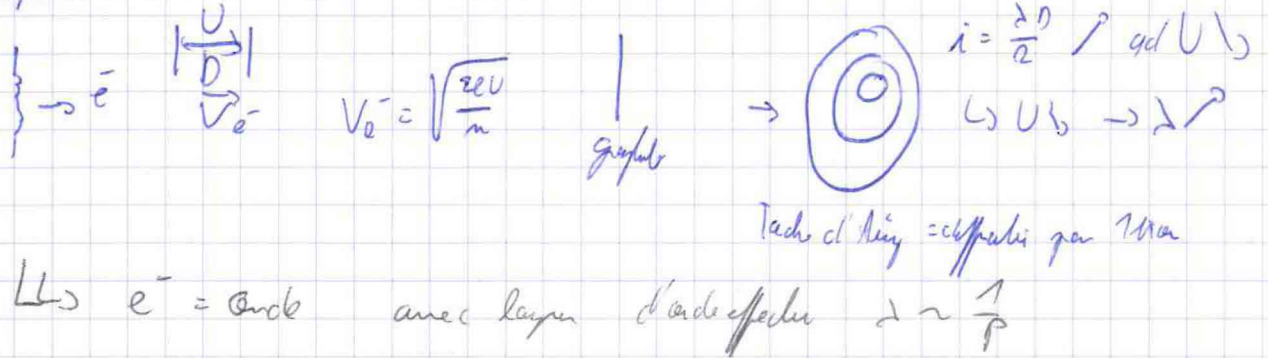


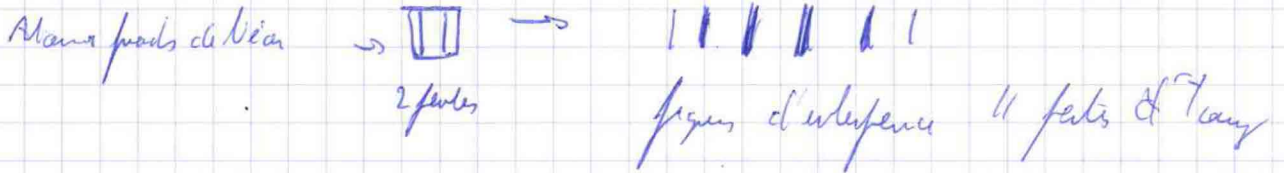
Méca Q

Aspect calculatoire de la mécanique

Expérience de Davisson et Germer (1927)



Expérience de Shuriger, Shimizu et Takano (1992)



- \hookrightarrow description probabiliste \rightarrow pas de trajectoire
- caractère calculatoire surgissant avec traitement statistique (big data) probabiliste (big data)

Expérience de Franck et Hertz (1914)



\hookrightarrow l'énergie de la matière condensée est quantifiée

- 1^{er} postulat de la MQ :
- 1) Description quantique de particule massive $\rightarrow \Psi(\underline{r}, t)$
= champ scalaire complexe et représente l'amplitude de proba de présence à \underline{r} et t .
 - 2) Proba de présence dans volume $d\underline{r}$ autour de \underline{r}
 $\hookrightarrow dP(\underline{r}, t) = d\underline{r} p(\underline{r}, t)$ (densité de proba)
 $= d\underline{r} |\Psi(\underline{r}, t)|^2$

↳ Normalizarea $\int d\underline{r} |\Psi(\underline{r}, t)|^2 = 1$ $[\Psi] = \frac{1}{[d\underline{r}]^{n/2}} = L^{-n/2}$

↳ în poziție Ψ este $e^{i\hbar^{-1}E} \Psi$ \Rightarrow definiție a unei funcții de valoare proprie

Medie $\langle \hat{O} \rangle = \int \Psi^* \hat{O} \Psi d\underline{r}$ Numitor $\Delta \hat{O}^2 = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2$ Egalitate $\Delta \hat{O} = \sqrt{\Delta \hat{O}^2}$
 ↳ incertitudine

2nd postulat de la MQ: Pentru o particulă de masă m în mișcare în câmp de energie potențial $V(\underline{r}, t)$, la fiecare dată când măsurăm poziția ei, rezultatul este dependent de timp:

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

($\hbar =$ constantă lui Planck $\approx 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$)

↳ Linieare \rightarrow Principiul de superpoziție Ψ_1 și Ψ_2 sol^o $\rightarrow a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$ sol^o

↳ Ref. la potențial dămere pot fi diferite în diferite spații

Conservarea probabilității: $\underline{J} = -i \frac{\hbar}{2m} [\Psi^* \underline{\nabla} \Psi - \Psi \underline{\nabla} \Psi^*]$

Ecuația de conservare a probabilității

$$\frac{d}{dt} \int |\Psi(\underline{r}, t)|^2 d\underline{r} = - \int d\underline{r} \underline{\nabla} \cdot \underline{J}(\underline{r}, t)$$

• Ecuația de Schrödinger stacionară

↳ $\Psi(\underline{r}, t) = \Psi(\underline{r}) \psi(t)$ $\psi(t) = e^{iEt/\hbar}$

↳ $p(\underline{r}), \langle \hat{O} \rangle, \Delta \hat{O}, \underline{J}(\underline{r})$ indep. de timp

↳ $\Psi(\underline{r}, t) = \Psi(\underline{r}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\underline{r}) + V(\underline{r}) \Psi(\underline{r}) = E \Psi(\underline{r}) \quad \text{"H}\Psi = E\Psi$$

↳ eg. care au valori proprii

$E = \hbar \omega$ Relația de De Broglie - Planck - Einstein

↳ Variabile proprii pe stări stacionare

$\rightarrow \psi(z) \rightarrow 0$
 $|z| \rightarrow \infty$

$\rightarrow \psi$ continue

$\rightarrow \nabla \psi$ continue sauf aux discontinuités ∞

• Particule quantique libre

$V = 0$

$$\psi(x, t) = \frac{A e^{i(kx - \omega t)}}{\text{OPPS}^+} + \frac{B e^{-i(kx + \omega t)}}{\text{OPPS}^-}$$

oe. propag. selon x ↑

OPPS : onde plane progressive sinusoidale

⚠ états stationnaires \rightarrow OPSS

$$\frac{2 m E}{\hbar^2} = k^2$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

\rightarrow relation de dispersion de la particule libre

$\hookrightarrow k^2 > 0 \Rightarrow k$ est réel (car $E \geq 0$) \rightarrow propagation sans atténuation

La vitesse de phase

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{|k|} = \frac{\hbar k}{2m} \cdot \frac{k}{\hbar k}$$

$$v_{\phi} = \frac{\hbar k}{2m} = v(\underline{k}) \text{ ou } v(\omega) \rightarrow$$
 propagation DISPERSIVE

La vitesse de groupe

$$v_g = \nabla_k \omega$$

$$v_g = \frac{\hbar k}{m} \quad v_g = 2v_{\phi} \neq v_{\phi} \rightarrow$$
 propagation dispersive

Analogie mécanique

$$v_g = v \rightarrow p = \hbar k$$

$$\frac{\hbar}{|p|} = \lambda$$
 longueur d'onde de Broglie

⚠ que pour particule libre

$$\hbar \underline{k} = v_g \times p$$
 "moment = vitesse de groupe \times quantité de mouvement"

Interférences

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m \hbar^2 k^2}}$$

longueur d'onde théorique de De Broglie

$m \gg \text{ou } T \Rightarrow \lambda \gg$ longueur $\times 2$ largeur

Paquets d'onde

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega e^{i(kx - \omega t)} \phi(k, \omega) \delta(\omega - \frac{\hbar k^2}{2m})$$

verifier relation de dispersion

⇒ Pageur d'onde, phase-constant

1^{er} ordre

$$\psi(x,t) = A(x - v_g(t-k_0)x) e^{i k_0 (x - v_g(t-k_0)t)}$$

↳ élément de ψ

enveloppe
se déplace à v_g

particule
se déplace à v_p

2^{en} ordre

$$v_g(k') = v_g(k_0) + \frac{k'}{2} \frac{dv_g}{dk}(k_0)$$

↳ étalé

• Principe d'indétermination de Heisenberg

Pour le potentiel

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

$$\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$$

$$\Delta p_x = 0 \rightarrow \Delta p_x = +\infty$$

$$\text{et } \Delta p_x = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$$

↳ Stabilité de la mesure

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d} = \frac{\hbar^2}{2m d^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d}$$

