

CHAMPS & PARTICULES

MÉCANIQUE QUANTIQUE

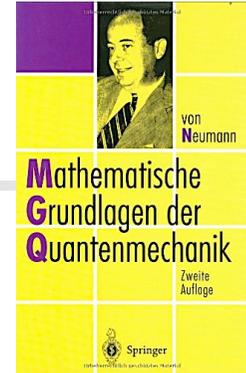
Alain Bouquet

Laboratoire AstroParticule & Cosmologie

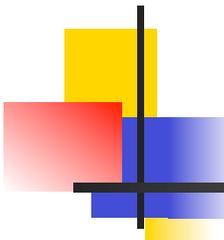
Université Denis Diderot Paris 7, CNRS, Observatoire de Paris & CEA



Les axiomes de la mécanique quantique



- 1 – Les états d'un système quantique forment un **espace vectoriel** complexe.
- 2 – Les quantités observables sont représentées par des **opérateurs linéaires hermitiens** agissant sur cet espace vectoriel.
- 3 – La mesure de l'une de ces quantités donne l'une des **valeurs propres** (réelles) de l'opérateur correspondant.
- 4 – Si l'état du système avant la mesure est une combinaison linéaire des états propres de l'opérateur, la mesure donne **une** des valeurs propres avec une **amplitude de probabilité** égale au poids du vecteur propre correspondant dans la combinaison linéaire.
- 5 – L'état du système après la mesure est l'**état propre** correspondant à la valeur propre mesurée.
- 6 – En dehors de la mesure, l'évolution temporelle est donnée par l'opérateur **hamiltonien**.

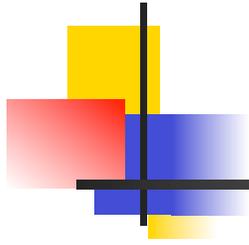


Du ket $|\psi\rangle$ à la fonction d'onde $\psi(x)$

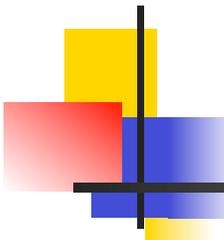
- Opérateur position \mathbf{X} \Rightarrow états propres de position $|x\rangle$ \Rightarrow $\mathbf{X}|x\rangle = x|x\rangle$
- Opérateur hermitien \Rightarrow valeurs propres réelles et états propres = base
- État $|\psi\rangle$ quelconque \Rightarrow décomposition $|\psi\rangle = \sum_x \alpha_x |x\rangle$ avec $\alpha_x = \langle x|\psi\rangle$
- Si les positions ont des valeurs continues [cas général] $\sum_x \rightarrow \int dx$ et $\alpha_x \rightarrow \alpha(x)$
- *Mais pourquoi ne pas plutôt écrire $\psi(x)$ au lieu de $\alpha(x)$?*

$$\Rightarrow \psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$$

- Particule au point x \Rightarrow onde s'étalant autour du point x \Rightarrow *fonction* d'onde donnant l'amplitude de probabilité de trouver une particule au point x \Rightarrow état $|\psi\rangle$
- On peut faire de même avec l'opérateur impulsion \mathbf{P} \Rightarrow $\mathbf{P}|p\rangle = p|p\rangle$
- $\Rightarrow \tilde{\psi}(p) \equiv \langle p|\psi\rangle$ [transformée de Fourier de $\psi(x)$]



ÉVOLUTION AU COURS DU TEMPS

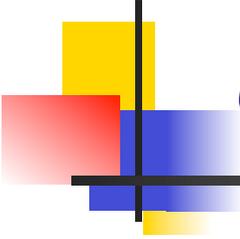


Évolution au cours du temps d'un système quantique

- Système quantique \rightarrow espace vectoriel E
- État au temps $t_1 \rightarrow$ vecteur $|\psi(t_1)\rangle$
- État au temps $t_2 \rightarrow$ vecteur $|\psi(t_2)\rangle$
- \Rightarrow il **doit** exister un opérateur \mathbf{U} tel que $\mathbf{U}|\psi(t_1)\rangle = |\psi(t_2)\rangle$
- Il s'avère que cet opérateur \mathbf{U} (qui dépend des temps t_1 et t_2) doit être
 1. linéaire
 2. **unitaire** [$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I}$]
 3. identique pour tous les vecteurs
- sinon on se heurte à des difficultés avec la causalité, avec l'interprétation probabiliste, ou avec les observations

$$\mathbf{U} \text{ unitaire } \rightarrow \langle \varphi(t_2) | \psi(t_2) \rangle = \langle \varphi(t_1) | \psi(t_1) \rangle$$

en particulier des états orthogonaux (= physiquement distincts) demeurent orthogonaux



Opérateur hamiltonien

- Soit un système dans l'état $|\psi(0)\rangle$ au temps $t_1 = 0$, et dans l'état $|\psi(t)\rangle$ au temps t

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\psi(0)\rangle$$

- Pour un temps $t = \varepsilon$ infinitésimalement près de $t = 0$, $\mathbf{U}(t)$ peut se développer en série :

$$\mathbf{U}(\varepsilon) = \mathbf{U}(0) + \varepsilon \cdot \text{opérateur} + \varepsilon^2 \cdot \text{opérateur} + \dots$$

- $\mathbf{U}(0) = \mathbf{I}$, et pour des raisons historiques ☺ on écrit la série comme:

$$\mathbf{U}(\varepsilon) = \mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \cdot \mathbf{H} + \dots$$

- $\Rightarrow \mathbf{U}^\dagger(\varepsilon) = \mathbf{I} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \cdot \mathbf{H}^\dagger + \dots$
- $\Rightarrow \mathbf{U}^\dagger(\varepsilon) \mathbf{U}(\varepsilon) = [\mathbf{I} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \cdot \mathbf{H}^\dagger + \dots] [\mathbf{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \cdot \mathbf{H} + \dots] = \mathbf{I} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \cdot [\mathbf{H}^\dagger - \mathbf{H}] + \dots = \mathbf{I}$
- $\Rightarrow \mathbf{H}^\dagger - \mathbf{H} = 0$
- $\Rightarrow \mathbf{H}$ est un opérateur **hermitien**
- Par comparaison avec la physique classique, cet opérateur correspond à l'**hamiltonien** et ses valeurs propres sont les **énergies** possibles du système

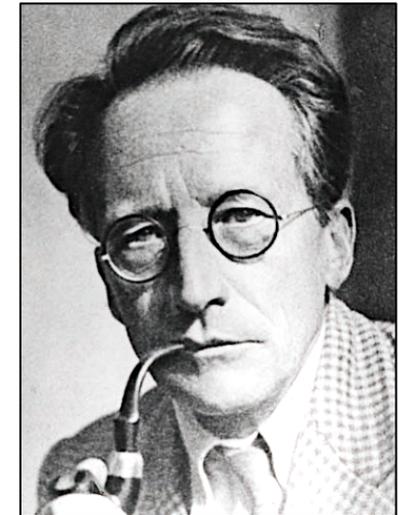
Équation de Schrödinger

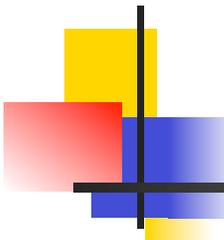
- Partons de $|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\psi(0)\rangle$
- $\Rightarrow |\psi(\varepsilon)\rangle = \mathbf{U}(\varepsilon) |\psi(0)\rangle = [\mathbf{I} - i/\hbar \varepsilon \cdot \mathbf{H}] |\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle - i/\hbar \varepsilon \cdot \mathbf{H} |\psi(0)\rangle$
- $\Rightarrow [|\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi(0)\rangle]/\varepsilon \equiv d/dt |\psi(0)\rangle = - i/\hbar \mathbf{H} |\psi(0)\rangle$
- Mais $t = 0$ ne jouait pas de rôle particulier

$$\Rightarrow d/dt |\psi(t)\rangle = - i/\hbar \mathbf{H} |\psi(t)\rangle$$

ce qui est l'équation de Schrödinger

- L'opérateur hamiltonien \mathbf{H} est le même pour tous les états
- Tout ce qui reste à faire est d'écrire cet hamiltonien $\mathbf{H} = \mathbf{K} + \mathbf{V}$
 - Terme cinétique \mathbf{K} ($= \mathbf{P}^2/2m$ dans le cas non relativiste sans spin) pour chaque quanton
 - Terme potentiel \mathbf{V} décrivant l'interaction des quantons entre eux, et avec l'extérieur
- ... et de résoudre l'équation différentielle...





Représentations de Schrödinger et de Heisenberg

■ Représentation de Schrödinger

- Les opérateurs \mathbf{O} ne dépendent pas du temps
- \rightarrow Les états $|\psi(t)\rangle$ dépendent du temps : $|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$
- Ils évoluent suivant l'équation de Schrödinger $i\hbar\partial/\partial t |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle$
- $\rightarrow \mathbf{U}(t, t_0) = \exp\{-i/\hbar \mathbf{H} (t-t_0)\}$

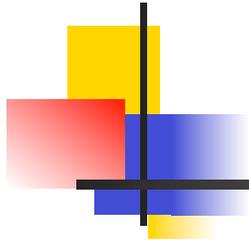
■ Représentation de Heisenberg

- Les états $|\psi\rangle$ ne dépendent pas du temps
- \rightarrow Les opérateurs \mathbf{O} dépendent du temps : $\mathbf{O}(t) = \mathbf{U}^{-1}(t, t_0) \mathbf{O}(t_0) \mathbf{U}(t, t_0)$
- $\rightarrow \mathbf{U}(t, t_0) = \exp\{-i/\hbar \mathbf{H} (t-t_0)\}$

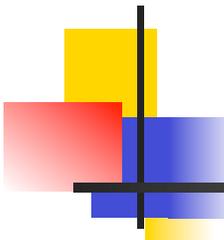
- *Dans les deux cas, les observations sont identiques (par exemple les valeurs moyennes des opérateurs)*

■ Représentation d'interaction

- Décomposition de l'hamiltonien en deux parties : $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{\text{libre}} + \mathbf{H}_{\text{interaction}}$
- Les opérateurs évoluent avec $\mathbf{H}_{\text{libre}}$
- Les états « d'interaction » $|\psi_{\text{int}}(t)\rangle$ évoluent avec \mathbf{H}_{int} $i\hbar\partial/\partial t |\psi_{\text{int}}(t)\rangle = \mathbf{H}_{\text{int}} |\psi_{\text{int}}(t)\rangle$
- L'état « complet » $|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}_{\text{libre}} |\psi_{\text{int}}(t)\rangle$

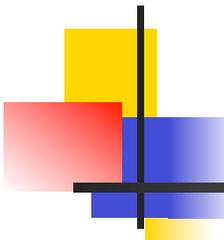


L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER



Équation de Schrödinger $i\hbar d/dt|\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle$

- Procédure standard
 - se donner un opérateur \mathbf{H}
 - si \mathbf{H} ne dépend pas du temps [cas très fréquent]
 - résoudre l'équation aux valeurs propres $\mathbf{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$
[dite équation de Schrödinger indépendante du temps]
 - \rightarrow valeurs propres (énergies) E_i *indépendantes du temps*
 - et états propres correspondants $|E_i\rangle$ *indépendants du temps*
[pas tout à fait : à une *phase* $e^{-i/\hbar E_i t}$ près]
 - \rightarrow état quelconque $|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(t) |E_i\rangle = \sum_i \alpha_i(0) e^{-i/\hbar E_i t} |E_i\rangle$



Évolution temporelle d'un état

- Opérateur hamiltonien \mathbf{H} *indépendant du temps*
- → valeurs propres (**énergie**) E_i et états propres $|E_i\rangle$ donnés par

$$\mathbf{H} |E_i\rangle = E_i |E_i\rangle$$

- → Équation de Schrödinger

$$d/dt |E_i\rangle = -i/\hbar \mathbf{H} |\psi(t)\rangle = -i/\hbar E_i |E_i\rangle$$

$$\Rightarrow |E_i(t)\rangle = e^{-i/\hbar E_i t} |E_i(0)\rangle$$

- ⇒ les deux vecteurs $|E_i(t)\rangle$ et $|E_i(0)\rangle$ ne diffèrent que par une **phase** $e^{-i/\hbar E_i t}$
- ⇒ ils décrivent le *même* état physique
- ⇒ un état d'énergie *définie* est **stationnaire** (il ne change pas au cours du temps)
- ⇒ état quelconque $|\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i(t) |E_i\rangle = \sum_i \alpha_i(0) e^{-i/\hbar E_i t} |E_i\rangle$

Application à un qubit

- Système quantique à deux états $|1\rangle$ et $|2\rangle$, vecteurs propres d'un opérateur (la position \mathbf{X} par exemple, dans une description élémentaire de l'ion H_2^+)



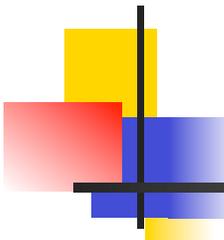
- Supposons que l'hamiltonien \mathbf{H} ait la forme :

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & \varepsilon e^{i\vartheta} \\ \varepsilon e^{-i\vartheta} & E \end{pmatrix}$$



ce terme-ci assure une transition de l'état $|1\rangle$ à l'état $|2\rangle$

- puisque \mathbf{H} est hermitien, E est réel de même que ε
- Les valeurs propres et les vecteurs propres de cet hamiltonien sont
 - $\lambda = E + \varepsilon \rightarrow |+\rangle = [e^{i\vartheta} |1\rangle + |2\rangle] / \sqrt{2}$
 - $\lambda = E - \varepsilon \rightarrow |-\rangle = [e^{i\vartheta} |1\rangle - |2\rangle] / \sqrt{2}$
 - si $\varepsilon = 0$, les deux valeurs propres de l'hamiltonien sont *dégénérées* et toute combinaison linéaire de $|+\rangle$ et de $|-\rangle$ (ou de $|1\rangle$ et de $|2\rangle$) est vecteur propre



Évolution temporelle du qubit

- Supposons que l'état initial soit l'état $|1\rangle$ (par exemple parce que la position a été mesurée)
- Ce n'est *pas* un des états propres de l'hamiltonien (sauf dégénérescence)

$$|1\rangle = e^{-i\vartheta}/\sqrt{2} [|+\rangle + |-\rangle]$$

$$|2\rangle = 1/\sqrt{2} [|+\rangle - |-\rangle]$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\vartheta}/\sqrt{2} [e^{-i/\hbar (E+\varepsilon) t} |+\rangle + e^{-i/\hbar (E-\varepsilon) t} |-\rangle]$$

- **Quelle est la probabilité qu'une mesure de position au temps t donne $|1\rangle$ ou $|2\rangle$?**

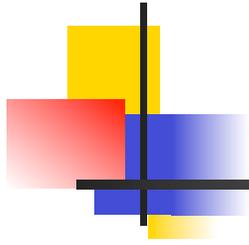
$$p_1(t) \equiv \langle 1|\psi(t)\rangle = e^{+i\vartheta}/\sqrt{2} [\langle +| + \langle -|] e^{-i\vartheta}/\sqrt{2} [e^{-i/\hbar (E+\varepsilon) t} |+\rangle + e^{-i/\hbar (E-\varepsilon) t} |-\rangle]$$

- $\Rightarrow p_1(t) = e^{-i/\hbar Et} [e^{-i/\hbar \varepsilon t} + e^{+i/\hbar \varepsilon t}] / 2 = e^{-i/\hbar Et} \cos[\varepsilon t/\hbar]$
- \Rightarrow probabilité $P_1(t) = |p_1(t)|^2 = \cos^2[\varepsilon t/\hbar]$ et $P_2(t) = 1 - P_1(t) = \sin^2[\varepsilon t/\hbar]$
- \Rightarrow le système oscille périodiquement entre les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$

avec une fréquence d'oscillation $\nu = \varepsilon/2\pi\hbar = \varepsilon/h \Leftrightarrow \varepsilon = h\nu$

Application : les mésons K^0 \bar{K}^0 et K_L K_S

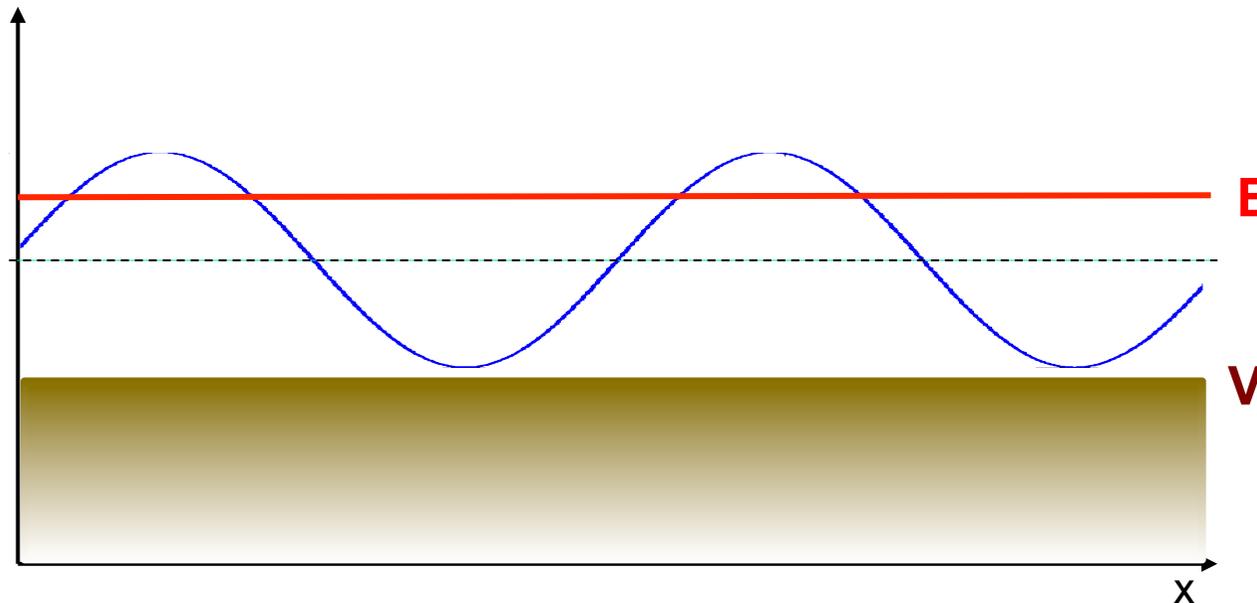
- Les mésons K, des particules étranges : rapides à produire (collisions proton-méson π) mais longues à se désintégrer ➔ nouveau nombre quantique, l'étrangeté S
 - production = interaction forte conservant S ➔ production par paires ➔ particules « V »
 - désintégration = interaction faible violant S
- K^0 : masse 498 MeV formé d'un quark d et d'un antiquark s étrangeté S = +1
- \bar{K}^0 : masse 498 MeV formé d'un antiquark d et d'un quark s étrangeté S = -1
- Mais deux durées de vie très différentes ➔ combinaisons K_L et K_S
- Pais et Gell-Mann (1955)
 - K^0 et \bar{K}^0 états propres de l'interaction forte
 - K_L K_S états propres de l'interaction faible ➔ hamiltonien $H = \begin{pmatrix} E & \varepsilon \\ \varepsilon & E \end{pmatrix}$
 - avec $\varepsilon \ll E$
 - conservation de CP ➔ $K_S \rightarrow 2\pi$ et $K_L \rightarrow 3\pi$ ➔ durées de vie très différentes
 - ➔ $K^0 = K_S + K_L \rightarrow K_L$ par disparition de K_S
 - mais « régénération » possible : $K_L = K^0 + \bar{K}^0$ ➔ interactions (fortes) différentes dans la matière ➔ changement des proportions de K^0 et \bar{K}^0 ➔ réapparition de K_S



PUITS ET BARRIÈRES DE POTENTIEL

Potentiel constant $V(x) = V < E$

- Potentiel constant \Rightarrow équation de Schrödinger $-\hbar^2/2m \partial^2\psi(x)/\partial x^2 + V \psi(x) = E \psi(x)$
- Équation d'onde banale, de la forme $\psi'' + \omega^2\psi = 0$ avec $\omega^2 = 2m/\hbar^2 [E - V]$
- $\Rightarrow \psi(x) = A \cos \omega x + B \sin \omega x$ (*A et B sont des nombres complexes*)
- $\Leftrightarrow \psi(x) = \psi_1 e^{i\omega x} + \psi_2 e^{-i\omega x}$ [$\int |\psi(x)|^2 dx = \infty$ *Heisenberg*]
- Longueur d'onde $\lambda = 2\pi/\omega = 2\pi\hbar/[2m(E - V)]^{1/2} = h/[2m \cdot \frac{1}{2} mv^2]^{1/2} = h/mv = \lambda_{\text{de Broglie}}$

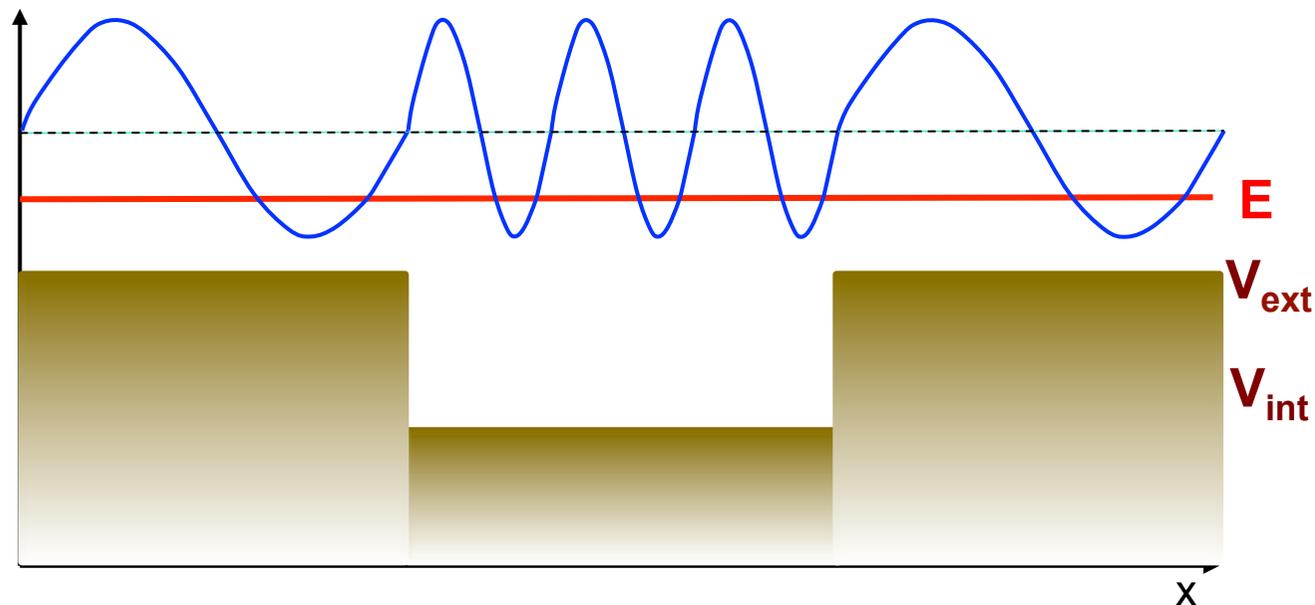


Diffusion par un potentiel

- En une dimension : « particule » approchant du « puits de potentiel » et accélérée par lui (→ augmentation d'énergie cinétique → augmentation de fréquence), puis s'en éloignant et revenant à son état antérieur

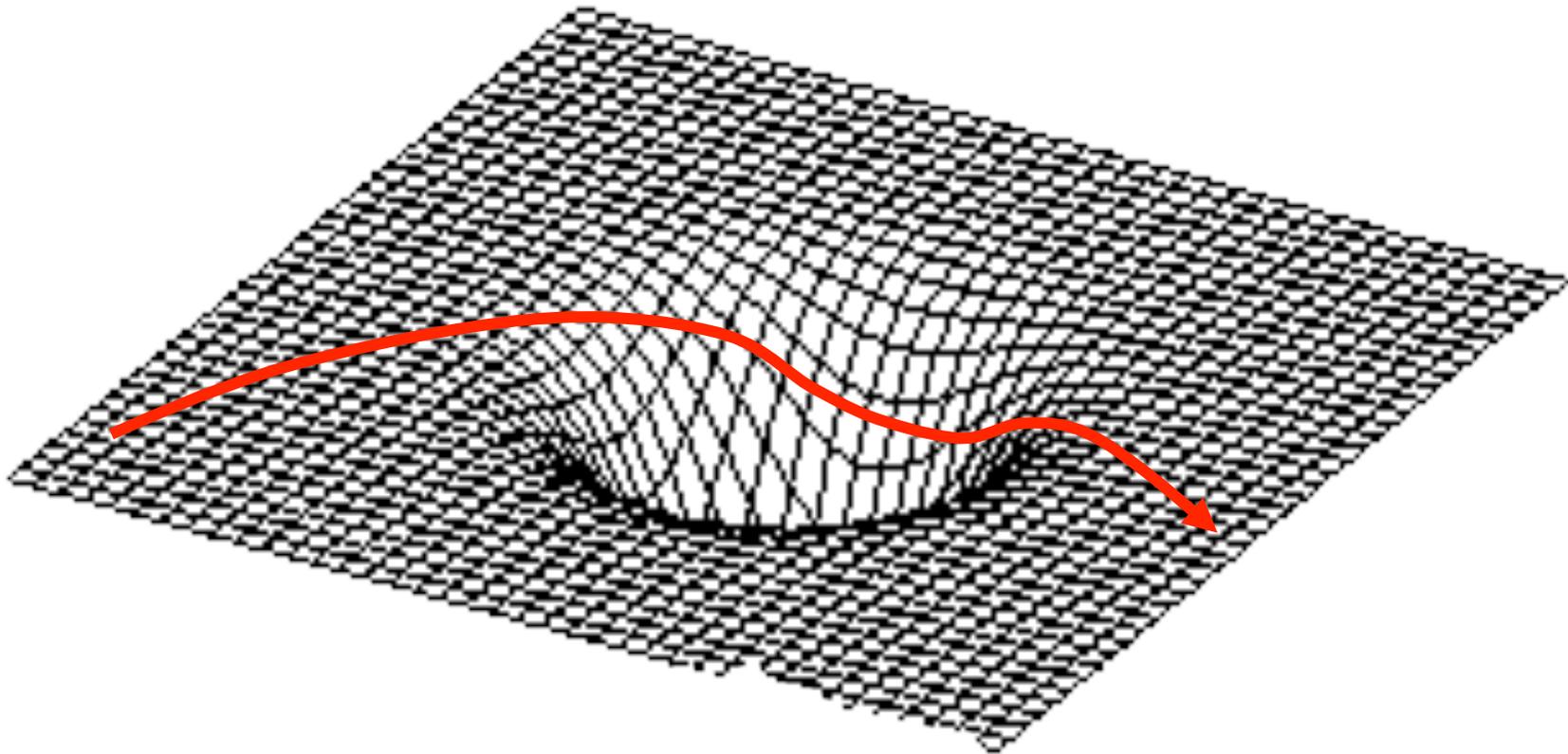
$$\omega_{\text{ext}} = 2\pi/h [2m(E - V_{\text{ext}})]^{1/2} \quad \rightarrow \quad \omega_{\text{int}} = 2\pi/h [2m(E - V_{\text{int}})]^{1/2}$$

- Très schématiquement :



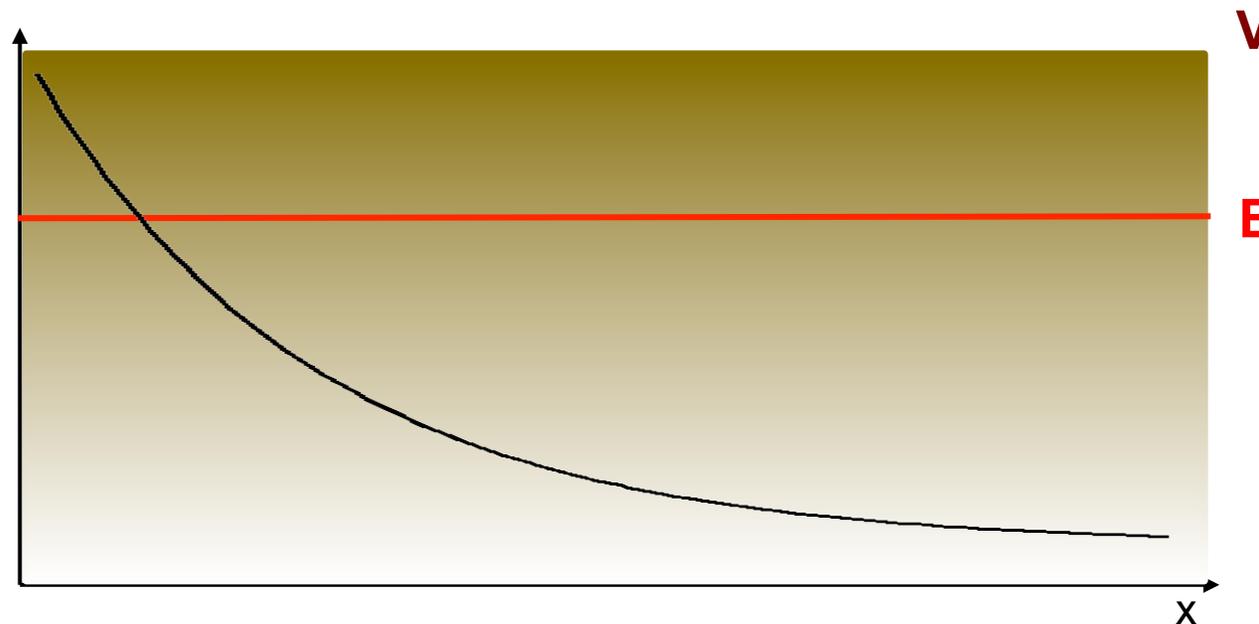
Diffusion par un potentiel

- En deux ou trois dimensions, la direction du mouvement peut aussi changer
- Très schématiquement :



Potentiel constant $V(x) = V > E$

- Et si $V > E$? Classiquement impossible ($E = \frac{1}{2} mv^2 + V$) mais quantiquement permis
- $\Rightarrow \omega^2 = 2m/\hbar^2 [E - V] < 0 \Rightarrow \omega$ est imaginaire pur $\Rightarrow \omega = i |\omega| = i [2m/\hbar^2 (V - E)]^{1/2}$
- $\Rightarrow \psi(x) = \psi_0 e^{i\omega x} = \psi_0 e^{-|\omega|x} \Rightarrow$ exponentielle décroissante
 - Si $E < V$ pour tout x , la solution est $\psi(x) \equiv 0$ ce qui n'est pas très intéressant
 - Si $E < V$ pour $x > x_0$ seulement, la solution est sinusoïdale pour $x < x_0$ et décroît exponentiellement pour $x > x_0$, avec une échelle de décroissance $\lambda = 1/|\omega|$



Puits carré : une particule dans une boîte

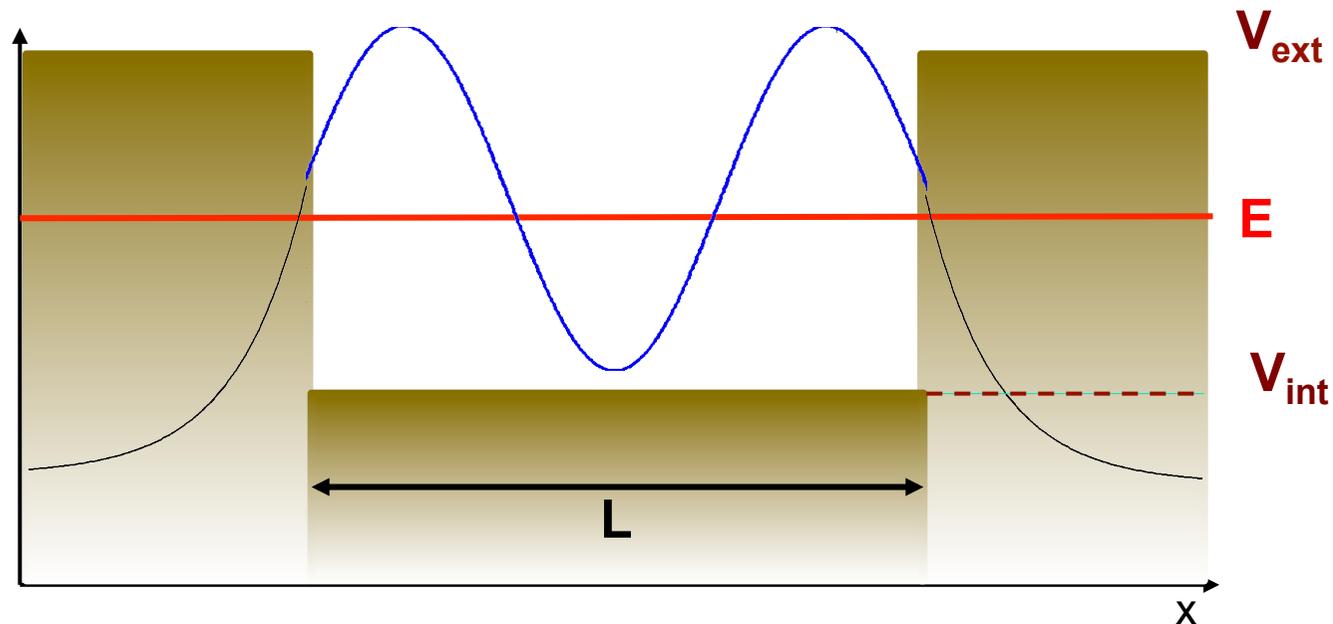
- L'amplitude de la fonction d'onde décroît exponentiellement en dehors du puits

$$\psi_{\text{int}}(x) = \psi_0 e^{i \omega_{\text{int}} x}$$

$$\psi_{\text{ext}}(x) = \psi_1 e^{-\omega_{\text{ext}} x}$$

avec $\omega_{\text{int}} = 2\pi/h [2m(E - V_{\text{int}})]^{1/2}$ et $\omega_{\text{ext}} = 2\pi/h [2m(V_{\text{ext}} - E)]^{1/2}$

- Pour un puits *très* profond ($V_{\text{ext}} \rightarrow \infty$) la fonction d'onde s'annule aux bords \Leftrightarrow confinement



Puits carré : une particule dans une boîte

- Prenons $V_{\text{ext}} \rightarrow \infty$ et (sans perte de généralité) $V_{\text{int}} = 0$
- La fonction d'onde $\psi(x) = \psi_0 e^{i\omega x}$ s'annule aux bords
- \Leftrightarrow Largeur $L =$ multiple entier de $(\frac{1}{2})$ longueurs d'onde
- $\Rightarrow \omega = \pi n/L = 2\pi/h [2mE]^{1/2} \Leftrightarrow E = n^2 h^2 / 8mL^2$

$$\Rightarrow \omega = 2\pi/h [2mE]^{1/2}$$

$$\Rightarrow \omega = \pi n/L$$

\Rightarrow les énergies sont **quantifiées** : $E_n = n^2 E_1$ avec $E_1 = h^2/8mL^2$

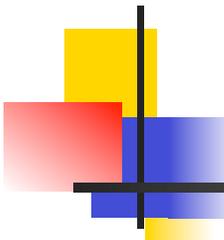
\Rightarrow il existe une énergie **minimale** non-nulle, E_1

\Rightarrow plus le confinement est important, plus l'énergie minimale est élevée

$$L \rightarrow 0 \Leftrightarrow E_1 \rightarrow \infty \quad [\text{☞ inégalité de Heisenberg}]$$

\Rightarrow plus la masse m est petite, plus l'énergie minimale est élevée

$$m \rightarrow 0 \Leftrightarrow E_1 \rightarrow \infty \quad [\text{☞ inégalité de Heisenberg}]$$



Application : atome et noyau de carbone

- $E = h^2/8mL^2$

- **Atome**

- Densité du carbone et nombre d'Avogadro ➔ diamètre d'un atome $\sim 1.5 \text{ \AA} = 1.5 \times 10^{-10} \text{ m}$
- ➔ $E_e = 2.67 \times 10^{-18} \text{ J} = 16.7 \text{ eV}$ observé : 11.3 eV ordre de grandeur correct
- ➔ $E_p = 1.46 \times 10^{-21} \text{ J} = 0.009 \text{ eV}$ << énergie thermique $\sim 0.04 \text{ eV}$

- **Noyau**

- Expériences de diffusion ➔ diamètre du noyau de carbone $\sim 5.8 \text{ fm} = 5.8 \times 10^{-15} \text{ m}$
- ➔ $E_e = 1.78 \times 10^{-9} \text{ J} = 11.2 \text{ GeV}$ ➔ il ne peut pas y avoir d'électron dans le noyau
- ➔ $E_e = 9.75 \times 10^{-13} \text{ J} = 6.1 \text{ MeV}$ observé : 7.5 MeV ordre de grandeur correct

- Le puits carré n'a *aucune* raison d'être une bonne approximation d'un atome (ni d'un noyau) car la forme d'un potentiel coulombien est très différente (et tridimensionnelle)

- Constante de Planck : $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

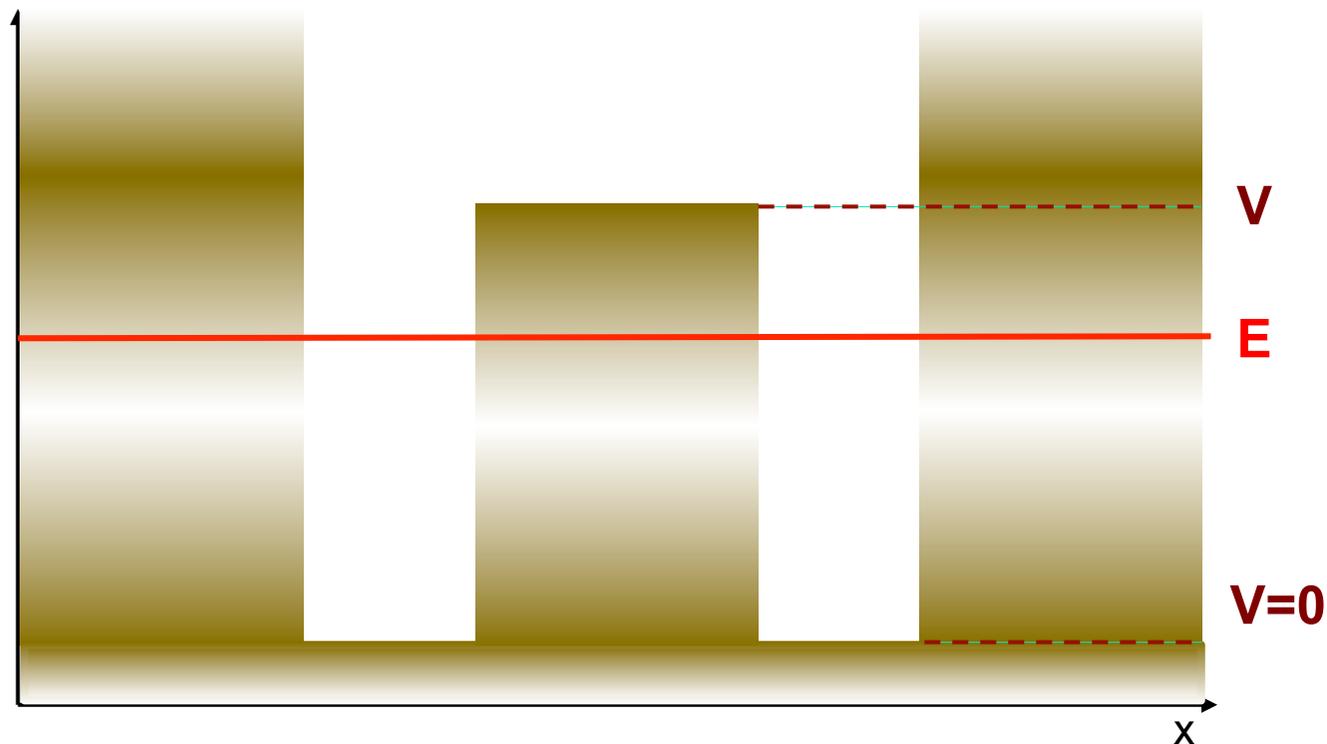
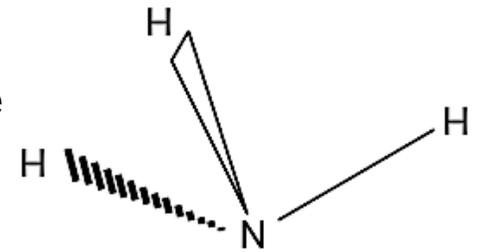
$$1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-19} \text{ J}$$

- Masse de l'électron : $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$

$$\text{Masse du proton : } m = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

Le double puits

- Cas, par exemple, d'une molécule ayant deux configurations équivalentes comme l'ammoniac NH_3 , séparées par une barrière de potentiel
- **Classiquement**, elle ne peut pas passer d'une configuration à l'autre
- **Quantiquement**, cela est possible \rightarrow oscillation d'un état à l'autre

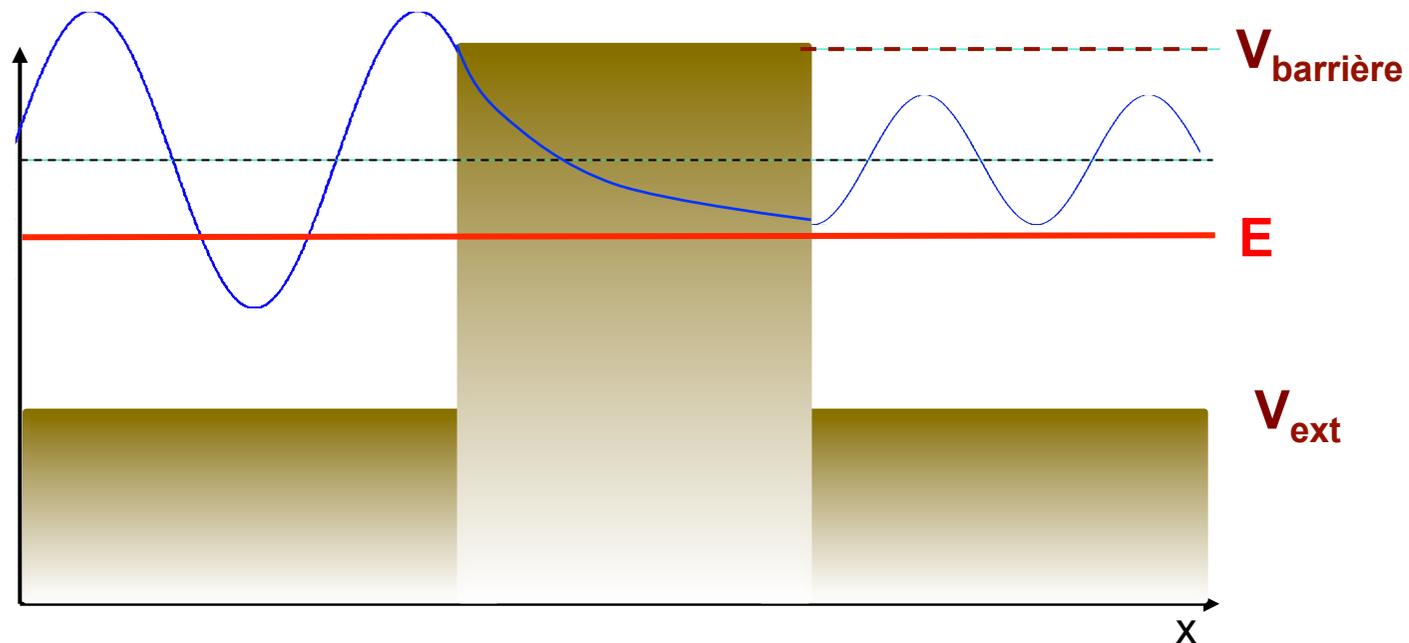


Barrière carrée

- Passer la barrière (une particule classique ne peut **pas** franchir la barrière si $E < V_{\text{barrière}}$)
 - **réduit l'amplitude** de la fonction d'onde \rightarrow probabilité d'autant plus faible que la barrière est large et que $V-E$ est grand

$$\psi_1 e^{i\omega_{\text{ext}} x} \rightarrow \psi_2 e^{i\omega_{\text{ext}} x} \quad \text{avec} \quad \psi_2 = \psi_1 e^{-\omega_{\text{int}} \cdot \text{Largeur}}$$

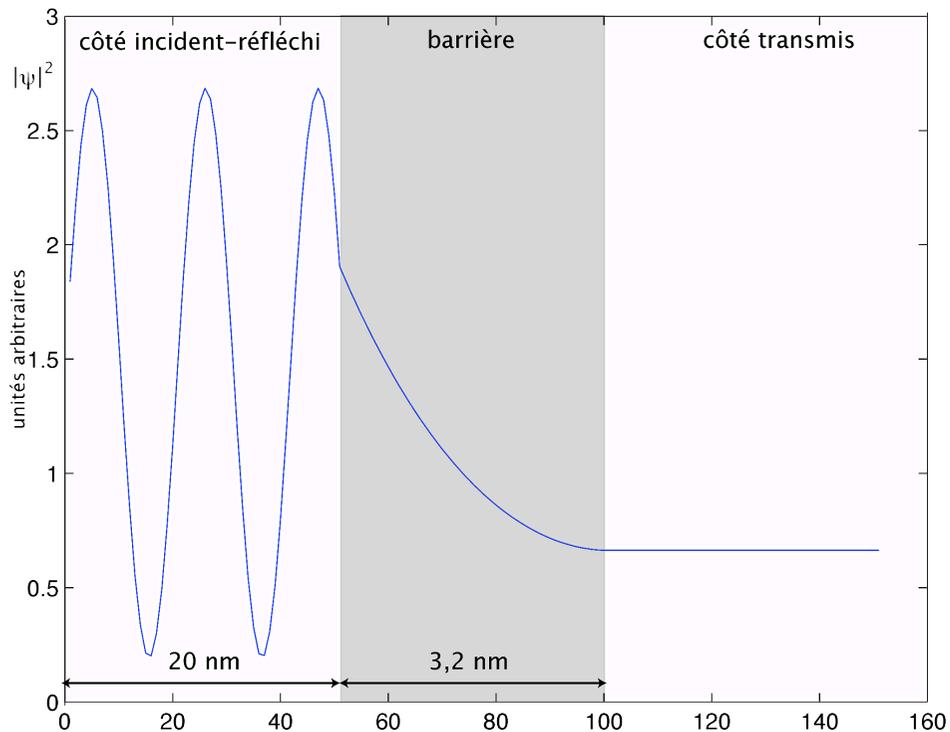
- mais **ne change pas son énergie** ($\omega_{\text{ext}} = [2m/\hbar^2 (E - V_{\text{ext}})]^{1/2}$ est le même de chaque côté)



Effet tunnel

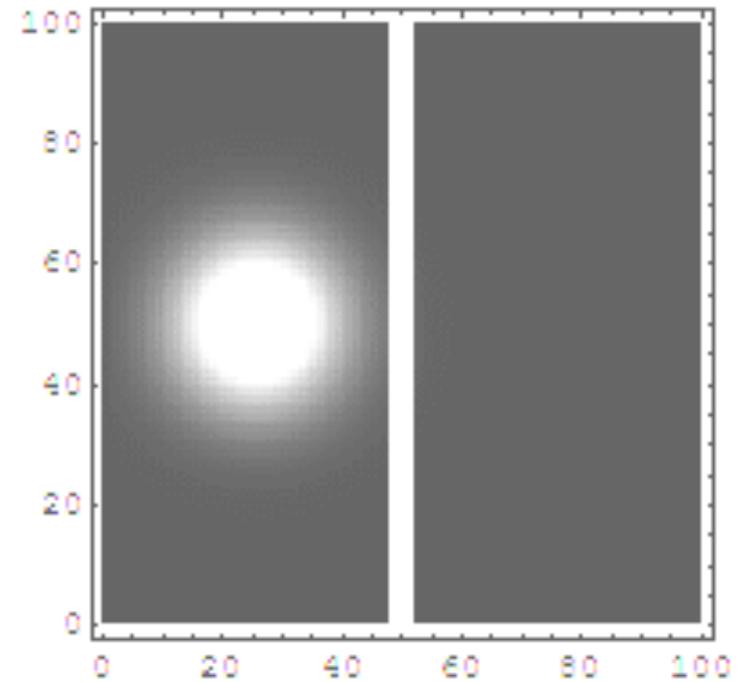
■ Effet tunnel

- Onde arrivant devant une barrière de potentiel
- Avant : sinusoïde (e^{ipx})
- Pendant : exponentielle (e^{-px})



■ Fonction d'onde

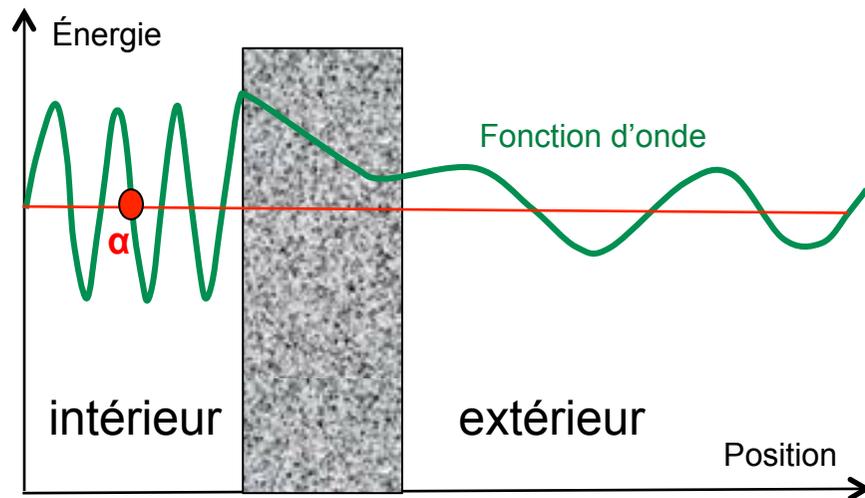
- L'essentiel est réfléchi
- Une partie est transmise



© J.C. Benoist

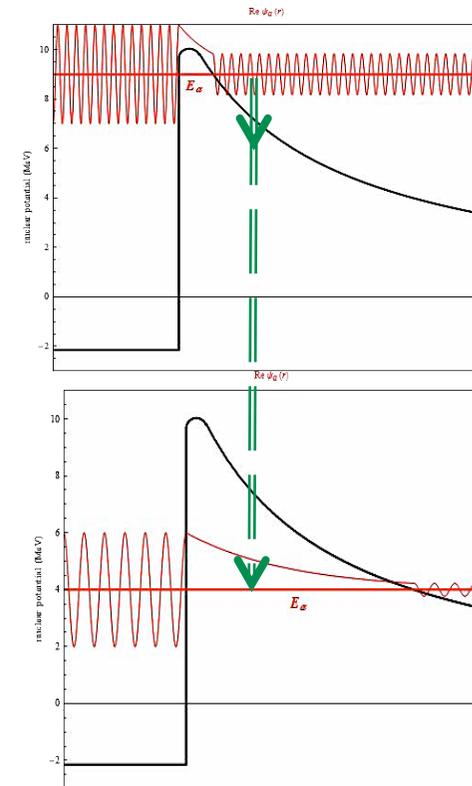
Émission alpha

- George Gamow (1904-1968)
Zur Quantentheorie des Atomkernes (1928)



- L'alpha *préexiste* dans le noyau
- Il est retenu par une barrière de potentiel
- Il traverse la barrière par effet tunnel

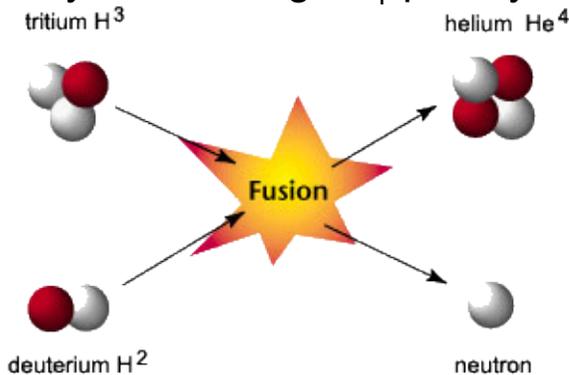
- \Rightarrow décroissance **exponentielle** de la fonction d'onde



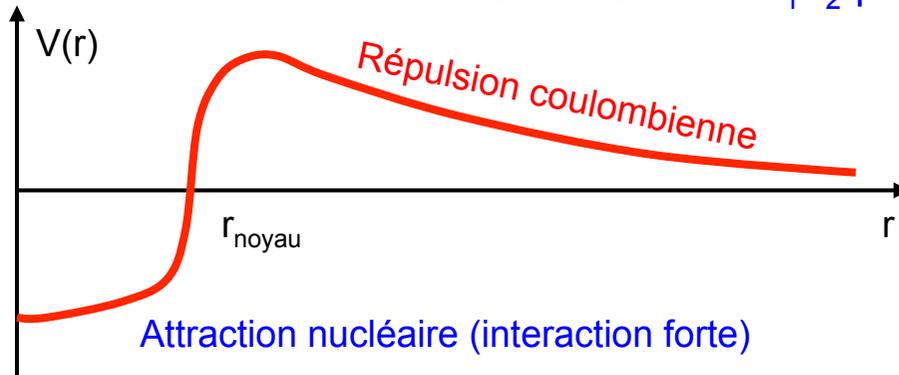
- \Rightarrow loi empirique de Geiger et Nuttall (1911)

Et dans l'autre sens : les fusions nucléaires

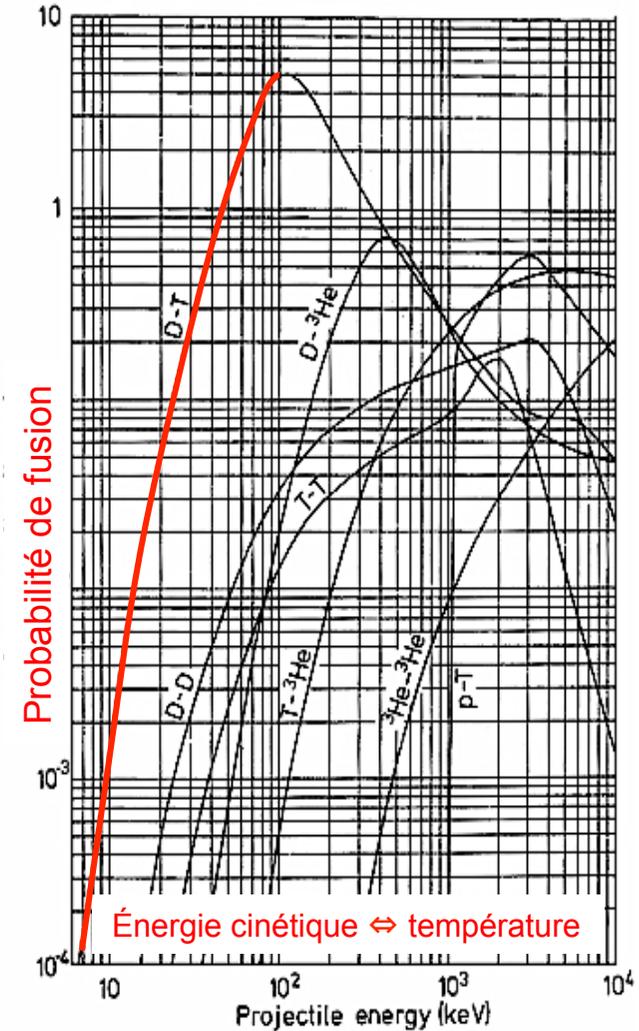
- Fusion : noyau de charge Z_1q + noyau Z_2q

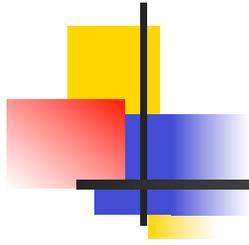


- ➔ barrière coulombienne de hauteur $E = Z_1Z_2q^2/r_{\text{noyau}}$

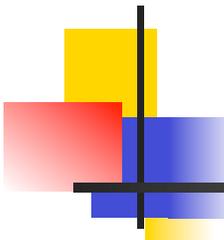


- $Z_1 = Z_2 = 1 \Rightarrow E = 200 \text{ keV} \Leftrightarrow T = 2 \times 10^9 \text{ K}$
- Effet tunnel ➔ probabilité fusion ↗ ↗ dès 10^7 K





ATOMES



Équation de Schrödinger en 3 dimensions

- On cherche des états **stationnaires**, solutions de $\mathbf{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$
- Pour un seul quanton $\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m_e + V(r)$ avec potentiel de Coulomb $V(r) = -q^2/r$
- En trois dimensions spatiales (et en passant aux fonctions d'onde)

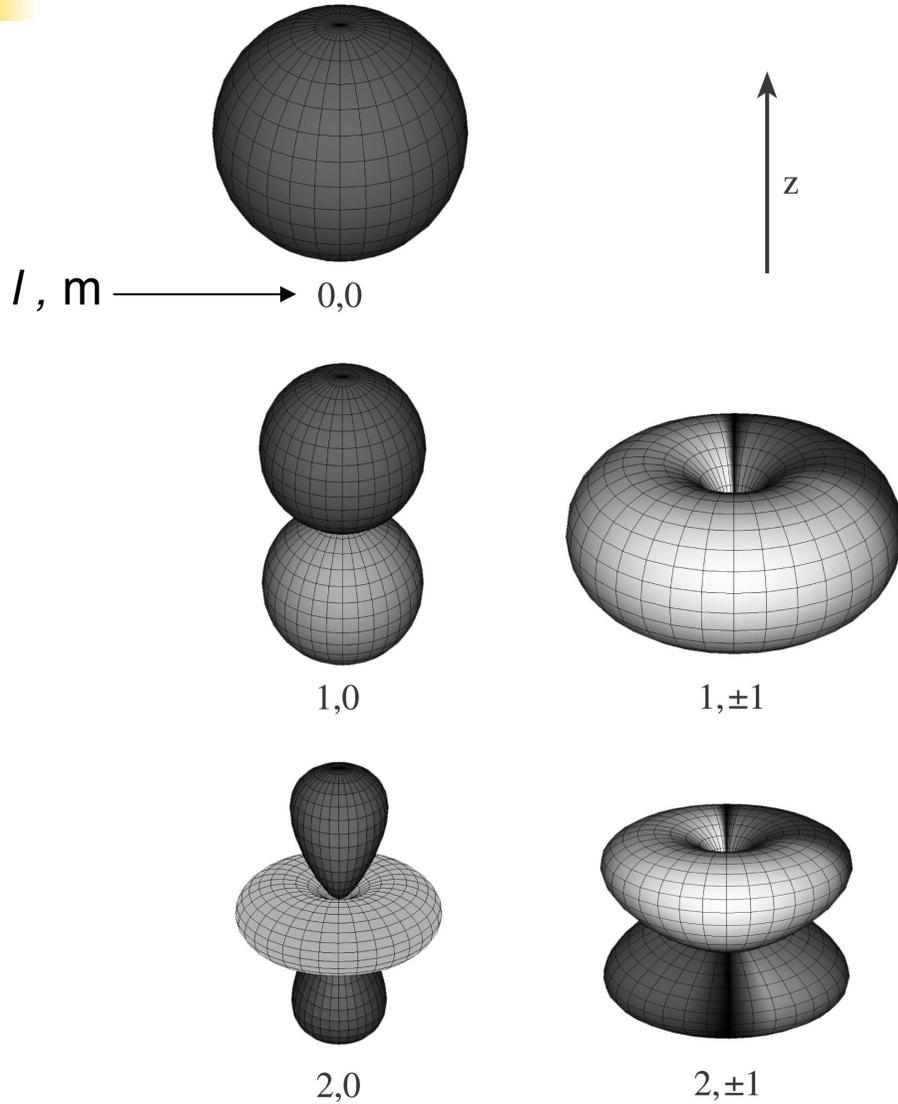
$$\mathbf{H} = -\hbar^2/2m_e \Delta + V(r) \quad \text{où } \Delta \text{ est le laplacien} \quad \Delta f = \partial^2 f / \partial x^2 + \partial^2 f / \partial y^2 + \partial^2 f / \partial z^2$$

- On passe en coordonnées sphériques et on utilise la séparation des variables

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$$

- ➔ une équation différentielle pour $Y(\theta, \varphi)$ qui ne dépend que de θ et φ mais pas de r
 - la solution doit être invariante sous $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$ ➔ périodicité $e^{im\varphi}$ ➔ **nombre quantique m**
 - la solution doit être régulière en $\theta = 0$ et $\theta = \pi$ ➔ polynôme de Legendre de **degré $l > |m|$** en $\cos \theta$ et $\sin \theta$ ➔ **harmoniques sphériques** $Y_{lm}(\theta, \varphi)$
 - pour l donné, il y a $2l + 1$ harmoniques sphériques (de $m = -l$ à $m = +l$)
- ➔ et une équation différentielle pour $R(r)$ qui dépend de $V(r)$ mais pas de θ ni φ

Harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$



$$Y_{00} = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}}$$

$$Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$$

$$Y_{1\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{20} = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_{2\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{2\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}$$

L'atome d'hydrogène

- Équation différentielle radiale pour $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} \right] R = E R$$

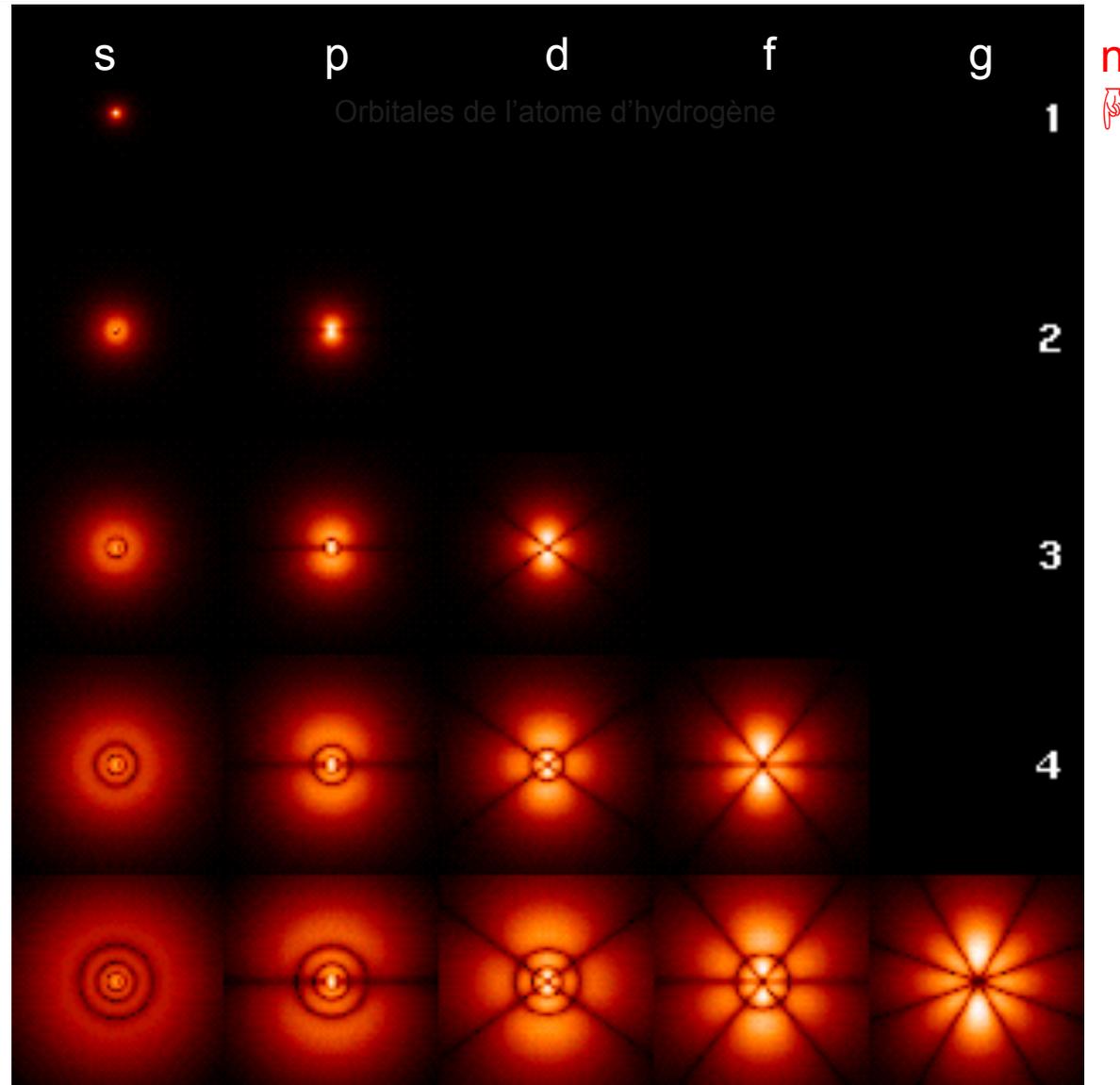
↑ laplacien
 ↑ Coulomb
 ↑ laplacien → moment angulaire
 ↑ énergie

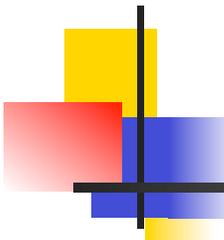
- → des solutions dépendant de l
 - et d'un nombre quantique $n > l \Rightarrow R_{n,l}(r)$ correspondant à des énergies E_n
 - → $E_n = -m_e q^4 / 2\hbar^2 n^2$ ce qui est la forme de Bohr
 - → $R_{10} = e^{-r/r_0}$
 - → $R_{20} = [1 - r/2r_0] e^{-r/2r_0}$
 - → $R_{21} = r/2r_0 e^{-r/2r_0}$
- avec $r_0 = \hbar^2 / m_e q^2 = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m}$ (rayon de Bohr)
- orbites mais des orbitales étendues dans l'espace

Orbitales de l'hydrogène

l 

$s \leftrightarrow l = 0$
 $p \leftrightarrow l = 1$
 $d \leftrightarrow l = 2$
 $f \leftrightarrow l = 3$



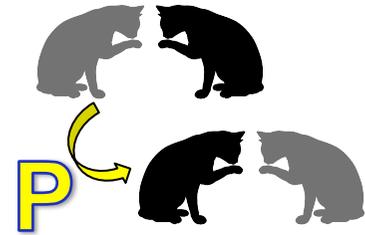


Les autres atomes

- Presque pareil...
- ... sauf que
 - la partie (énergie) cinétique de l'hamiltonien devient $-\hbar^2/2m_e \sum_i \Delta_i$ avec un laplacien pour chaque électron i
 - la partie potentiel devient $V(r_1, r_2 \dots) = - \sum_i Zq^2/r_i + \sum_{i,j} q^2/|r_i - r_j|$
 - Potentiel de Coulomb avec le noyau Z
 - Potentiel de Coulomb entre électrons
 - il faut tenir compte du **spin** des électrons (et du noyau) ☞ matrices de Pauli
 - il faut tenir compte de l'**antisymétrisation** de la fonction d'onde (les électrons sont des fermions)
 - ☞ induit un « couplage spin-orbite » entre composantes de spin et fonctions d'onde spatiales
 - ☞ par ex. l'atome d'hélium a une énergie plus basse quand les spins de ses deux électrons sont inverses (état singulet) que lorsqu'ils sont identiques (état triplet)
 - il faut tenir compte des **corrections relativistes**
- ➡ **approximations** (Wentzel–Kramers–Brillouin, Hartree-Fock...)
- ➡ **résolution numérique**

L'opérateur *Permutation* et les symétries quantiques

- Opérateur permutation **P** pour un état à deux quanta (*Jules* et *Jim*)

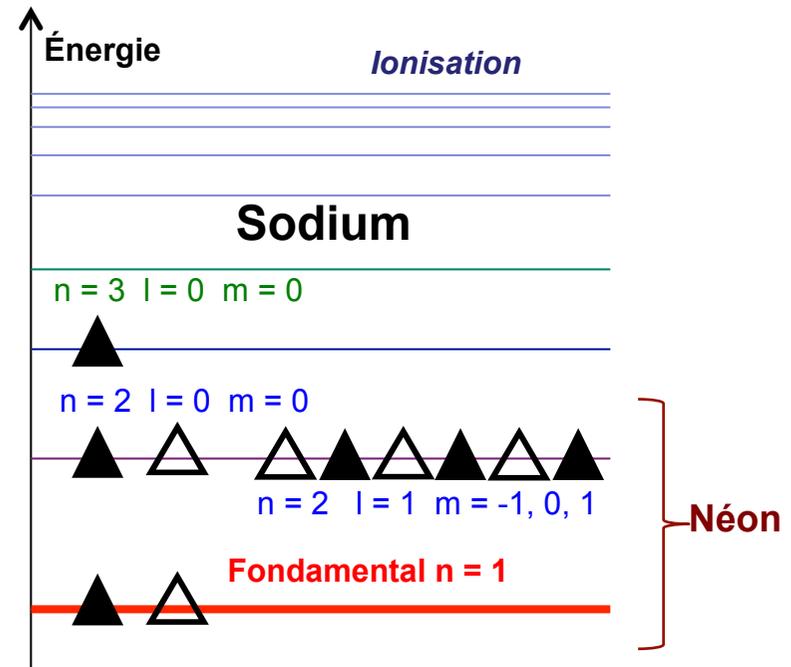


- $|Jules \text{ dans l'état } A, Jim \text{ dans l'état } B\rangle = |A,B\rangle$
- $|Jules \text{ dans l'état } B, Jim \text{ dans l'état } A\rangle = |B,A\rangle$
- Permutation $\mathbf{P}|A,B\rangle = |B,A\rangle$ et $\mathbf{P}|B,A\rangle = |A,B\rangle$
- (*très général: permutation de positions spatiales, de nombres quantiques, etc. selon ce qui est défini comme état A et comme état B*)
- Quelles sont les valeurs propres λ de **P** ? Et les états propres $|\lambda\rangle$?
 - $\mathbf{P}|\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \Rightarrow \mathbf{P}^2|\lambda\rangle = \lambda^2 |\lambda\rangle = |\lambda\rangle$ (puisque $\mathbf{P}^2 = \mathbf{I} = \text{Identité}$) $\Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$
 - $|\lambda\rangle = \alpha |A,B\rangle + \beta |B,A\rangle \Rightarrow \mathbf{P}|\lambda\rangle = \alpha |B,A\rangle + \beta |A,B\rangle = \pm 1 \{ \alpha |A,B\rangle + \beta |B,A\rangle \}$
 - $\Rightarrow |+1\rangle = |A,B\rangle + |B,A\rangle$ (car $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$) \Rightarrow état symétrique
 - $\Rightarrow |-1\rangle = |A,B\rangle - |B,A\rangle$ (car $\alpha = -\beta = 1/\sqrt{2}$) \Rightarrow état antisymétrique
- Sous l'échange de deux quanta, les « bons » états quantiques sont soit symétriques (\rightarrow bosons) soit antisymétriques (\rightarrow fermions \rightarrow principe d'exclusion de Pauli)

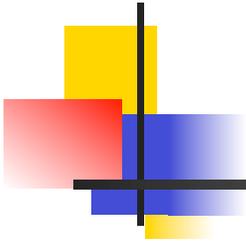
Wolfgang Pauli et structure atomique



- Permutations et statistiques quantiques
 - Bose-Einstein $|\psi\rangle = (|1,2\rangle + |2,1\rangle)/\sqrt{2}$
 - Fermi-Dirac $|\psi\rangle = (|1,2\rangle - |2,1\rangle)/\sqrt{2}$
- → principe de Pauli (1925) : 2 fermions ne se trouvent jamais dans le même état quantique
- → Explication de la structure atomique
 - les électrons ne peuvent pas tous être dans l'état d'énergie minimale
 - ils occupent des orbitales d'énergie de plus en plus élevée
 - → explication du tableau de Mendeleiev



Avec un nombre quantique à deux valeurs, ▲ et △ par exemple, le spin (Pauli 1924)



Merci de votre attention !

