

MQI: Cours 4

Equation de Schrödinger

Stationnaire(1D):

Puits et Barrières de potentiel,

&

Notations de Dirac: complément

Mouvements classiques dans un potentiel 1D

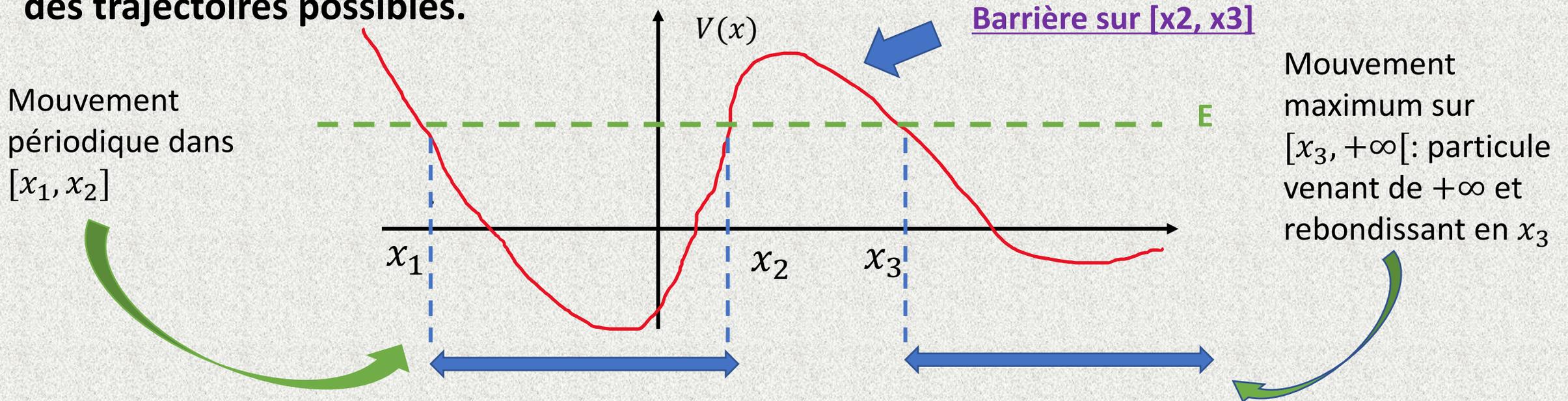
$$H(x, p) = \frac{1}{2m} p^2 + V(x)$$

Au cours du temps $H(x_t, p_t) = E$ (énergie) est conservée.



$$\frac{1}{2m} p^2 \geq 0 \implies E \geq V(x_t) \geq V_{min} = \min_{x \in \mathbb{R}} V(x)$$

Pour une énergie E donnée, cette inégalité permet de connaître les domaines en « x » des trajectoires possibles.



Mouvements classiques dans un potentiel 1D

Types de potentiel

On distingue deux grands types de potentiel:

- Les potentiels tels que $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = +\infty$ **et** $\lim_{x \rightarrow +\infty} V(x) = +\infty$ sont appelés **potentiels confinants**. **Dans ce cas $\forall E$, la trajectoire est bornée et périodique.**
- Les potentiels tels que $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = V_0$ **ou** $\lim_{x \rightarrow +\infty} V(x) = V_0$ sont appelés **potentiels non-confinants**. Dans ce cas $\forall E \geq V_0$ on a au moins **une trajectoire non-bornée possible** (trajectoire allant vers $+\infty$ ou $-\infty$).

Equation de Schrödinger Stationnaire : Généralités (1)

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

◆ Conditions de continuité de la fonction d'onde $\psi(x)$ et sa dérivée $\psi'(x)$

- Si le potentiel $V(x)$ est continu, $\psi(x)$ est automatiquement de classe C^2 ,
- Si $V(x)$ a un « saut de discontinuité σ » fini en x_0 (où $\sigma = V(x_0^+) - V(x_0^-) \neq 0$), alors on **doit imposer la continuité de $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ en x_0 .**
- Si $V(x)$ a un « saut de discontinuité σ » infini en x_0 (voir plus loin le puits infini) alors on **doit seulement imposer la continuité de $\psi(x)$.**

Remarque: Si on suppose dans un intervalle $[x_1, x_2]$ que $V(x) = +\infty$, alors on doit écrire que $\psi(x) = 0$ dans $[x_1, x_2]$.

◆ Condition sur l'énergie E

on montre que la condition classique $E \geq V_{min}$ reste vraie.

Equation de Schrödinger Stationnaire : Généralités (2)

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

◆ Comportement de la fonction d'onde $\psi(x)$ à l'infini

Seuls **deux comportements** sont **physiquement** acceptables à l'infini pour $\psi(x)$:

- Soit $\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$,
- Soit $\psi(x) \approx_{\infty} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, avec $A, B \in \mathbb{C}$ et $k > 0$,

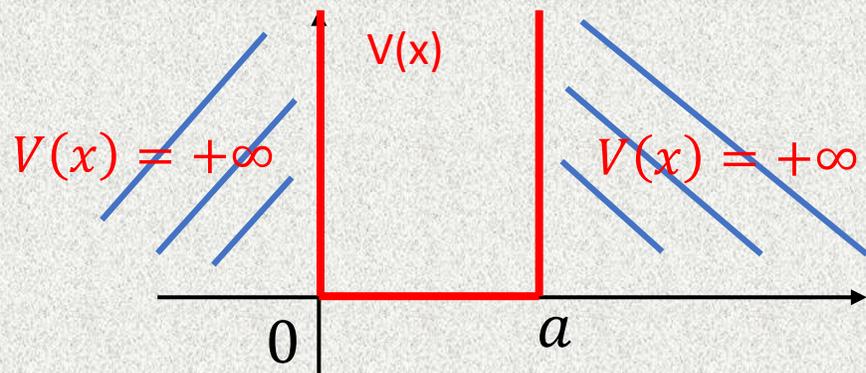
En aucun cas $\psi(x)$ ne peut diverger à l'infini.

Remarque importante: Si $\psi(x) \approx_{\infty} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, avec $A, B \in \mathbb{C}$ et $k > 0$, alors:

- Ae^{ikx} représente une onde se propageant de **gauche à droite** (sens des « x croissants »),
- Be^{-ikx} représente une onde se propageant de **droite à gauche** (sens des « x décroissants »)

Preuve: Ae^{ikx} est état propre de \hat{P} pour la valeur propre $p = \hbar k > 0$.

Le puits carré infini (1)



$$\forall x \in [0, a], V(x) = 0$$

$$\forall x \leq 0, x \geq a, V(x) = +\infty$$

Mouvement classique: allers et retours dans le puits (mouvement périodique) avec « rebonds » sur les « parois ».

Etude Quantique

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



$$E \geq V_{min} = 0$$



$$\blacklozenge \forall x \leq 0, x \geq a, V(x) = +\infty \Rightarrow \psi(x) = 0$$



$$\blacklozenge \forall x \in [0, a], V(x) = 0 \Rightarrow \psi''(x) = -k^2\psi(x) \text{ avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \geq 0.$$

Le puits carré infini (2)

$$\forall x \in [0, a], \psi''(x) = -k^2 \psi(x).$$

➔ $\forall x \in [0, a], \psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$

On peut aussi écrire (c'est équivalent)
 $\psi(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$ mais ici
l'expression en sin et cos est plus pratique.

➔ Conditions de continuité (ici seulement sur $\psi(x)$) : $\psi(0) = \psi(a) = 0$.

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow A = 0 \text{ et } \psi(x) = B \sin kx \quad (B \neq 0, \text{ sinon } \forall x, \psi(x) = 0)$$

$$\psi(a) = 0 \Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \text{ avec } n \in \mathbb{N} \quad (\text{Rappel: } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m})$$

$$n = 0 \Rightarrow k = 0 \Rightarrow \forall x, \psi(x) = 0 \text{ donc } n = 0 \text{ est exclu et } n \geq 1.$$

➔ **Conclusion:** les solutions sont « quantifiées ». Elles dépendent d'un entier « $n \geq 1$ ».

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$$

$$\forall x \in [0, a], \psi_n(x) = B \sin \frac{n\pi x}{a} \text{ et } \forall x \notin [0, a], \psi_n(x) = 0.$$

Le puits carré infini (3)

$$\forall x \in [0, a], \psi_n(x) = B \sin \frac{n\pi x}{a} \text{ et } \forall x \notin [0, a], \psi_n(x) = 0.$$

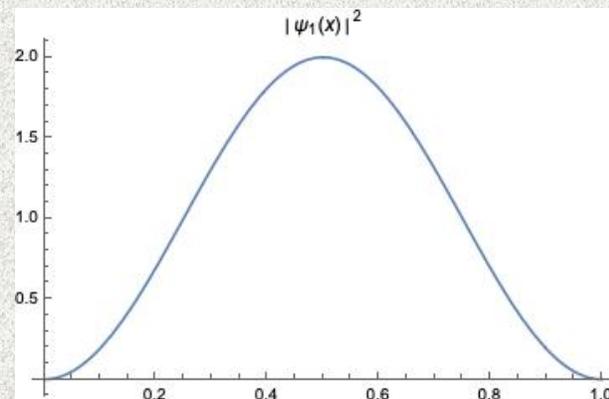
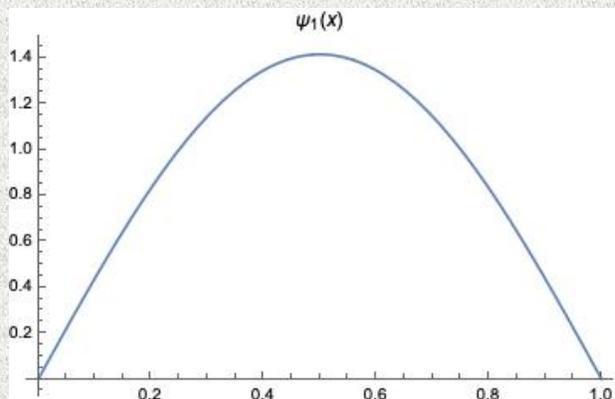
◆ Normalisation des solutions

On écrit que $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$. Soit $|B|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1 \Rightarrow |B| = \sqrt{2/a}$. La phase de B est arbitraire, on peut donc prendre $B = \sqrt{2/a}$, d'où:

$$\forall x \in [0, a], \psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

◆ Etat « Fondamental » (n=1)

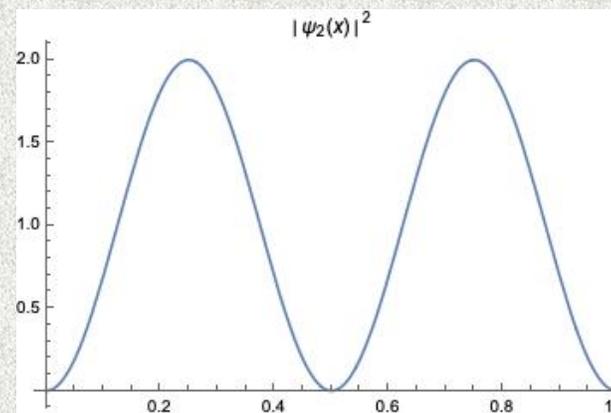
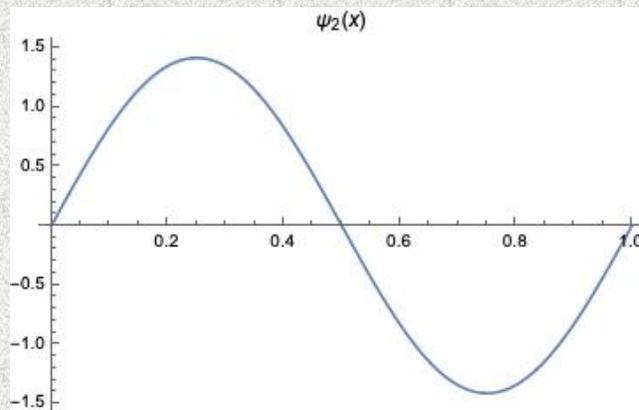
$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$



Le puits carré infini (4)

◆ Etat « excité » (n=2)

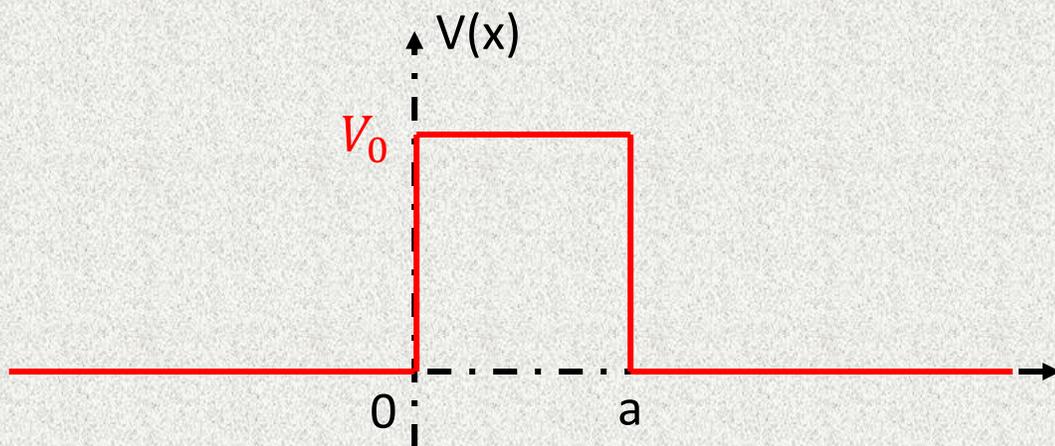
$$E_2 = \frac{2\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$



◆ Conclusion et Applications pratiques

- Lorsqu'une particule est « **piégée** », « ou confinée », à l'intérieur d'un puits de potentiel, ses états d'énergie sont « **quantifiés** » (résultat de portée générale).
- Ce modèle « élémentaire » du puits infini a des applications concrètes avec la réalisation des « boîtes quantiques » et des lasers à puits quantiques (empilement de couches de semi-conducteurs, par exemple AlAs/GaAs/AlAs).

La barrière de potentiel (1)



$$\begin{aligned} \forall x \leq 0, x \geq a, V(x) &= 0 \\ \forall x, 0 < x < a, V(x) &= V_0 > 0. \end{aligned}$$

Etude des trajectoires (complètes) en Mécanique Classique

- Si $E > V_0$ une particule venant de $-\infty$ ira jusqu'à $+\infty$ (pas de rebond), et réciproquement (de $+\infty$ à $-\infty$).
- Si $E < V_0$ Deux trajectoires sont possibles:
 - La particule va de $-\infty$ jusqu'à $x = 0$, « rebondit » et repart vers $-\infty$,
 - La particule vient $+\infty$ jusqu'à $x = a$, « rebondit » et repart vers $+\infty$.



Si $E < V_0$ aucune particule venant de $-\infty$ ne peut « franchir la barrière V_0 » et aller vers $+\infty$.

La barrière de potentiel (2)

Etude Quantique: Premier cas $E > V_0$

- **Hypothèse**: les particules viennent **TOUJOURS** de $-\infty$,
- **Remarque**: la particule ne peut pas être « piégée » \Rightarrow l'énergie E n'est pas « quantifiée ».

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



$$E \geq V_{min} = 0$$

On introduit $k, K > 0$: $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $K = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

$$\forall x \leq 0, \forall x \geq a, \psi''(x) = -k^2\psi(x)$$

$$\forall x, 0 \leq x \leq a, \psi''(x) = -K^2\psi(x)$$



$$\forall x, x \leq 0, \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\forall x, 0 \leq x \leq a, \psi(x) = Ce^{iKx} + De^{-iKx}$$

$$\forall x, a \leq x, \psi(x) = A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx}$$

Ae^{ikx} : onde **incidente** (particules que l'on envoie depuis $-\infty$),

Be^{-ikx} : onde **réfléchie** (particules « réfléchies » par la barrière et repartant à $-\infty$),

A_1e^{ikx} : onde **transmise** (particules transmises et partant vers $+\infty$),

B_1e^{-ikx} : onde venant de $+\infty$: **par hypothèse il n'y en a pas** donc $B_1 = 0$.

La barrière de potentiel (3)

Etude Quantique: Premier cas $E > V_0$

◆ **Conditions de continuité:** $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ sont continues en $x = 0$ et $x = a$.

$$\forall x, x \leq 0, \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\forall x, 0 \leq x \leq a, \psi(x) = Ce^{iKx} + De^{-iKx}$$

$$\forall x, a \leq x, \psi(x) = A_1e^{ikx}$$



$$\begin{cases} A + B = C + D \\ ik(A - B) = iK(C - D) \\ Ce^{iKa} + De^{-iKa} = A_1e^{ika} \\ iK(Ce^{iKa} - De^{-iKa}) = ikA_1e^{ika} \end{cases}$$

Remarque importante: l'amplitude « A » de l'onde incidente **n'est pas une inconnue** du problème, **mais une donnée:** c'est l'observateur qui fixe le nombre de particules « envoyées sur la barrière ».



Les inconnues sont les 4 rapports $\frac{B}{A}$, $\frac{C}{A}$, $\frac{D}{A}$, $\frac{A_1}{A}$ et on a bien 4 équations linéaires.



Les quantités physiques importantes sont $\frac{B}{A}$ et $\frac{A_1}{A}$ (diapo suivante).

La barrière de potentiel (4)

Etude Quantique: Premier cas $E > V_0$

- $r = \frac{B}{A}$ est le coefficient de réflexion en amplitude,
- $t = \frac{A_1}{A}$ est le coefficient de transmission en amplitude

Après calcul...

$$\frac{1}{t} = \left(\cos Ka - \frac{i}{2} \left(\frac{k}{K} + \frac{K}{k} \right) \sin Ka \right) e^{ika}$$

$$r = \frac{i}{2} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right) (\sin Ka) (t e^{ika})$$

On définit les coefficients de réflexion et de transmission en flux par $R = |r|^2$ et $T = |t|^2$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2 Ka = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \sqrt{\frac{2ma^2(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

$$R + T = 1$$

(Explication diapo suivante)

La barrière de potentiel (5)

Etude Quantique: Premier cas $E > V_0$

Explication: $R + T = 1$

◆ Si l'on calcule le courant $j(x)$ avant et après la barrière, on obtient:

$$\forall x, x \leq 0, j(x) = j_- = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \text{ et } \forall x, x \geq a, j(x) = j_+ = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2$$

◆ La loi de conservation de la probabilité entraîne que l'on doit avoir:

$$j_- = j_+ \Rightarrow R + T = 1$$

◆ **Conclusion:** Pour $E > V_0$ on a en général $R \neq 0$. Autrement dit la MQ prévoit qu'il y a même dans le cas $E > V_0$ des particules qui sont réfléchies par la barrière, contrairement à ce que prévoit la Mécanique Classique. Le coefficient de réflexion R donne précisément la probabilité de réflexion.

Remarque: Ici dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, on ne retrouve pas la limite classique $R \rightarrow 0$ (on a une oscillation de plus en plus rapide sans fin entre $R = 0$ et $R = 1$): il s'agit d'un « effet indésirable non-physique » dû au modèle (discontinuités « parfaites » de $V(x)$).

La barrière de potentiel: effet tunnel (1)

Etude Quantique: Deuxième cas $0 < E < V_0$

Hypothèse: les particules viennent **TOUJOURS** de $-\infty$

♦ On introduit $k, \rho > 0$: $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

$$\forall x \leq 0, \forall x \geq a, \psi''(x) = -k^2\psi(x)$$

$$\forall x, 0 \leq x \leq a, \psi''(x) = \rho^2\psi(x)$$



$$\forall x, x \leq 0, \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\forall x, 0 \leq x \leq a, \psi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x}$$

$$\forall x, a \leq x, \psi(x) = A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx}$$

- Attention au changement de nature des exponentielles dans l'intervalle $[0, a]$,
- A cause de l'hypothèse sur la venue des particules depuis $-\infty$, on a encore $B_1 = 0$.

♦ On écrit les conditions de continuité de $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ en $x = 0$ et $x = a$ et on cherche de nouveau les coefficients R et T .

Le calcul est un peu long....

La barrière de potentiel: effet tunnel (2)

Etude Quantique: Deuxième cas $0 < E < V_0$

On trouve l'expression finale suivante du coefficient T de transmission en **flux**:

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2 \sqrt{\frac{2ma^2(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

♦ **Conclusion:** L'existence de $T \neq 0$ prévue par la MQ (par opposition à la prédiction classique) est « **l'effet tunnel** », c'est-à-dire la possibilité en MQ de « **franchir une barrière de potentiel** ».
=> Enormément d'applications pratiques: microscope à effet tunnel, diode à effet tunnel, etc...

Remarques:

- Si on regarde la limite $\hbar \rightarrow 0$ on retrouve ici la limite classique $T \rightarrow 0$,
- Lorsque $V_0 \nearrow$ alors $T \searrow$
- Lorsque $a \nearrow$ alors $T \searrow$
- Lorsque $m \nearrow$ alors $T \searrow$

La barrière de potentiel: effet tunnel (3)

Etude Quantique: Deuxième cas $0 < E < V_0$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4\alpha(1-\alpha)} sh^2\beta\sqrt{1-\alpha}$$

$$\alpha = \frac{E}{V_0}, 0 < \alpha < 1, \text{ et } \beta = \sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}}.$$

Applications numériques:

On se place à mi-hauteur de barrière, soit $\alpha = 1/2$ on trouve $\frac{1}{T} = 1 + sh^2\beta/\sqrt{2}$.

- Si on calcule T pour **1 électron** ($m = 0.911 \times 10^{-30}$ kg) et une barrière de potentiel de « hauteur » $V_0 = 1$ eV et de largeur $a = 2$ nm, on trouve $\beta \cong 8.25$, d'où $T \cong 10^{-5}$,

=> **Cela veut dire qu'un électron sur 10^5 franchit la barrière,**

- Si la barrière a une épaisseur $a = 20$ nm, alors $\beta \cong 82.5$, alors $T \cong 8.5 \times 10^{-51}$,

=> **Maintenant seulement un électron sur 10^{50} franchit la barrière!!!**

- Si on calcule T pour **1 atome d'hydrogène** ($m = 1.674 \times 10^{-27}$ kg) essayant de franchir la barrière de potentiel $V_0 = 1$ eV et $a = 2$ nm, on trouve $\beta \cong 353$, d'où $T \cong 1 \times 10^{-214}$!!!!

Rq: **Le nombre d'atomes dans l'univers est inférieur à 1×10^{100} !!!**

Vous n'avez aucune chance de traverser les murs (par effet tunnel) !!!!....

**Notations de Dirac
pour les « observables continues » (cas 1D)**

Notations de Dirac: « base $|x\rangle$ » (1)

Espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ avec $(\psi|\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \phi(x) dx$

◆ Notations de Dirac: $(\psi|\phi) \mapsto \langle \psi|\phi \rangle$

➔ Introduisons les « kets » $|x\rangle$ en « posant » $\langle x|\psi \rangle = \psi(x)$ et $\langle \psi|x \rangle = \langle x|\psi \rangle^* = \psi(x)^*$.

➔ On sait que $(\hat{Q}\psi)(x) = x \psi(x)$, on peut donc écrire formellement:
 $\langle x|\hat{Q}|\psi \rangle = x \langle x|\psi \rangle \Rightarrow \langle \psi|\hat{Q}|x \rangle = x \langle \psi|x \rangle$ (pour tout $|\psi\rangle$) $\Rightarrow \hat{Q}|x\rangle = x|x\rangle$,
Conclusion: les « kets » $|x\rangle$ sont « vecteurs propres » de l'opérateur \hat{Q} .

➔ On peut écrire formellement:
$$\langle \psi|\phi \rangle = \langle \psi|Id_{\mathcal{H}}|\phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi|x \rangle \langle x|\phi \rangle dx = \left\langle \psi \left| \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx \right| \phi \right\rangle$$
$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx = Id_{\mathcal{H}}$$

Notations de Dirac: « base $|x\rangle$ » (2)

Espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ avec $(\psi|\phi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \phi(x) dx$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx = Id_{\mathcal{H}} \Rightarrow \forall \psi \in \mathcal{H}, |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) |x\rangle dx$$

Mais

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) |x\rangle dx \Rightarrow \forall y \in \mathbb{R}, \psi(y) = \langle y|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \langle y|x\rangle dx$$

L'opérateur \widehat{Q} étant hermitien et les kets $|x\rangle$ étant les « états propres », si on était en dimension finie, on pourrait dire que $\langle y|x\rangle \equiv \delta_{y,x}$ où $\delta_{y,x}$ est le symbole de Kronecker. Mais ici « x » et « y » sont des variables « continues »....

Pour résoudre ce problème, P. Dirac a eu l'idée d'introduire un nouvel objet « **la distribution de Dirac** » (ce n'est pas une « fonction au sens habituel ») qui vérifie un certain nombre de « règles d'utilisation » => **diapo suivante**.

Notations de Dirac: « base $|x\rangle$ » (3)

La distribution de Dirac $\delta(x)$

◆ P. Dirac postule l'existence d'un nouvel objet « ressemblant à une fonction C^∞ » et noté $\delta(x)$ (**la distribution de Dirac**) qui vérifie les propriétés « formelles » suivantes:

- $\forall f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, f$ continue, $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0)$
- $\forall x \neq 0, \delta(x) = 0$, et $\delta(0) = \infty$
- $\forall x, \delta(-x) = \delta(x)$,
- $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi \delta(k)$

Remarque: on peut montrer qu'aucune « vraie fonction » ne peut posséder ces propriétés.

◆ P. Dirac postule alors que $\langle y|x\rangle = \delta(y-x)$

◆ **Conséquences:**

- $\langle x|x\rangle = \delta(0) = \infty \implies |x\rangle \notin \mathcal{H}$,
- $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \delta(y-x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(y-z) \delta(z) dz = \psi(y) \implies$ relation de la diapo précédente.

Notations de Dirac: « base $|x\rangle$ » (4)

Résumé de la « Représentation $|x\rangle$ »

- (a) La « base $\{|x\rangle\}$ » vérifie $\langle y|x\rangle = \delta(y - x)$ où $\delta(x)$ est la **distribution de Dirac**,
- (b) La « base continue » $\{|x\rangle\}$ est « orthogonale » car $\langle x|y\rangle = 0$ si $x \neq y$, mais les « vecteurs » $|x\rangle$ ne sont pas « normalisables » car $\langle x|x\rangle = \infty$, donc $|x\rangle \notin \mathcal{H}$,
- (c) Toute « **fonction d'onde** » $\psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ est telle $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$: **la fonction d'onde $\psi(x)$ est la « Représentation en base $|x\rangle$ » du ket $|\psi\rangle$.**
- (d) On peut « écrire » le ket $|\psi\rangle$ sous la forme: $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) |x\rangle dx$.
- (e) La base $\{|x\rangle\}$ diagonalise l'opérateur position \hat{Q} avec $\hat{Q}|x\rangle = x|x\rangle$,
- (f) La base $\{|x\rangle\}$ donne la résolution de l'identité: $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx = Id_{\mathcal{H}}$,
- (g) On déduit des lignes (e) et (f) précédentes que $\hat{Q} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |x\rangle\langle x| dx$,

Notations de Dirac: « base $|p\rangle$ » (1)

Définition: $|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} |x\rangle dx \Leftrightarrow \langle x|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$.

♦ Si l'on pose $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$, alors $\langle p|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_p(x)|^2 dx = \infty \Rightarrow |p\rangle \notin \mathcal{H}$

♦ D'après les « axiomes » de la distribution de Dirac:

$$\langle p'|p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{(p-p')x}{\hbar}} \frac{dx}{2\pi\hbar} = \delta(p' - p)$$

♦ D'après la définition de l'opérateur d'impulsion $(\hat{P}\psi)(x) = -i\hbar\psi'(x)$ on déduit:

- $\langle x|\hat{P}|p\rangle = (\hat{P}\psi_p)(x) = p\langle x|p\rangle$ (pour tout « x ») donc $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$,

- les états $\{|p\rangle\}$ sont les états propres de \hat{P} pour les valeurs propres « $p \in \mathbb{R}$ ».

♦ Résolution de l'identité en « base $|p\rangle$ » et résolution spectrale de \hat{P} :

$$Id_{\mathcal{H}} = \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle\langle p| dp \quad \text{et} \quad \hat{P} = \int_{-\infty}^{+\infty} p |p\rangle\langle p| dp$$

Notations de Dirac: passage base « $|x\rangle$ » à « base « $|p\rangle$ »

$$|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} |x\rangle dx \Leftrightarrow \langle x|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} e^{i\frac{px}{\hbar}}.$$

◆ Ecriture du « ket $|x\rangle$ » en base $\{|p\rangle\}$: $|x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} |p\rangle \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

Preuve: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} |p\rangle \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{py}{\hbar}} |y\rangle dy = \int_{-\infty}^{+\infty} dy |y\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p(y-x)}{\hbar}}$

D'après les axiomes sur la distribution de Dirac: $\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p(y-x)}{\hbar}} = \delta(y-x),$

D'où: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} |p\rangle \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dy |y\rangle \delta(y-x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz |z+x\rangle \delta(z) = |x\rangle.$

◆ Changement de base: $\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \langle x|\psi\rangle \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ et $\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} \langle p|\psi\rangle \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

◆ Norme $\langle\psi|\psi\rangle$ en base $|x\rangle$ ou en base $|p\rangle$ (en utilisant la résolution de l'identité):

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|Id_{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x|\psi\rangle|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle p|\psi\rangle|^2 dp$$

Densités de probabilité, valeurs moyennes

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

◆ Si l'on prend un état normalisé $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, alors $\rho_Q(x) = |\langle x | \psi \rangle|^2$ est la « **densité de probabilité de présence** » de la particule en « **x** », et $\rho_P(p) = |\langle p | \psi \rangle|^2$ est la « **densité de probabilité d'impulsion** ».

◆ On en déduit les formules quantiques de valeur moyenne pour les observables $f(\hat{Q})$ et $g(\hat{P})$

$$\langle \psi | f(\hat{Q}) | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\langle x | \psi \rangle|^2 dx \quad \text{et} \quad \langle \psi | g(\hat{P}) | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} g(p) |\langle p | \psi \rangle|^2 dp$$

Schrödinger 1D revisité (1)

$$\text{Particule libre: } \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2$$

◆ On cherche à résoudre $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \hat{H} |\psi_t\rangle$: **Première méthode**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle p | \psi_t \rangle = \langle p | \hat{H} | \psi_t \rangle = \frac{p^2}{2m} \langle p | \psi_t \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle p | \psi_t \rangle = f(p) e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{p^2}{2m} t}$$

$$\langle p | \psi_t \rangle = \langle p | \psi_0 \rangle e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{p^2}{2m} t}$$

$$f(p) = \langle p | \psi_0 \rangle$$

◆ Si on cherche l'expression en « représentation x »: $\langle x | \psi_t \rangle$

On utilise la résolution de l'identité en base $|p\rangle$ et le fait que $\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$:

$$\langle x | \psi_t \rangle = \langle x | Id_{\mathcal{H}} | \psi_t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \langle x | p \rangle \langle p | \psi_t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{1}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} t - px \right)} \langle p | \psi_0 \rangle$$

Schrödinger 1D revisité (2)

$$\text{Particule libre: } \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2$$

♦ On cherche à résoudre $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \hat{H} |\psi_t\rangle$: **Deuxième méthode**

Cette équation a une solution formelle (algèbre linéaire) qui est: $|\psi_t\rangle = \hat{U}_t |\psi_0\rangle$ où \hat{U}_t est

« l'opérateur d'évolution »: $\hat{U}_t = e^{\frac{1}{i\hbar} \hat{H} t}$ et $\hat{U}_t |p\rangle = e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |p\rangle$ d'où:

$$\hat{U}_t = \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{p^2}{2m} t} |p\rangle \langle p|$$

En utilisant la résolution de l'identité en base x on a:

$$\langle x | \psi_t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x | \hat{U}_t | y \rangle \langle y | \psi_0 \rangle dy \quad \text{avec} \quad \langle x | \hat{U}_t | y \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{p^2}{2m} t} e^{i \frac{p(x-y)}{\hbar}}$$

Après calcul... on trouve $\forall t \neq 0$, $\langle x | \hat{U}_t | y \rangle = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{i \frac{m}{2t} (x-y)^2}$.

Pour $t = 0$, $\hat{U}_t = Id_{\mathcal{H}}$ et $\langle x | \hat{U}_0 | y \rangle = \delta(x - y)$.

Schrödinger 1D revisité (3)

$$\text{Particule libre: } \hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2$$

◆ Opérateur d'évolution et « action classique »

Rappel: le Lagrangien d'une particule libre est $L(\dot{x}) = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$ et l'action $S[x_t]$ le long d'une trajectoire durant l'intervalle de temps $[0, t]$ et $S[x_t] = \int_0^t L(\dot{x}_\tau) d\tau$.

Si l'on suppose $x(0) = x$ et $x(t) = y$ et un mouvement uniforme alors $x(\tau) = \frac{y-x}{t} \tau + x$ alors:

$$S[x_t] = \int_0^t \frac{1}{2} m \frac{(y-x)^2}{t^2} d\tau = \frac{m(y-x)^2}{2t}$$

On trouve donc:

$$\langle x | \hat{U}_t | y \rangle = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{\frac{1}{i\hbar} \frac{m}{2t} (x-y)^2} = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{\frac{1}{i\hbar} S[x_t]}$$

➡ Il y a un « lien » entre « l'action classique » et $\langle x | \hat{U}_t | y \rangle$: c'est le point de départ des « intégrales de chemin » de Feynman.