Fourbi Mathématique

Formules trigonométriques

- $\cos(\alpha \pm \beta) = \cos\alpha\cos\beta \mp \sin\alpha\sin\beta$
- $\sin(\alpha \pm \beta) = \sin\alpha\cos\beta \pm \sin\beta\cos\alpha$
- $\tan(\alpha \pm \beta) = \frac{\tan\alpha \pm \tan\beta}{1 \mp \tan\alpha\tan\beta}$
- $\sin(2\alpha) = 2\sin\alpha\cos\alpha$
- $\cos(2\alpha) = \cos^2\alpha - \sin^2\alpha = 1 - 2\sin^2\alpha = 2\cos^2\alpha$
- $\frac{1+\cos\alpha}{2} = \cos^2(\alpha/2)$; $\frac{1-\cos\alpha}{2} = \sin^2(\alpha/2)$
- $\cos\alpha\cos\beta = 1/2(\cos(\alpha+\beta) + \cos(\alpha-\beta))$
- $\cos\alpha\sin\beta = 1/2(\sin(\alpha+\beta) - \sin(\alpha-\beta))$
- $\sin\alpha\sin\beta = 1/2(\cos(\alpha-\beta) - \cos(\alpha+\beta))$

Formules d'Euler + Nombres complexes

- $\cos(x) = \frac{e^{ix}+e^{-ix}}{2}$ $\quad \sin(x) = \frac{e^{ix}-e^{-ix}}{2i}$
- $\cosh(x) = \frac{e^{x}+e^{-x}}{2}$ $\quad \sinh(x) = \frac{e^{x}-e^{-x}}{2}$
- $e^{i(\pi+2k\pi)} = -1 \quad e^{i\cdot 2k\pi} = 1 \quad k \in \mathbb{Z}$
- $e^{i(\frac{\pi}{2}+2k\pi)} = i \quad e^{i(-\frac{\pi}{2}+2k\pi)} = -i \quad k \in \mathbb{Z}$
- $\sqrt{i} = \frac{1+i}{\sqrt{2}} \quad \frac{1}{i} = -i$

Intégrales/Dérivées de fonctions trigonométriques

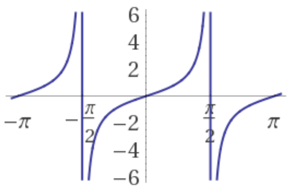
- $\int \sin^2(ax)\mathrm{d}x = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a}$
- $\int \cos^2(ax)\mathrm{d}x = \frac{x}{2} + \frac{\sin(2ax)}{4a}$
- $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\tanh(x) = \frac{1}{\cosh^2(x)} = \mathrm{sech}^2(x)$ (valable pour tan)

Développement limité des fonctions trigo. autour de 0

- $\sin(x) \simeq x - \frac{x^3}{6}$; $\cos(x) \simeq 1 - \frac{x^2}{2}$; $\tan(x) \simeq x + \frac{x^3}{3}$
- $\cot(x) \simeq \frac{1}{x} - \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45}$; $\sec(x) \simeq 1 + \frac{x^2}{2} + \frac{5x^4}{24}$
- $\sinh(x) \simeq x + \frac{x^3}{6}$; $\cosh(x) \simeq 1 + \frac{x^2}{2}$; $\tanh(x) \simeq x - \frac{x^3}{3}$
- $\coth(x) \simeq \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45}$; $\mathrm{sech}(x) \simeq 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{5x^4}{24}$

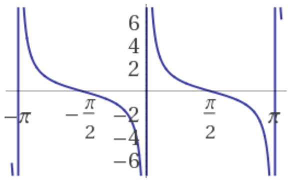
Dessins des différentes fonctions trigonométriques

- $\tan(x)$



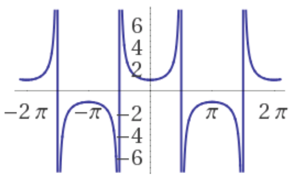
(x from −3 to 3)

- $\cot(x) = \frac{1}{\tan(x)}$



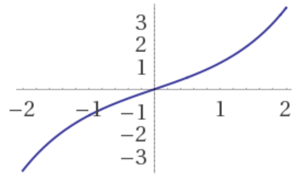
(x from −3 to 3)

- $\sec(x) = \frac{1}{\cos(x)}$



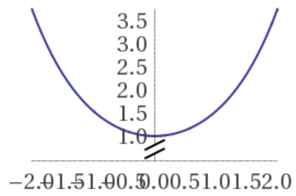
(x from −6 to 6)

- $\sinh(x)$



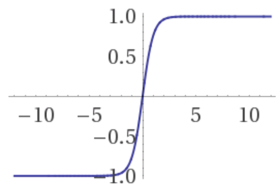
(x from −2 to 2)

- $\cosh(x)$



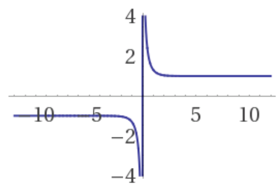
(x from −2 to 2)

- $\tanh(x)$



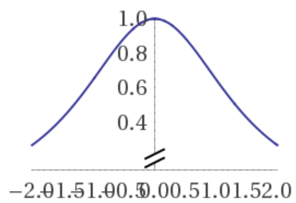
(x from −10 to 10)

- $\coth(x) = \frac{1}{\tanh(x)}$

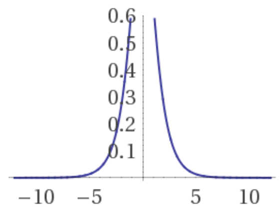


(x from −10 to 10)

- $\mathrm{sech}(x) = \frac{1}{\cosh(x)}$



(x from −2 to 2)



(x from −10 to 10)

Fonction de Dirac

- Dimension de $\delta(x)$ est $[m^{-1}]$
- $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)\mathrm{d}x = f(x_0)$
- $\delta(f(x) - f_0) = \frac{1}{|f_0'|}\delta(x-x_0)$ si $f_0 = f(x_0)$
- $\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax}\mathrm{d}x = \delta(a)$
- $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$

Relations d'Einstein

- $\epsilon = h\nu, E = nh\nu, p = h/\lambda = h\nu/c$

Équation de Schrödinger

- L'hamiltonien est défini par : $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V$
- Eq. Schrö stationnaire : $H\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$
- Eq. Schrö non-stationnaire : $H\psi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)$

Relation d'incertitude d'Heisenberg

- $\Delta x\Delta p \geqslant \hbar/2$

Polynôme de Hermite

- Soit : $H_{n+1}(q) = 2qH_n(q) - 2nH_{n-1}(q)$
- Soit : $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}H_n(q) = 2nH_{n-1}(q)$

Mécanique matricielle d'Heisenberg

- Eq. Schrö : $\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)$ avec $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + V$
- $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$ si $\hat{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$
- Pour l'oscillateur harmonique : $V = 1/2m\omega^2\hat{x}^2$
- L'hamiltonien est hermitien/auto-adjoint. Il doit vérifier que $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$

Commutateurs

- $[\hat{x}\hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar\hat{I}$
- Relations sur les commutateurs ($\hat{A}$,$\hat{B}$ et $\hat{C}$: opérateurs hermitiques) :
  - $[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = -[\hat{A},\hat{B}] = [\hat{B},\hat{A}] = [\hat{A}^\dagger,\hat{B}^\dagger]$
  - $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$
  - $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$
- Incertitude : $\Delta\hat{A}_{|\psi\rangle}\Delta\hat{B}_{|\psi\rangle} \geqslant 1/2\,|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle|$
- Si $\hat{A} \equiv \hat{A}(\hat{u})$ et $\hat{B} \equiv \hat{B}(\hat{u})$. Alors $[\hat{A},\hat{B}] = 0$ et ils ont la même base d'états propres.

États propres de l'Hamiltonien

- $|\phi_n\rangle$ état propre si $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$
  - $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ $\{+b\}$ est l'énergie propre si $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + 1/2m\omega^2\hat{x}^2$ $\{+b\}$ avec $b = cste$
- en fct du temps (par Schrö) : $|\phi_n\rangle(t) = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}|\phi_n\rangle(0)$
- Attention, pour une particule dans une boîte, on utilise : $E_n = \frac{\hbar^2k_n^2}{2m}$ Sinon, $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

État cohérent de l'Hamiltonien

- $|z\rangle = e^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|\phi_n\rangle$
- $|z\rangle(t) = e^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|\phi_n\rangle(t)$

=> $|z\rangle(t) = e^{-|z|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|\phi_n\rangle\cdot e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$
si $|z\rangle(0) = |z\rangle$ <=> $|\phi_n\rangle(0) = |\phi_n\rangle$

- Application des opérateurs de création et d'annihilation : $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$; $\hat{a}^\dagger|z\rangle = z^*|z\rangle$

Opérateurs de création et d'annihilation

- annihilation : $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}$
- création : $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}$
- $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$
- $\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})$
- $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2) = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1/2)$
- $\left(\hat{a}^\dagger \pm \hat{a}\right)^2 = \hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} \pm \left(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1\right)$
- Application sur les états propres :
  - $\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$
  - $\hat{a}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$
  - $\hat{a}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{a}^\dagger$
  - $\hat{a}|\phi_0\rangle = \langle\phi_0|\hat{a}^\dagger = 0$
  - $|\phi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\phi_0\rangle$
- Commutations :
  - $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$
  - $[\hat{a}^{\dagger 2},\hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^2,\hat{a}] = 0$
  - $[\hat{a}^{\dagger 2},\hat{a}] = -2\hat{a}^\dagger$
  - $[\hat{a}^2,\hat{a}^\dagger] = 2\hat{a}$
- Opérateur $\hat{N}$
  - $\hat{N}$ est défini par $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}$ tq $\hat{N}|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$
  - $[\hat{N},\hat{a}] = -\hat{a}$
  - $[\hat{N},\hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$
- "Jeux" avec des états
  - $\langle\psi|\hat{a}\hat{a}|\psi\rangle = \left(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle\right)^\dagger\hat{a}|\psi\rangle$
  - $\langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = (\hat{a}|\psi\rangle)^\dagger\hat{a}|\psi\rangle$
  - $\langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (\langle\psi|\hat{a}\hat{a}|\psi\rangle)^*$
  - $\langle\psi|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \left(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle\right)^\dagger\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$

Oscillateur harmonique

- On définit : $\phi_n(x) = \langle x|\phi_n\rangle$
- $\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$
- En utilisant la formule $|\phi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|\phi_0\rangle$ avec la définition de $\hat{a}^\dagger$ et la représentation $\hat{x}$, on peut poser :
$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\phi_0(x)$
- Représentation avec les polynômes d'Hermite :
$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n! x_0}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$ avec $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m\omega}}$

ECOC

- Un Ensemble Complet d'Observable qui Commutent est défini par : Soit $\hat{A}$,$\hat{B}$,$\hat{C}$,... tq $[\hat{A},\hat{B}] = [\hat{A},\hat{C}] = [\hat{B},\hat{C}] = \ldots = 0$ et $\nexists\hat{W}$ tq $[\hat{W},\hat{A}] = \ldots = 0$ et $\hat{W}$ n'est pas fonction de $\hat{A}$,$\hat{B}$,$\hat{C}$,...
- $\hat{x}$ est un ECOC à lui tout seul.

Postulats de la mécanique quantique

- I. L'état d'un système physique est représenté par un vecteur dans un espace vectoriel linéaire de dimension infinie.
- II. Chaque quantité physique "observable" (obtenu avec mesure) est représenté par un opérateur linéaire hermitique (auto-adjoint) agissant dans l'espace de Hilbert des états.
- III. Si on effectue la mesure d'une quantité représenté par l'opérateur hermitique $\hat{A}$ sur le système physique représenté par le vecteur $|\psi\rangle$, les seules valeurs possibles fournies par la mesure sont les valeurs propres de $\hat{A}$. La théorie donne l'espérance qui est définie par : $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$.
- IV. Les opérateurs hermitiques de la coordonnée $\hat{x}$ et de la quantité de mouvement $\hat{p}$ obéissent à la règle de commutation : $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\hat{I}$
- V. L'évolution d'un système physique décrit par un état $|\phi(t)\rangle$, au cours du temps, est régie par l'équation de Schrödinger dépendante du temps :
$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x},\hat{p},t)|\phi(t)\rangle$
ou, au sens de l'équation de Schrödinger pour la fct d'onde $\phi(x,t) = \langle x|\phi\rangle$:
$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) = H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right)\phi(x,t)$

Processus de Mesure

- Probabilité de mesurer la valeur propre a_n de l'opérateur $\hat{A}$ est : $|\langle a_n|\psi\rangle|^2$
- Si on mesure la valeur propre a_n, le système se trouve maintenant dans létat $|a_n\rangle$

Calcul Probabilité et moyenne

- On se trouve dans l'état $\psi(x)$. On veut calculer la probabilité de se trouver dans le nouvel état $\phi(x)$. On a : $P = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$
- Calculer la moyenne de l'opérateur $\hat{A}$ dans l'état $|\psi\rangle$:
  $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ ou
  $\langle\hat{A}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A(x)\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x$
  Avec $A(x)$ représentation de $\hat{A}$ dans $|\hat{x}\rangle$
- Si $\psi(x) = \Psi(x, t=0)$ avec $\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)\phi_n(x)$, alors
  $c_n(0) = \langle\psi|\phi_n\rangle$

Représentation $\hat{x}$ et $\hat{p}$

Représentation de $\hat{x}$	Représentation de $\hat{p}$
$\hat{x}\lvert\phi_x\rangle = x\lvert\phi_x\rangle$	$\hat{p}\lvert\phi_p\rangle = p\lvert\phi_p\rangle$
$\langle\phi_x\lvert\phi_{x'}\rangle = \delta(x-x')$	$\langle\phi_p\lvert\phi_{p'}\rangle = \delta(\frac{p-p'}{\hbar})$
$\langle\phi_x\lvert\phi\rangle \equiv \phi(x)$	$\langle\phi_p\lvert\phi\rangle \equiv \tilde{\phi}(p)$
$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\lvert\phi_x\rangle\langle\phi_x\rvert = \hat{I}$	$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\lvert\phi_p\rangle\langle\phi_p\rvert = \hat{I}$
$\hat{p}\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)$	$\hat{x}\tilde{\phi}(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\phi}(p)$
$\hat{x}\phi(x) = x\phi(x)$	$\hat{p}\tilde{\phi}(p) = p\tilde{\phi}(p)$

- $\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p e^{\frac{ipx}{\hbar}}\tilde{\phi}(p)$
- $\tilde{\phi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\phi(x)$
- $\langle\phi_x|\phi_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$
- Schrödinger :
  - Repr. $\hat{x}$: $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\psi(x) = E\psi(x)$
  - Repr. $\hat{p}$: $\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\psi(p) = E\psi(p)$

Dégénérescence et états liés

- Etat lié : Il faut que la fonction d'onde ψ soit **carré-sommable**, i.e. $\int_{\mathbb{R}}|\psi|^2\mathrm{d}x < \infty$. On utilise souvent : $\psi(\pm\infty) = 0$
- Système non dégénéré : chaque état a une énergie distincte.
- Système dégénéré : plusieurs états ont la même énergie.

Évolution temporelle

Opérateur d'évolution

- $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t')|\psi(t')\rangle$
- $\hat{U}(t,t')$ satisfait l'éq. de Schrödinger. Il est inversbile et unitaire ($\hat{U}^{-1}(t,t') = \hat{U}^{\dagger}(t,t')$)

Point de vue d'Heisenberg

- Sol. de l'équation différentielle suivante :
  $\frac{\mathrm{d}\hat{A}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)\right] + \left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right)_H$
  est $\hat{A}_H(t) = \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\hat{A}(t)\hat{U}(t,t_0)$, avec $\hat{H}_H(t) = \hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$

Mesures et évolution temporelle

- Les valeurs propre de $\hat{A}_H(t)$ sont les valeurs propre de $\hat{A}(t)$.
- La probabilité de mesurer a_m au temps t est :
  $a_m(t) = |\langle\hat{U}^{\dagger}(t,t_0)\phi_m|\psi(t_0)\rangle|^2 = |\langle\phi_m|\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle|^2$

$\hat{H}$ indépendant du temps

- $\hat{U}(t,t') = exp(-i\hat{H}(t-t')/\hbar)$
  $= \sum_n exp(-iE_n(t-t')/\hbar)|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$
- En utilisant Schrödinger et en posant $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle$, on obtient :
  $|\psi(t)\rangle = \sum_n exp(-iE_n(t-t_0)/\hbar)c_n(t_0)|\phi_n\rangle$

Théorème d'Ehrenfest

- $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{A}_H(t)|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)\right]|\psi\rangle$
- donc $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}(t)\rangle$ et $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}(t)\rangle = \langle F(\boldsymbol{x})\rangle$

Problème simple à 1D

Particule libre - Paquet d'onde

- Hamiltonien : $\hat{H} = \hat{p}^2/2m \Rightarrow \hat{H}|p\rangle = p^2/2m|p\rangle$
- Paquet d'onde :
  - Eq. stationnaire Schrö : $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) = \hat{H}\phi(x,t)$
  - $\phi_p(x,t) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ip^2t/2m\hbar}$
  - $\phi(x,t) = \int\mathrm{d}pf(p)\phi_p(x,t)$ avec $f(p) = \int\mathrm{d}x'\frac{\phi(x',t=0)}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}pe^{-ip^2t/2m-i(x'-x)p/\hbar}$
    - Plus simple dans représentation $\{|p\rangle\}$: $f(p) = \overline{\phi}(p,t=0)$ et $\overline{\phi}(p,t) = f(p)e^{-ip^2t/2m\hbar}$
  - $\phi(x,t) = \int\mathrm{d}x'\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}e^{-i\pi/4}e^{i(x'-x)^2m/2\hbar t}\phi(x',t=0)$. Parfois, $\phi(x',t=0) = \delta(x-x_0)$
- opérateur d'évolution : $\langle x|\hat{U}(t,t_0)|x'\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar}}e^{-i\pi/4}e^{i(x-x')^2m/2\hbar t}$
- Paquet d'one Gaussien :
  - $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}}\frac{1}{(2\pi)^{1/4}}e^{ip_0x/\hbar}e^{-x^2/4\sigma^2}$
  - $\overline{\psi}(p) = \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}(p_0-p)^2} \equiv f(p)$
  - $\Delta\hat{x}_{|\psi(x,t)\rangle} = \sigma\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{4\sigma^4m^2}} \Rightarrow$ s'élargit.

Potentiel constant par morceaux

- Éq. Schrö 1D, stat., $V \neq V(x)$: $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = (E-V)\psi(x)$
  - $E > V$ $\psi(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar}$, $p = \sqrt{2m(E-V}$
  - $E < V$ $\psi(x) = Ae^{x/l} + Be^{-x/l}$, $l = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E}}$
  - $E = V$ $\psi(x) = Ax + B$
- Si on demande explicitement de travailler avec des **fonctions paires/impaires**, poser :
  - $E > V$ $\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$
  - $E < V$ $\psi(x) = A\cosh(kx) + B\sinh(kx)$
- sin/sinh : impaires ; cos/cosh : paires
- Propriété fonctions paires/impaires :
  - Paires : $f(-x) = f(x)$ et $f'(-x) = -f'(x)$
  - Impaires : $f(-x) = -f(x)$ et $f'(-x) = f'(x)$
- Si la région n'est pas centrée en 0, on doit poser (pour $E > V$, par exemple) :
  $\psi(x) = Ae^{-ik(x-\delta)} + Be^{ik(x-\delta)}$
  Si $V = \infty$ en $x = a$, on choisira $\delta = a$

Conditions de raccordements

- Raccordement si V fait un saut en $x = L$:
  $\psi_I(L) = \psi_{II}(L)$ et $\psi_I'(L) = \psi_{II}'(L)$
- Si $V(K) = \infty$, il faut poser $\psi(K) = 0$
- Si $V(x)$ a un pic en x_o, i.e. $\rangle mV_0\delta(x-x_0)$:
  $\psi(x_0^+) = \psi(x_0^-)$ et $\psi'(x_0^+) - \psi'(x_0^-) = \pm\frac{2m}{\hbar^2}V_0\psi(x_o)$
  Tiré de l'intégration de l'éq de Schrö entre $-\varepsilon$ et ε, $\varepsilon \to 0$.

Puit de potentiel carré

- $V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ V_2 & \text{si } x < x_1 \text{ ou } x > x_2 \end{cases}$
  - Si $V_2 = \infty$, on a : $E_n = V_1 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(x_2-x_1)^2}n^2$
    $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{x_2-x_1}}\sin\left(n\pi\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)$

Marche de potentiel

- $V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{si } x < 0 \\ V_2 > V_1 & \text{si } x > 0 \end{cases}$
  - $V_1 < E < V_2$: $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & \text{si } x < 0 \\ Ce^{-x/l} & \text{si } x > 0 \end{cases}$
    On a pas de coeff. $De^{x/l}$ car l'onde vient de la gauche. L'énergie n'est pas quantifiée.
  - $E > V_2$: $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ip_1x/\hbar} + Be^{-ip_1x/\hbar} & \text{si } x < 0 \\ Ce^{ip_2x/\hbar} + De^{ip_2x/\hbar} & \text{si } x > 0 \end{cases}$
    Si on choisit onde qui vient de la gauche, $D = 0$ et on obtient :
    coeff. de réflexion : $R = \frac{B}{A}$
    coeff. de transmission : $T = \frac{C}{A}$
    Ils vérifient : $p_1(1-R^2) = p_2T^2$ ou $|R|^2 + |T|^2 = 1$

Effet Tunnel

- $V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{si } x < x_1 \\ V_2 > V_1 & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ V_1 & \text{si } x > x_2 \end{cases}$
  - $V_1 < E < V_2$ et si on choisit onde qui vient de la gauche :
    $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} & \text{si } x < x_1 \\ Ce^{x/l} + De^{-x/l} & \text{si } x_1 < x < x_2 \\ Ee^{ipx/\hbar} & \text{si } x > x_2 \end{cases}$

Mouvement dans potentiel central

Opérateur moment cinétique et hamiltonien

- $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \wedge \hat{\boldsymbol{p}} = \begin{pmatrix} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{pmatrix}$
- $\hat{L}_j = \hat{L}_j^{\dagger}$, $j = x, y, z$
- $[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\hat{x}_k$
- $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\hat{p}_k$
- $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ et $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ commutent avec $\hat{H}$
- $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2mr^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2 + V(r)$
- $\hat{H}\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi(r)) + \frac{1}{2mr^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r)$
- Si on définit $H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r)$, alors
  $\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$
- $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon^{ijk}\hat{L}_k \Rightarrow \boldsymbol{L} \wedge \boldsymbol{L} = i\hbar\boldsymbol{L}$
- valeurs propres de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$: $\hbar^2L(L+1)$, $L = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$
- valeurs propres de $\hat{L}_z$: $\hbar M$, $M = -L, -L+1, \ldots, L$

Moment cinétique orbital

- On passe tout en coordonnées sphériques :
- $\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$
- $\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$
- $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$
- $\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2\left(-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$

Harmoniques sphériques

- On pose $Y_l^m(\theta,\varphi)$ les fonctions états propres de $\hat{L}_z$ et de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$.
- On peut poser : $Y_l^m(\theta,\varphi) = F_l^m(\theta)e^{im\phi}$

Mouvement dans un potentiel coulombien

- Donc dans $\mathbb{R}^3$: $\psi(r,\theta,\phi) = \psi_l(r)\cdot Y_l^m(\theta,\varphi)$
- Valeurs propres dans l'état $\psi(r,\theta,\phi)$:
  $\langle r,\theta,\phi|\hat{\boldsymbol{L}}^2|\psi(r,\theta,\phi)\rangle = \hbar^2l(l+1)\psi(r,\theta,\phi)$
  $\langle r,\theta,\phi|\hat{L}_z|\psi(r,\theta,\phi)\rangle = \hbar m\psi(r,\theta,\phi)$
- En remplaçant $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ par $\hbar^2l(l+1)$ et $u(r) = r\cdot\psi_l(r)$:
  $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r)$
  En remettant la fonction $\psi_l(r)$, avec $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$:
  $\psi_l''(r) + 2\frac{\psi_l'(r)}{r} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi_l(r) = 0$

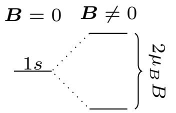
Moment Magnétique

- Le moment magnétique lève la dégénérescence ! Il est défini par :
- $\hat{\boldsymbol{M}} = \frac{\mu_B}{\hbar}\hat{\boldsymbol{L}}$ avec $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ le magnéton de Bohr.

Spin

Introduction

- Levée de dégénérescence :



- électron possède moment magnétique intrinsèque : $\boldsymbol{\mu}_s = g\mu_B\frac{\boldsymbol{S}}{\hbar}$ avec $\boldsymbol{S}$ un opérateur de moment magnétique ayant $l = \frac{1}{2}$ et $m = \pm\frac{1}{2}$
- $g \simeq 2.00$

Formalisme du spin $\frac{1}{2}$

- $\left.\begin{array}{l} |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle \\ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle \end{array}\right\}$ états propres de $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ et $\hat{S}_z$ $\rightarrow S_z = \pm\frac{\hbar}{2}$ et $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$

Matrices de Pauli

- On définit :
  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- Les vecteurs propres des matrices sont :
  $v_x^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$; $v_x^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
  $v_y^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$; $v_y^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$
  $v_z^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; $v_z^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
- Propriétés des matrices de Pauli :
  1. $\sigma_i^2 = Id$
  2. $Tr(\sigma_i) = 0$
  3. $det(\sigma_i) = -1$
  4. $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon^{ijk}\sigma_k$
  5. $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$
  6. $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\cdot Id + i\epsilon^{ijk}\sigma_k$
  7. Valeurs propres de toutes les matrices : ± 1
- On utilise parfois les matrices $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ avec $i = x, y, z$