

Particules identiques en mécanique quantique

Chapitre 16

Le cours PH432

7 blocs de mécanique quantique + 11 blocs de physique statistique
sondage en ligne cette semaine

<http://www.enseignement.polytechnique.fr/physique/>

→ cours → 2ème année → physique quantique et statistique PHY432
→ transparents

Contrôles classants:

25 avril 2006, de 16h00 à 18h00. Essentiellement sur la partie mécanique quantique,
+ notions très simples de physique statistique.

29 juin 2006, de 8h00 à 12h00. Essentiellement sur la partie physique statistique,
+ principaux résultats de mécanique quantique

Documents autorisés: livres de cours et de problèmes de l'X, notes personnelles,
documents d'amphi et de PC

Apporter une calculatrice !!!

Notations du cours

Note classante = $[7/18]$ note du contrôle 1 + $[11/18]$ note du contrôle 2

Note de module = note classante + note de PC

Note de PC: "bonus" allant de 0 à 3, qui reflète la participation des
élèves en PC et la qualité des devoirs-maison.

Deux composantes à la note de PC, mécanique quantique et
physique statistique, avec des poids 7/18 et 11/18.

On obtiendra ainsi une note de module allant de 0 à 23.

La position précise du seuil des A,B,C,D sera aux alentours de :

A : note de module ≥ 16

B : note de module ≥ 13

C : note de module ≥ 10

D : note de module ≥ 6

1.

Problèmes liés à l'indiscernabilité en mécanique quantique

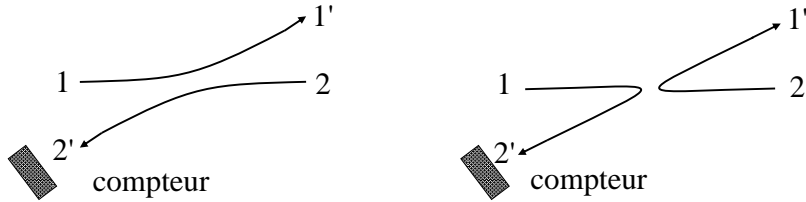
Particules identiques ou particules indiscernables

Particules identiques : toutes leurs propriétés physiques sont les mêmes

deux électrons, deux protons, ...

Concept valable aussi bien classiquement que quantiquement

En mécanique classique, deux particules (même identiques) sont toujours discernables : on peut suivre la trajectoire de chacune.



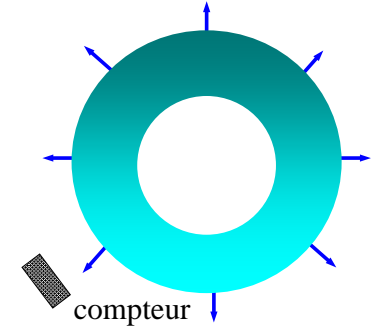
Particules indiscernables en mécanique quantique

Situation physique où les états de particules identiques se recouvrent :

Etat initial, avant une collision :



Etat après la collision :

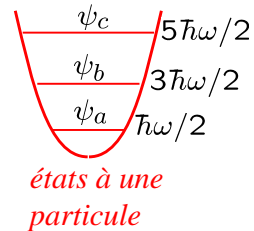


Ambiguïté des principes
vus jusqu'ici

Exemple : deux particules dans un piège harmonique

Particules sans interaction, numérotées 1 et 2

Etat(s) correspondant à la situation physique d'énergie totale $2\hbar\omega$?



Espace de dimension 2

$$\begin{cases} \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \\ \psi_b(x_1) \psi_a(x_2) \\ \lambda \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \mu \psi_b(x_1) \psi_a(x_2) \text{ avec } |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \end{cases}$$

Ces représentations du même état physique sont-elles équivalentes ?

NON ! $\langle x_1 x_2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \text{Re}(\lambda^* \mu)$

Un premier pas vers la solution : l'opérateur d'échange

La numérotation des particules 1 et 2 est arbitraire : les prévisions physiques ne doivent pas dépendre de ce choix.

Si on pose $\hat{P}_{12} [\psi_n(x_1) \psi_m(x_2)] = \psi_m(x_1) \psi_n(x_2)$,
les états physiquement acceptables doivent être tels que :

$$\hat{P}_{12} \Psi(x_1, x_2) = e^{i\delta} \Psi(x_1, x_2)$$

Comme $\hat{P}_{12}^2 = \hat{1}$, les seules possibilités sont $e^{2i\delta} = 1$

$$\Rightarrow e^{i\delta} = \pm 1$$

état symétrique ou antisymétrique dans l'échange de particules

Nécessité d'un nouveau postulat

symétrique : $\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_b(x_1) \psi_a(x_2))$

antisymétrique : $\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_b(x_1) \psi_a(x_2))$

Deux pistes possibles :

- On autorise les états symétriques ET les états antisymétriques, mais pas les combinaisons linéaires des deux.

On renonce au principe de superposition

- On postule qu'un seul des deux types d'états (symétrique OU antisymétrique) est autorisé pour un type donné de particule.

Diminution de la taille de l'espace de Hilbert

Comment décider entre états symétriques et antisymétriques ?

2.

Le postulat de symétrisation ou d'antisymétrisation

Principe de Pauli

Le principe de Pauli

Toutes les particules de la nature appartiennent à l'une ou l'autre des deux classes suivantes :

- les bosons, pour lesquels le vecteur d'état de N particules identiques est symétrique par échange de deux de ces particules
- les fermions, pour lesquels le vecteur d'état de N particules identiques est antisymétrique par échange de deux de ces particules

Le lien entre la « statistique » et le spin

Toutes les particules de spin entier sont des bosons

mésons π , photons

statistique de Bose-Einstein

états symétriques par échange de deux particules

Toutes les particules de spin demi-entier sont des fermions

électrons, neutrinos, quarks, protons, neutrons

statistique de Fermi-Dirac

états antisymétriques par échange de deux particules

Fierz (1939), Pauli (1940), G. Lueders et B. Zumino (1958)

Particules élémentaires et particules composées

Pour des particules composées, le théorème reste valable si l'énergie en jeu est suffisamment basse pour ne pas "casser" ces particules.

protons, neutrons (3 quarks): fermions

particules α , atomes d'hydrogène : bosons

Collision entre deux atomes d'hydrogène d'énergie cinétique $\ll 13.6$ eV

température ordinaire : $k_B T \simeq 25$ meV

Evolution hamiltonienne

\hat{H} : hamiltonien à N particules identiques (bosons ou fermions)

par exemple :
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2$$

Toutes les particules jouent un rôle identique dans \hat{H} (sinon elles ne seraient pas identiques!) $\longrightarrow [\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0$

→ Un vecteur d'état $|\Psi\rangle$ initialement symétrique ou antisymétrique gardera cette propriété au cours de l'évolution

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\Psi\rangle$$

Cas des bosons : N particules

Base des états à une particule $\{|\psi_n\rangle, n = 1, 2, \dots\}$

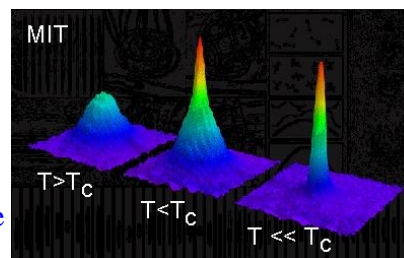
On numérote les particules $1, 2, \dots, N$

Situation physique particulière : N particules dans le même état ψ_a

$$|\Psi\rangle = |1 : \psi_a\rangle \otimes |2 : \psi_a\rangle \otimes \dots \otimes |N : \psi_a\rangle$$

Condensats de Bose-Einstein :

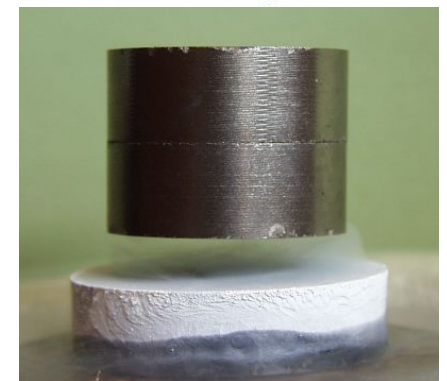
à suffisamment basse température,
1 million d'atomes accumulés dans
l'état fondamental d'un piège magnétique



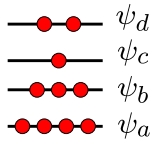
Autre manifestation d'un état macroscopiquement occupé

supraconductivité
de certains métaux
à basse température

formation de paires liées
d'électrons (Cooper)

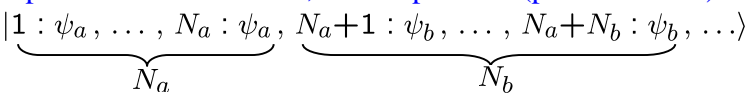


Cas des bosons : N particules (suite)

Etat physique caractérisé par les nombres d'occupation : 

N_a particules dans l'état ψ_a
 N_b particules dans l'état ψ_b

 $N_a + N_b + \dots = N$

Pour N particules discernables, un état possible (parmi d'autres) serait :
 $|1 : \psi_a, \dots, N_a : \psi_a, N_a+1 : \psi_b, \dots, N_a+N_b : \psi_b, \dots\rangle$


Pour N bosons identiques, somme sur les $N!$ permutations p possibles:
 $|\Psi\rangle \propto \sum_p |1 : \psi_{p(1)}, 2 : \psi_{p(2)}, \dots, N : \psi_{p(N)}\rangle$ **Etat non dégénéré**

3.

Conséquences physiques du principe de Pauli

Un modèle simplifié pour l'atome d'hélium

Noyau de charge $Z = 2$ en $r = 0$; deux électrons numérotés 1 et 2 :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$$

On va négliger ici le terme de répulsion entre électrons e^2/r_{12} .
 Cette approximation n'est valable en toute rigueur que si $Z \gg 1$

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i}$$

Energie des états liés de \hat{H}_i

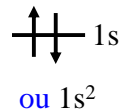
$$\varepsilon_n = -\frac{Z^2 E_I}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad E_I = 13.6 \text{ eV}$$

L'atome d'hélium (suite)

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad \text{Niveaux d'énergie à une particule : } \varepsilon_n = -\frac{Z^2 E_I}{n^2}$$

Niveau fondamental : on met chaque électron dans le niveau fondamental (état 1s en $\exp(-Zr_i/a_1)$)

- même état orbital pour les deux électrons
- l'état de spin doit être antisymétrique



$$|1s; 1s\rangle \otimes |s = 0, m = 0\rangle$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1s}(\vec{r}_1) \psi_{1s}(\vec{r}_2)$$

énergie : $2\varepsilon_1 = -8E_I$
 $-8 \times 13.6 = -108.8 \text{ eV}$
 exp.: -79 eV

L'atome de lithium

Noyau $Z = 3$ et 3 électrons. Si on néglige la répulsion entre électrons :

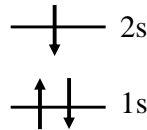
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \hat{H}_i \quad \hat{H}_i = \frac{\tilde{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r_i} \quad \epsilon_n = -\frac{Z^2 E_I}{n^2}$$

Etat fondamental $1s^2 2s$ d'énergie : $2\epsilon_1 + \epsilon_2$

→ un électron dans l'état 1s, de spin +

→ un électron dans l'état 1s, de spin -

→ un électron dans l'état 2s, de spin ±

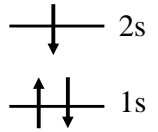


$$\epsilon_n = -\frac{Z^2 E_I}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad E_I = 13.6 \text{ eV}$$

L'atome de lithium (suite)

Ecriture explicite de l'état fondamental ? Posons :

$$|\psi_1\rangle = |1s+\rangle \quad |\psi_2\rangle = |1s-\rangle \quad |\psi_3\rangle = |2s-\rangle$$



$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ \begin{aligned} &|1: \psi_1; 2: \psi_2; 3: \psi_3\rangle - |1: \psi_2; 2: \psi_1; 3: \psi_3\rangle \\ &- |1: \psi_3; 2: \psi_2; 3: \psi_1\rangle - |1: \psi_1; 2: \psi_3; 3: \psi_2\rangle \\ &+ |1: \psi_2; 2: \psi_3; 3: \psi_1\rangle + |1: \psi_3; 2: \psi_1; 3: \psi_2\rangle \end{aligned} \right\}$$

ce qui s'écrit encore

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |1: 1s+\rangle & |1: 1s-\rangle & |1: 2s-\rangle \\ |2: 1s+\rangle & |2: 1s-\rangle & |2: 2s-\rangle \\ |3: 1s+\rangle & |3: 1s-\rangle & |3: 2s-\rangle \end{vmatrix}$$

**généralisation immédiate
aux systèmes à N électrons:
déterminant de Slater**

La méthode du champ moyen

Pour déterminer plus quantitativement la position des niveaux d'énergie d'un atome à Z électrons :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \hat{H}_i \quad \hat{H}_i = \frac{\tilde{p}_i^2}{2m_e} + V_{\text{eff}}(\hat{r}_i)$$

où $V_{\text{eff}}(r)$ décrit :

→ le potentiel créé par le noyau en $-Ze^2/r$

→ un potentiel central représentant de manière approchée l'effet sur un électron des $Z-1$ autres électrons. On le déduit de la densité de charge obtenue par résolution de $\hat{H}_i \psi(\vec{r}_i) = \epsilon \psi(\vec{r}_i)$

méthode auto-cohérente (ou self-consistente)

Emission inhibée (fermions) et émission stimulée (bosons)

Le neutron est une particule instable. Dans l'espace libre :

$$n \longrightarrow p^+ + e^- + \text{antineutrino } \bar{\nu}_e \quad \text{durée de vie : } 900 \text{ s}$$

Mais il est stable dans les noyaux, sauf en cas de radioactivité β^-

Exemples : noyau d'hélium 4 (c'est-à-dire une particule α)

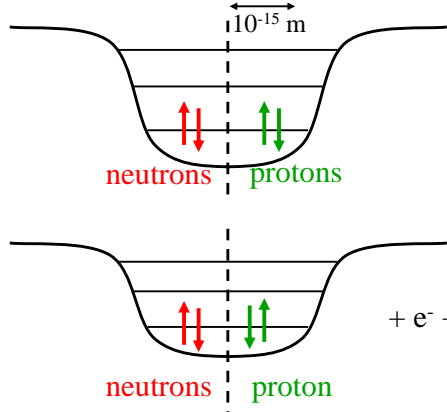
Deux protons + deux neutrons : stable

noyau de tritium

Un proton + deux neutrons : instable

Noyau d'hélium et noyau de tritium

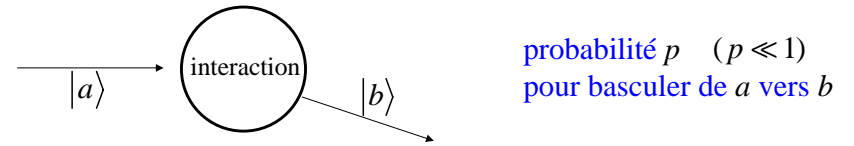
Modèle simple dans lequel on simule l'interaction entre chaque nucléon (proton ou neutron) et les $A-1$ autres par un puits de potentiel



Noyau d'hélium 4

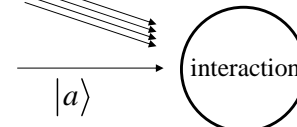
Noyau de tritium \rightarrow **helium 3**
(durée de vie 12 ans)
description quantitative compliquée par la répulsion coulombienne entre protons

L'émission stimulée (bosons)



probabilité p ($p \ll 1$)
pour basculer de a vers b

N particules bosoniques dans l'état $|b\rangle$

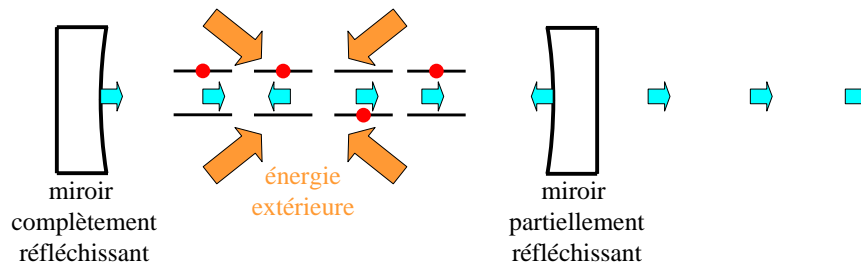


probabilité $(N+1)p$
si $(N+1)p \ll 1$

$N+1$ particules dans l'état $|b\rangle$

Le principe du laser

Avec une source d'énergie extérieure (décharge dans un gaz, passage d'un courant dans une diode,...), on crée une "inversion de population".



Nombre de photons dans le mode laser :

$$\dot{N} = -\Gamma N + G(N+1) \quad \text{effet laser si : gain } (G) > \text{perte } (\Gamma)$$

Quelques lasers...

