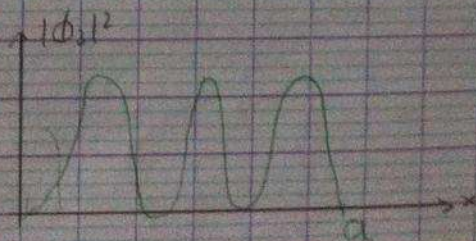
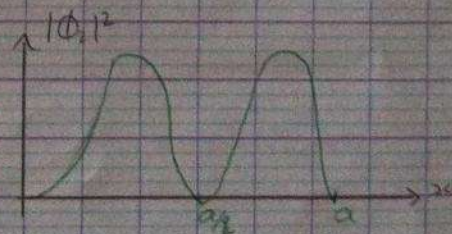
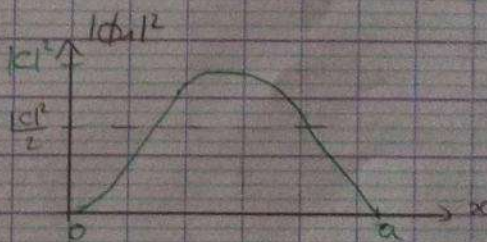
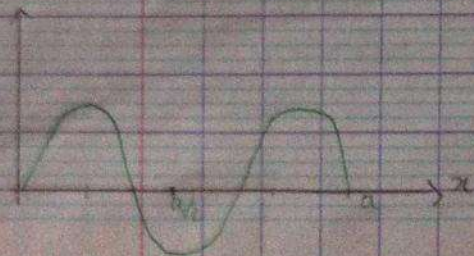
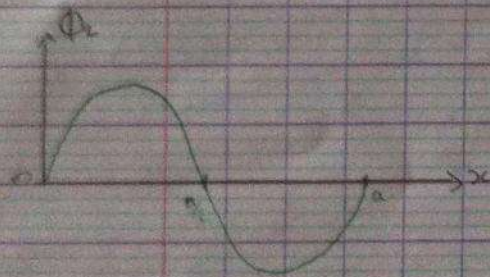
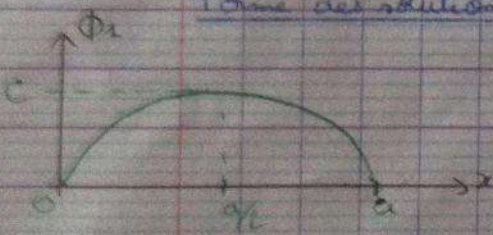
$$k = \frac{n\pi}{a}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2a\pi}{n\pi} = \frac{2a}{n} \Rightarrow \boxed{2a = n\lambda}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2 n^2}{a^2} \Rightarrow \boxed{E \propto \frac{n^2}{a^2}}$$

$$|\phi(x)|^2 = |C|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{|C|^2}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right)$$

Forme des solutions:



02094 (2) d) (1d stationnaire)

Déterminer la C : $\psi(x) = C \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

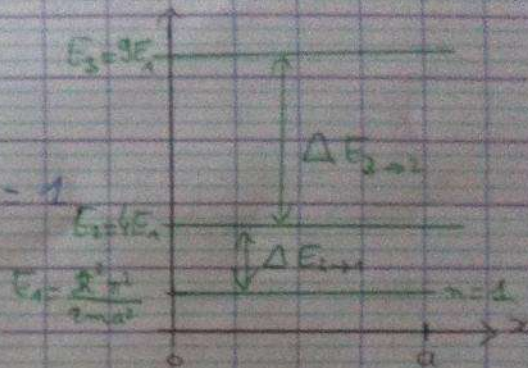
Condition de normalisation de $\psi(x)$

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^a |C|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

$$\Rightarrow |C|^2 \left[\int_0^a dx - \int_0^a \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx \right] = 1$$

$$\Rightarrow \frac{|C|^2}{2} \left[\left[x \right]_0^a - \frac{a}{2n\pi} \left[\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_0^a \right] = 1$$

$$\Rightarrow |C|^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

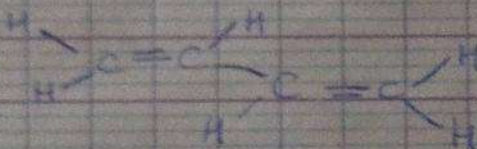


$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \text{ associé à } E_n = \frac{h^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}$$

Exercice 2 - les niveaux

Molécule butadiène $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$

4 e⁻ π



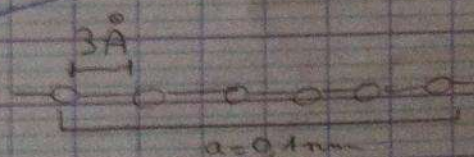
$$E_n = \frac{h^2 \pi^2}{2m a^2} \quad \left(\frac{0.376 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2}{a^2} \right)$$

$$a = 1,5 \text{ nm}$$

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= 0,167 \text{ eV} \\ E_2 &= 0,667 \text{ eV} \\ E_3 &= 1,50 \text{ eV} \end{aligned} \right\} \Delta E_{1,2} = 0,5 \text{ eV}$$

Niveaux distincts

e⁻ de un fil conducteur



$$E_1 = \frac{0,376}{(10^{-9})^2} = 3,76 \times 10^{-10} \text{ eV}$$

$$E_2 = 4E_1 = 1,50 \times 10^{-10} \text{ eV}$$

$$\Delta E = 1,12 \times 10^{-10} \text{ eV}$$

$$\Delta E \ll 1 \text{ eV}$$

3×10^5 atomes enchaînés

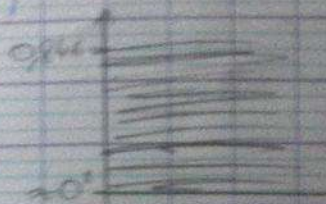
Bande d'ég-

1 e⁻ par atome

Dernière niveau occupé $n = 1,5 \times 10^5$

$$E_{n=1000} = E_n = \frac{0,376}{1} \cdot \frac{1}{(10^5)^2} = 0,376 \text{ eV}$$

Niv de Fermi



Etat stationnaire : particules quant^{es} dans puits de potentiel infini

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \forall x \in [0, a] \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Etat stationnaire $\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] \phi(x) = 0$$

Spectre d'aj discret : $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}$

Etat propres canoniques : $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad n \in \mathbb{N}^*$

$\phi_n(x)$ normés et orthogonaux entre eux. complexe conjugué

Soient 2 états stationnaires ϕ_n et $\phi_p \quad n \neq p$

Π scalaire $\langle \phi_p | \phi_n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_p^*(x) \phi_n(x) dx$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{p\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{1}{a} \left[\int_0^a \cos\left(\frac{(n-p)\pi x}{a}\right) dx - \int_0^a \cos\left(\frac{(n+p)\pi x}{a}\right) dx \right]$$

$$= \frac{1}{a} \left[\frac{a}{(n-p)\pi} \sin\left(\frac{(n-p)\pi x}{a}\right) \right]_0^a - \frac{1}{a} \left[\frac{a}{(n+p)\pi} \sin\left(\frac{(n+p)\pi x}{a}\right) \right]_0^a$$

0 $\forall n \neq p$

$$\langle \phi_p | \phi_n \rangle = 0 \quad \checkmark$$

$n, p \in \mathbb{N}^*$

Oscillateur harmonique

En méca classique système masse / ressort (sans frottement)



k raideur du ressort
N/m

Force opposé au déplacement: $F = -kx$ allongement du ressort

Travail nécessaire pour déplacer "m" de dx : $dV(x) = kx dx$

⇒ N° potentielle stockée ds le système

$$\hookrightarrow V(x) = \int_0^x dV(x') = \int_0^x kx' dx' = \frac{1}{2} kx^2$$

Equation du mvt (oscillant): accélération = dérivée 2^e de la vitesse

$$\sum \vec{F} = m\vec{a} \Rightarrow -kx = m \frac{d^2 x(t)}{dt^2}$$

On pose $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ pulsation

$$\Rightarrow \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

Solutⁿ de cette eq diff: $x(t) = A \cos(\omega t) + \varphi$

$$E = E_c + E_p$$

La conservatⁿ de l'énrg s'écrit: $E = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2$

Oscillateur harmonique quantique

Opérateur Hamiltonien (principe de correspondance)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$V(x)$

Etat stationn^r: $\Psi(x) = \Phi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$

Solutⁿ de l'eq de Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Phi(x) = E \Phi(x)$

$$t_q \quad \Phi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm \infty} 0$$

Résultats de ce puits sont de la forme

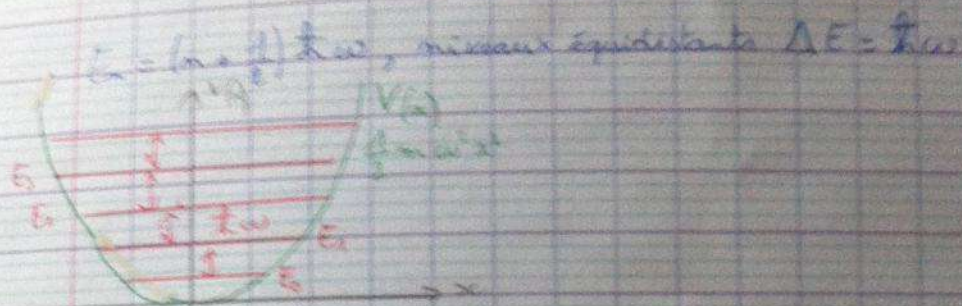
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \text{avec } n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{Quantifié}$$

$$\Phi_n(x) = N P_n(x) e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

poly

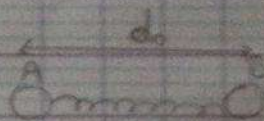
polygone -
 $\psi(x) = N e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega x}$

avec $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ longueur caractéristique



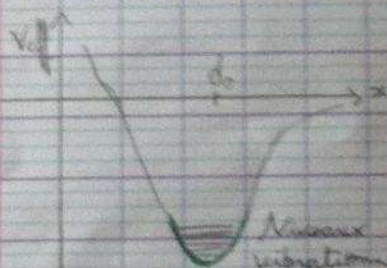
Application: Vibratⁿ molécul^l

Molécule diatomique



d_0 : distance d'équilibre, ressort pas tendu

A et B maintenant collés par un potentiel effectif V_{eff}



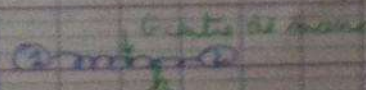
Niveaux vibrationnels

sondables par Spectroscopie infrarouge

Pour de faibles déplacements autour de d_0 → oscillateur harmonique valide.

$$V_{eff} = \frac{1}{2} \hbar \omega^2 x^2$$

En mécanique classique



Noyaux 1 et 2 de masse m_1, m_2

Ds le référentiel du centre de masse (pt qui ne bouge pas):

$$E = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2} \hbar \omega^2 x^2$$

On pose $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ masse réduite. Pt équivalent à une

masse μ qui vibre autour de $r = r_0 \Rightarrow p_1 = p_2 = p$

$$\text{D'où } E = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \hbar \omega^2 x^2$$

6/8

15-05-12

(I 1. Probl. stationn^{re} a) puits
(--1) Oscillateur harmoniq^{ue} quantique
Applicat^{ion}: Vibrat^{ion} molécul^{aire}

(1) ~~norm~~ (2)

D'où $E = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2} k x^2$

Passage en MQ: oscillateur quantique de masse μ

→ N^{os} permises: $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$ avec $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$
 $n \in \mathbb{N}$

Spectroscopie vibrationnelle

Transit^{ion} entre niveaux $E_n \Rightarrow$ Emission/Absorpt^{ion} de photons d'eng^{ergie} $\hbar \omega$

$E_x = \pm \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

Long. d'ondes: $\lambda = \frac{hc}{E_x} = 2\pi c \sqrt{\frac{\mu}{k}}$ $\lambda \in \text{IR}$

Exemple $M(C) = 12 \text{ g/mol}$ $M(O) = 16 \text{ g/mol}$
 $\Rightarrow \mu = 6,85 \text{ g/mol} = \frac{6,85 \text{ g}}{N_A}$ nbre d'Avogadro

Transit^{ion} entre niveaux vibrationnels mesurées $\rightarrow \lambda = 4,6 \mu\text{m}$

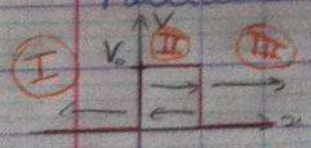
$\Rightarrow k = \frac{4\pi^2 c^2 \mu}{\lambda^2} = 1903 \text{ N/m}$

valeur conséquente

II. 1) b/ Barrière de potentiel effet tunnel

$V(x) = \begin{cases} V_0 & \forall x \in [0, a] \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$

Particules soumises à $V(x)$ se déplacent de $-\infty \rightarrow +\infty$, $0 \leq E \leq V_0$



En MQ, $\exists$ proba non nulle de traverser la barrière (effet tunnel)

Coeff de transmission de la barrière?

Eq de Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x) \phi(x) = E \phi(x)$

Calcul de chaque région I, II, III

Dans I et III $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) = (E - V_0) \phi(x)$

Dans II

Région I $\rightarrow \phi_I(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

II $\rightarrow \phi_{II}(x) = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}$

III $\rightarrow \phi_{III}(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$

$E > V(x)$, $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ (particule libre)

$E < V(x)$, $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

Conditi^o de raccordem^t de $\phi(x)$ en $x=0$ et en $x=a$

$$\begin{cases} -\phi(x) \text{ continue} \\ -\frac{d\phi(x)}{dx} \end{cases}$$

$$\phi'_I(x) = ik A_1 e^{ikx} - ik B_1 e^{-ikx}$$

$$A_3 \quad B_3 = 0$$

$$\phi'_{II}(x) = \beta A_2 e^{\beta x} - \beta B_2 e^{-\beta x}$$

Continuité en $x=0$: $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$ $-\phi$

(1₂) $ik A_1 - ik B_1 = \beta A_2 - \beta B_2$ $-\phi'$

Continuité en $x=a$: (1₃) $A_2 e^{\beta a} + B_2 e^{-\beta a} = A_3 e^{ika}$

(1₄) $\beta A_2 e^{\beta a} - \beta B_2 e^{-\beta a} = ik A_3 e^{ika}$

Proba de transmission:

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

$$(NB: R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 \text{ et } R + T = 1)$$

facteur de transmission

Classiquement $T=0$

A_3 et A_1 en fonction de B_2 :

$$ik l_1 + l_2 \rightarrow 2ik A_1 = (ik + \beta) A_2 + (ik - \beta) B_2$$

$$-\beta l_3 + l_4 \rightarrow -2\beta B_2 e^{-\beta a} = (-\beta + ik) A_3 e^{ika}$$

A_3 onde sortante
 A_1 — entrante

Estime sensible de $\pm$ par rapport à l'équation de la Sonde
Déplace la sonde à 1pm autour zéro de 22.

Le Microscope à effet tunnel
 $R \approx 2 \text{ \AA}$ distance inter-atomique
 cf ppt sur campus.

2. Système à 2 niveaux

Etats non stationnaires

Un état stationnaire s'écrit: $\Psi(x,t) = \Phi(x) e^{-iEt/\hbar}$ si $|\Psi(x,t)|^2$ indépendante de t .

Si on forme une combinaison linéaire d'états, s'écrit

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \underset{\text{coeff}}{\Psi_n(x,t)} \times C_n = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Eq de Schrödinger stationnaire

Ψ n'est pas un état stationnaire, pas solution de: $\hat{H}\Psi = E\Psi$

En l'occurrence: $\hat{H}\Psi = \hat{H}C_1\Psi_1 + \hat{H}C_2\Psi_2 + \dots + \hat{H}C_n\Psi_n$

Or Ψ_n solut de $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \Rightarrow \hat{H}\Psi = C_1E_1\Psi_1 + \dots + C_nE_n\Psi_n \neq E\Psi$

Cependant $\Psi(x,t)$ doit être normé: $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = 1$

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} (C_1^*\Psi_1^* + C_2^*\Psi_2^* + \dots + C_n^*\Psi_n^*) (C_1\Psi_1 + \dots + C_n\Psi_n) dx$$

2 types de termes: type: $C_1^*C_1\Psi_1^*\Psi_1 dx = |C_1|^2 \int |\Phi_1|^2 dx = |C_1|^2$ car Φ normé

type: $C_1^*C_2\Psi_1^*\Psi_2 dx = C_1^*C_2 \int \Phi_1^*\Phi_2 dx = 0$ car $\Phi_1 \perp \Phi_2$

$$\Rightarrow \int \Psi^*\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

$|C_n|^2$: proba d'obtenir la valeur E_n , lors de la mesure de E .
 Valeurs attendues de l'eng par mesure d'un grd nb de particules de l'état $\Psi(x,t)$.

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{H} \Psi dx$$

$$\text{avec } \hat{H}\Psi = C_1\hat{H}\Phi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + C_2\hat{H}\Phi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} + \dots = C_1E_1\Phi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + C_2E_2\Phi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} + \dots$$

et $\Phi_n \perp \Phi_p$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \sum |C_n|^2 E_n$$

7 MQ
8

22.05.12 II - 21 Système à 2 niveaux

(généralités)

Etat stationnaire: $\Psi_n(x, t) = \phi_n(x) \cdot e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$

Etat propre de $\hat{H}$: $\hat{H} \Psi_n(x, t) = E_n \Psi_n(x, t)$

Comb. linéaire d'états stationnaires: $\Psi(x, t) = \sum_n C_n \Psi_n(x, t)$ pas stationnaire

(...) $\langle E \rangle = \sum |C_n|^2 E_n$

Valeur attendue de l'eng lors de multiples mesures sur des particules préparées dans le même état $\Psi(x, t)$.

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx$$

Notation Dirac: $\langle E \rangle = \langle \sum_n C_n \Psi_n | \hat{H} | \sum_p C_p \Psi_p \rangle$

$$\Leftrightarrow \langle E \rangle = C_n^* C_p \sum_{n,p} \langle \Psi_n | \hat{H} | \Psi_p \rangle \quad \hat{H} \Psi_p = E_p \Psi_p$$

$$= C_n^* C_p \sum_{n,p} E_p \langle \Psi_n | \Psi_p \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n}$$

De m: $\langle E^2 \rangle = \int \Psi^* \hat{H} (\hat{H} \Psi) dx = \sum_n |C_n|^2 E_n^2$

Etat non stationnaire car $E_{\text{moy}} \text{ varie } \approx \text{ car } \Delta E \neq 0 = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$

$$\Delta E = \sqrt{\sum_n |C_n|^2 E_n^2 - (\sum_n |C_n|^2 E_n)^2} \neq 0$$

$\Delta E \neq 0 \Rightarrow$ état d'eng incertaine donc pas d'état stationnaire

Système à 2 niveaux: Exemple

2 états d'eng proches: E_1, E_2 , éloignés des autres ^{états} permis.

Ex: puits de potentiel 1D $E_n \propto n^2$

$(E_1, E_2) \Rightarrow (\phi_1, \phi_2)$

Soit $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \phi_2(x) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \right)$ état non-stationnaire

$$\langle E \rangle = |C_1|^2 E_1 + |C_2|^2 E_2 \quad C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$= \frac{1}{2} E_1 + \frac{1}{2} E_2 \quad E_1 = E_0 \text{ et } E_2 = 4E_0$$

$$= \frac{5}{2} E_0$$

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \frac{3}{2} E_0 = \frac{1}{2} (E_2 - E_1) \neq 0$$

Dépendance en tps de la densité de proba de présence :

$$|\Psi|^2 = \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t)$$

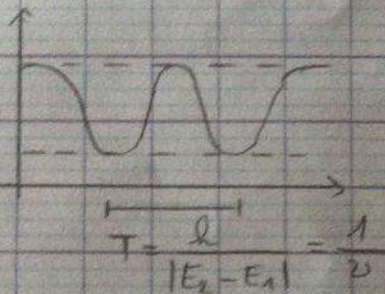
$$= \frac{1}{2} (\Phi_1^* e^{+i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \Phi_2^* e^{+i\frac{E_2 t}{\hbar}}) (\Phi_1 e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \Phi_2 e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}})$$

$$= \frac{1}{2} (|\Phi_1|^2 + |\Phi_2|^2 + \underbrace{\Phi_1^* \Phi_2}_{\Phi_1 \Phi_2} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + \underbrace{\Phi_2^* \Phi_1}_{\Phi_2 \Phi_1} e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar})$$

Φ_1 et Φ_2 réelles ici

$$\Rightarrow |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} (\Phi_1^2 + \Phi_2^2 + 2\Phi_1\Phi_2 \cos((E_2 - E_1)\frac{t}{\hbar}))$$

$|\Psi|^2$ oscille dans le temps à la pulsatⁿ : $\omega = \frac{|E_2 - E_1|}{\hbar}$



en fréquence : $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{|E_2 - E_1|}{h}$

Système à 2 niveaux perturbatⁿ

Evaluer l'effet d'interactⁿ internes (négligés jusqu'à alors) ou potentiel extérieur

⇒ couplage entre les 2 niveaux

Espace des fct d'ondes de dimension 2

base = $\{\Phi_1, \Phi_2\}$ avec Φ_1, Φ_2 états propres de $\hat{H}_0$, correspondant à E_1 et E_2 valeurs propres de $\hat{H}$:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{H}_0 \Phi_1 = E_1 \Phi_1 \\ \hat{H}_0 \Phi_2 = E_2 \Phi_2 \end{array} \right\} \rightarrow \text{1/1-forme matricielle : } \hat{H}_0 \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \text{ diagonal ds la base } \{\Phi_1, \Phi_2\}$$

Perturbatⁿ cod couplage

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & C e^{i\theta} \\ C e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{C réel} \\ \theta \text{ phase} \end{array}$$

L'hamiltonien du système devient :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} = \begin{pmatrix} E_1 & C e^{i\theta} \\ C e^{-i\theta} & E_2 \end{pmatrix}$$

Eq de Schrödinger $\hat{H} \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$

Casques: E_1 et E_2 ne sont plus les seuls propres du système

$\rightarrow E^+$ et E^- valeurs propres de $\hat{H}$
 Φ_1 et Φ_2 ne sont plus des états stationnaires
 $\rightarrow \Phi^+$ et Φ^- états propres de $\hat{H}$

$$\left. \begin{array}{l} \hat{H} \Phi^+ = E^+ \Phi^+ \\ \hat{H} \Phi^- = E^- \Phi^- \end{array} \right\}$$

3) Systèmes à 2 niveaux: le spin $1/2$

Prelude: Moment cinétique orbital et moment cinétique du spin

Moment cinétique classique

$$\vec{L} = m \vec{r} \wedge \vec{v}$$



$$\|\vec{L}\| = m r v \sin \theta$$

$$\vec{L} = \vec{0} \text{ si } \vec{v} \parallel \vec{r} \text{ car } \sin 0 = 0$$

$$[L] = [h] = M L^2 T^{-1} = \text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$$

1 particule quantique possiede:

- 1 moment cinétique orbital (si $\vec{r}$ non $\parallel$ à $\vec{v}$)
 - de spin (intrinsèque)
- analogie classique $\vec{S}$ "spin"

$\vec{L}$ a 3 composantes et une norme $\|\vec{L}\|$.

En MQ à cause des incertitudes d'Heisenberg, il est possible de f^{ix} une mesure précise pour 1 seule composante

Description par 2 nombres quantiques

Notation: Moment cinétique orbital $\rightarrow l, m_l$

spin $\rightarrow s, m_s$

combinaison orbital/spin $\rightarrow j, m_j$

Les seuls valeurs mesurables précisément sont:

pour norme de $\vec{L}$: $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ avec $l = 0, 1, 2, \dots$

pour l fixe: $(2l+1)$ valeurs d'une composante (soit L_z)

Valeurs de L_z : $L_z = m_l \hbar$

avec $m_l = +l, +(l-1), +(l-2), \dots, -l$

pour la p.m. $\Rightarrow$ valeur $s=0,1,2$
 pour la p.m. (s.e.) valeurs de s , $s = m, \frac{1}{2}$

3 particules de p.m. $s=0,1,2$ BOSONS $\rightarrow H$
4 valeurs: $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ FERMIONS
 $\hookrightarrow e, p$

$s=0 \rightarrow m = -1, 0, 1$
 $s=1 \rightarrow m = -1, 0, 1$

• Pour calculer p.m. s

$$J = J_1 + J_2 + \dots + J_n$$

$$J_z = m_j \hbar$$

$$j = (l, s), (l, s = 0)$$

$$l, s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$$

$$m_j = -j, -(j-1), \dots, 0, \dots, (j-1), j$$

(2j+1) valeurs

Exemple $l=1$

$$s = \frac{1}{2} \Rightarrow j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \quad m_j = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

$$m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$$

$$l=1 \quad j=0, 1, 2$$

$$s=\frac{1}{2}$$

$$j=0 \rightarrow m_j=0$$

$$l=1, s=\frac{1}{2}$$

$$j=1 \rightarrow m_j = -1, 0, 1$$

$$l=1, s=\frac{1}{2}$$

$$j=2 \rightarrow m_j = -2, -1, 0, 1, 2$$

3+3 possibilités

9 possibilités

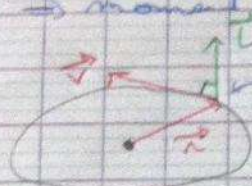
22.05.12

(3. Syst à 2 niveaux spin 1/2)

• Moment angulaire et moment magnétique

Toute particule chargée en rotation (classique)

⇒ moment cinétique $\vec{p} \propto \vec{L}$



$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = m \vec{r} \wedge \vec{v} \quad \text{et } \vec{L} \parallel \vec{\omega}$$

Boucle de courant élémentaire de moment magnétique:

$$\vec{\mu} = I \cdot S \cdot \vec{u}$$

↑ ↑
courant ligne

$$\left. \begin{array}{l} I = \frac{qV}{2\pi r} \\ S = \pi r^2 \end{array} \right\} \Rightarrow \vec{\mu} = \frac{qVr}{2} \vec{u} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

Soit rapport gyromagnétique: $\gamma_0 = \frac{q}{2m} \Rightarrow \boxed{\vec{\mu} = \gamma_0 \vec{L}}$

En MQ: $\vec{\mu} \propto \vec{L}$ Vrai

• Electron: $\vec{\mu}(\text{orbite}) = -\frac{e}{2m} \vec{L} \rightarrow \mu_B = -\frac{e}{2m} \hbar = -\frac{e \hbar}{2m}$

$\vec{\mu}(\text{spin}) = -\frac{2e}{2m} \vec{S} \rightarrow \mu_B = -\frac{2e}{2m} \hbar = -\frac{e \hbar}{m}$

NB: $\mu_{\text{spin}} = 2 \mu_{\text{orbite}}$

Particule composite (atome, noyau)

$\vec{\mu} = -g \cdot \frac{e}{2m} \vec{J} \rightarrow \mu_B = -g \frac{e}{2m} \hbar = -g \frac{e \hbar}{2m}$

$g \in [1, 2]$ de l'atome

Noyau atomique

$\vec{\mu}$ en référence au proton ($m_p, +e$)

$\vec{\mu} = g \cdot \frac{e}{2m_p} \vec{I} \rightarrow \mu_N = g \frac{e \hbar}{2m_p}$

On définit :

• Moment magnétique électronique :

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m_e} = 9,274 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1} \quad \text{magneton de Bohr}$$

• ————— nucléaire :

$$\mu_N = \frac{e \hbar}{2 m_p} = 5,05 \times 10^{-27} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$$

NB : $g(\text{proton}) = 2 \times (2,79)$

$g(\text{neutron}) = 2 \times (-1,93)$

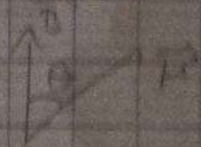
nombre des pt de spin de la charge par des moments magnétiques

Energies magnétiques permises :

Interact entre moment magnétique $\vec{\mu}$ et chp magnétique $\vec{B}$

$$W_M = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = - \begin{pmatrix} \mu_x \\ \mu_y \\ \mu_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}$$

Ex : $\vec{B} // z \Rightarrow B \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow W_M = -\mu_z B$



En mécanique classique $\mu \in [-\mu_0, +\mu_0]$

$\Rightarrow W_M \in [-\mu_0 B, +\mu_0 B]$ continuum d'aj possible

En MQ, μ_z quantifié

Ex : $\mu_z = -g \mu_0 m_j \Rightarrow W_M = +g \mu_0 B m_j$

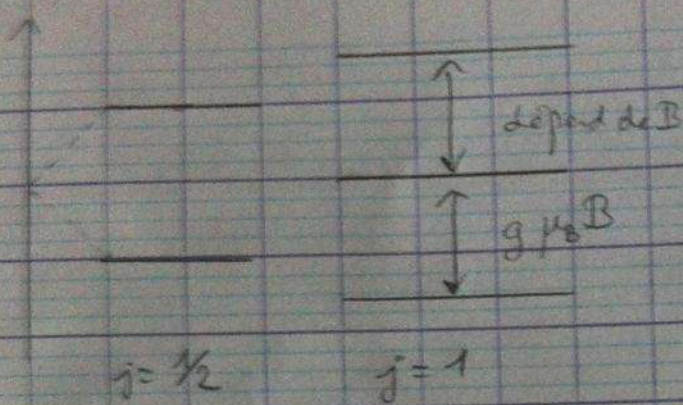
(2g+1) valeurs possibles

• Si $g = 1/2$ alors $m_j = +1/2, -1/2$

Par interaction avec le chp magnétique B_z on aura 2 niveaux décalés par $W_M = \pm 1/2 g \mu_0 B$

• Si $g = 1$ alors $m_j = -1, 0, 1$

Alors 3 niveaux $W_M = \begin{cases} g \mu_0 B \\ 0 \\ -g \mu_0 B \end{cases}$



$j = 3/2 \rightarrow 4 \text{ niveaux}$