

Particules identiques en mécanique quantique

Chapitre 16

Le cours PH432

aujourd'hui : dernier cours de mécanique quantique

sondage en ligne cette semaine pour cette partie MQ
délégués : Kais Boubaker et Daniel Suchet

<http://frankiz.polytechnique.fr/sondage.php?id=636>

Contrôles classants :

- ➡ Lundi 12 avril, de 10h30 à 12h30, portant sur la mécanique quantique
- ➡ Jeudi 1 juillet, de 9h00 à 12h00. Essentiellement sur la physique statistique, + principaux résultats de mécanique quantique

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

Apporter une calculatrice !!!

Programme détaillé sur <http://www.lkb.ens.fr/~dalibard/> (enseignement)

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 QCM 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 obtient ainsi une note de module allant de 0 à 23.
La position du seuil des A,B,C,D sera :

- A : note de module ≥ 16
- B : note de module ≥ 13
- C : note de module ≥ 9
- D : note de module ≥ 5

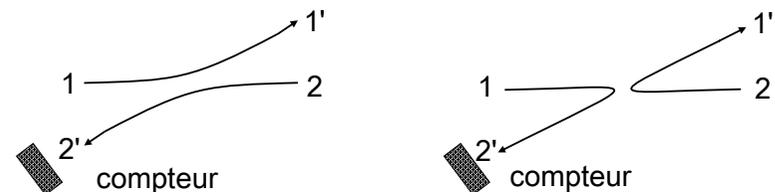
Particules identiques ou particules indiscernables ?

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.



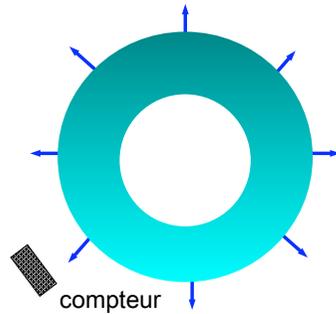
Particules indiscernables en mécanique quantique

Situation physique où les états de particules identiques se recouvrent :

Etat initial,
avant une collision :



Etat après
la collision :

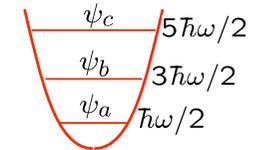


Ambiguïté des principes
vus jusqu'ici

Exemple : deux particules dans un piège harmonique

Particules sans interaction, numérotées 1 et 2

Etat(s) $\Psi(x_1, x_2)$ correspondant à la
situation physique d'énergie totale $2\hbar\omega$?



états à une
particule

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

Ces représentations du même état physique sont-elles équivalentes ?

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

Ambiguïté des principes vus jusqu'ici !!!

1.

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

Pour deux particules: $\Psi(1, 2) = \Psi(2, 1)$

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

Pour deux particules: $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$

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)

Cas de deux particules de spin 0 = 2 bosons

On numérote les particules : 1, 2

$$\text{Espace des états} \begin{cases} \text{particule 1 : } E_{\text{externe}}^{(1)} \leftrightarrow \{\psi_n(\vec{r}_1)\} \\ \text{particule 2 : } E_{\text{externe}}^{(2)} \leftrightarrow \{\psi_k(\vec{r}_2)\} \end{cases}$$

$$\text{Particules discernables : état générique } \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{n,k} C_{n,k} \psi_n(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)$$

Pour des particules indiscernables bosoniques, on veut :

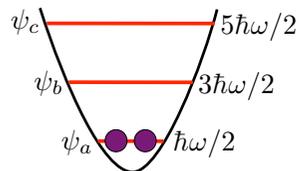
$$\begin{aligned} \text{pour tout } (\vec{r}_1, \vec{r}_2) : \sum_{n,k} C_{n,k} \psi_n(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) &= \sum_{n,k} C_{n,k} \psi_k(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2) \\ &\Rightarrow C_{n,k} = C_{k,n} \end{aligned}$$

$$\text{Etat générique } \sum_{n,k} C_{n,k} (\psi_n(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) + \psi_k(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2))$$

base de l'espace de Hilbert de 2 bosons identiques de spin 0

Exemples pour deux bosons indépendants de spin 0

Particules confinées dans un puits harmonique à une dimension



Etat fondamental pour deux particules ?

$$\Psi_{\text{fond.}}(x_1, x_2) = \psi_a(x_1) \psi_a(x_2)$$

$$E_{\text{fond.}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega$$

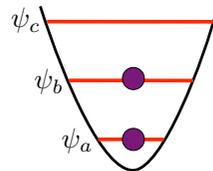
$$\text{Premier niveau excité : } E = \frac{3\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} = 2\hbar\omega$$

Particules discernables : sous-espace de dimension 2

$$\{\psi_a(x_1) \psi_b(x_2), \psi_b(x_1) \psi_a(x_2)\}$$

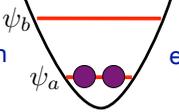
Bosons indiscernables : sous-espace de dimension 1

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_b(x_1) \psi_a(x_2)}{\sqrt{2}}$$



Cas de deux fermions indépendants de spin 1/2

$$\text{particule 1 : } E_{\text{externe}}^{(1)} \otimes E_{\text{spin}}^{(1)} \leftrightarrow \{\psi_n(\vec{r}_1)\} \{|1 : \pm\rangle\} \quad \text{particule 2 : idem}$$

La configuration  est-elle compatible avec $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$?

$$\Psi(1, 2) = \psi_a(x_1) \psi_a(x_2) [\alpha|+, +\rangle + \beta|+, -\rangle + \gamma|-, +\rangle + \delta|-, -\rangle]$$

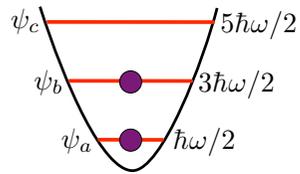
$$\Psi(2, 1) = \psi_a(x_1) \psi_a(x_2) [\alpha|+, +\rangle + \beta|-, +\rangle + \gamma|+, -\rangle + \delta|-, -\rangle]$$

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1) \Rightarrow \begin{aligned} \alpha &= -\alpha = 0 & \gamma &= -\beta \\ \delta &= -\delta = 0 & \beta &= -\gamma \end{aligned}$$

$$\text{Finalement : } \Psi(1, 2) = \psi_a(x_1) \psi_a(x_2) \frac{|+, -\rangle - |-, +\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{état singulet}$$

discernables : dimension 4 \longrightarrow indiscernables : dimension 1

Deux fermions de spin 1/2 (suite)



Pour des particules discernables, le sous-espace correspondant serait de dimension 8 :

$$\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) |\pm, \pm\rangle \text{ et } \psi_b(x_1) \psi_a(x_2) |\pm, \pm\rangle$$

Particules indiscernables : les états compatibles avec $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$ sont dans le sous-espace de dimension 4 engendré par :

$$\frac{\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_b(x_1) \psi_a(x_2)}{\sqrt{2}} \frac{|+, -\rangle - |- , +\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{singulet}$$

$$\frac{\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) - \psi_b(x_1) \psi_a(x_2)}{\sqrt{2}} \begin{cases} |+, +\rangle \\ |+, -\rangle + |- , +\rangle \\ \sqrt{2} \\ |-, -\rangle \end{cases} \quad \text{triplet}$$

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 le même rôle dans \hat{H} , sinon elles ne seraient pas identiques !

Exercice : montrer qu'un vecteur d'état $|\Psi\rangle$ initialement symétrique ou antisymétrique gardera cette propriété au cours de l'évolution

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

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): $S=1/2 \longrightarrow$ fermions

particules α , atome d'hydrogène (état fondamental) : $S=0 \longrightarrow$ bosons

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

température ordinaire : $k_B T \simeq 25$ meV

Comment savoir si une espèce atomique donnée est un boson ou un fermion ?

^{22}Na : 11 électrons, 11 protons, 11 neutrons, $S_{\text{fond}}=5/2 \longrightarrow$ fermion

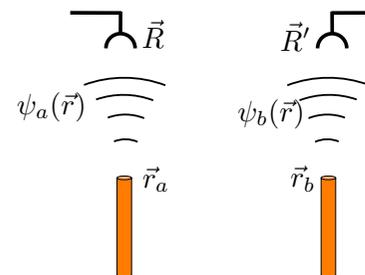
^{23}Na : 11 électrons, 11 protons, 12 neutrons, $S_{\text{fond}}=1 \longrightarrow$ boson

Neutralité : $N_{\text{électrons}} = N_{\text{protons}}$ et c'est donc la parité de N_{neutrons} qui est décisive

Quand faut-il tenir compte du principe de Pauli ?

en principe tout le temps, mais...

\rightarrow une source en \vec{r}_a générant un paquet d'ondes $\psi_a(\vec{r})$. Proba. de détecter une particule en \vec{R} : $|\psi_a(\vec{R})|^2$



\rightarrow une source en \vec{r}_a et une source en \vec{r}_b . Proba de détecter une particule en \vec{R} et une autre en \vec{R}' ?

Particules discernables :

$$P(\vec{R}, \vec{R}') = |\psi_a(\vec{R})\psi_b(\vec{R}')|^2 + |\psi_a(\vec{R}')\psi_b(\vec{R})|^2$$

Bosons identiques de spin nul : $P(\vec{R}, \vec{R}') = \left| \psi_a(\vec{R})\psi_b(\vec{R}') + \psi_a(\vec{R}')\psi_b(\vec{R}) \right|^2$

Si le recouvrement de ψ_a et ψ_b est négligeable, i.e. si $|\psi_a(\vec{R})\psi_b(\vec{R}')| \gg |\psi_a(\vec{R}')\psi_b(\vec{R})|$ alors les expressions des cas discernable et indiscernable coïncident

2.

Conséquences physiques du principe de Pauli :
l'état fondamental d'un système à N particules

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)

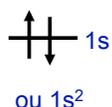
$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad \text{Niveaux d'énergie à une particule : } \varepsilon_n = -\frac{Z^2 E_I}{n^2}$$

Etat fondamental : on met chaque électron dans le niveau fondamental
 $n = 1$ (état 1s) de fonction d'onde $\exp(-Zr_i/a_1)$ avec $Z = 2$

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

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

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



Dans ce modèle simpliste : $E_{\text{fond}} = -4E_I - 4E_I = -8 E_I$

Valeur mesurée expérimentalement : $E_{\text{fond.}} = -5.8 E_I$

L'atome de lithium

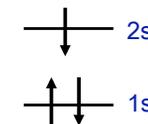
Noyau $Z = 3$ et 3 électrons. Si on néglige la répulsion entre électrons :

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

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

Etat fondamental $1s^2 2s$ d'énergie : $2\varepsilon_1 + \varepsilon_2$

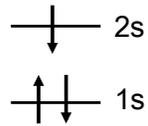
- ➔ un électron dans l'état 1s, de spin +
- ➔ un électron dans l'état 1s, de spin -
- ➔ un électron dans l'état 2s, de spin \pm



Dans ce modèle simpliste : $E_{\text{fond}} = -9E_I - 9E_I - \frac{9E_I}{4} = -20.25 E_I$

valeur mesurée expérimentalement : $E_{\text{fond}} = -14.96 E_I$

L'atome de lithium (suite)



Ecriture explicite de l'état fondamental ? Posons :

$$|\psi_a\rangle = |1s+\rangle \quad |\psi_b\rangle = |1s-\rangle \quad |\psi_c\rangle = |2s-\rangle$$

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

ce qui s'écrit aussi :

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

déterminant de Slater

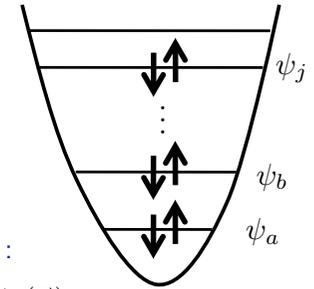
Etat fondamental d'un système à N fermions de spin $\frac{1}{2}$ sans interaction

N particules dans un potentiel extérieur $V_{\text{ext}}(\vec{r})$:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \frac{\hat{p}_n^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}_n)$$

Fonctions propres de l'hamiltonien à une particule :

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}) \rightarrow \psi_a(\vec{r}), \psi_b(\vec{r}), \dots, \psi_j(\vec{r})$$



Etat fondamental à N particules : déterminant de Slater $N \times N$

$$|\Psi_{\text{fond}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |1 : \psi_a+\rangle & |1 : \psi_a-\rangle & \dots & |1 : \psi_j-\rangle \\ |2 : \psi_a+\rangle & |2 : \psi_a-\rangle & \dots & |2 : \psi_j-\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |N : \psi_a+\rangle & |N : \psi_a-\rangle & \dots & |N : \psi_j-\rangle \end{vmatrix}$$

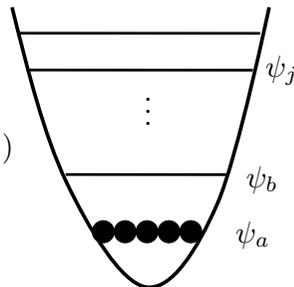
Fondamental d'un système de N bosons sans interaction

Même situation qu'à la diapositive précédente, mais avec des bosons de spin nul

$$\Psi_{\text{fond}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \psi_a(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2) \dots \psi_a(\vec{r}_N)$$

énergie : NE_a

Condensat de Bose-Einstein



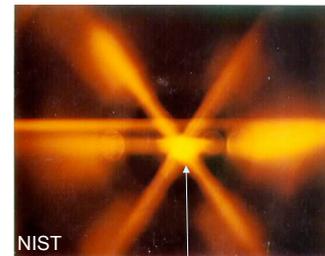
Si les bosons ont un spin non nul : $|\Psi_{\text{fond}}\rangle = \psi_a(\vec{r}_1) \dots \psi_a(\vec{r}_N) |\Phi_{\text{spin}}\rangle$

où $|\Phi_{\text{spin}}\rangle$ est symétrique par échange de deux particules

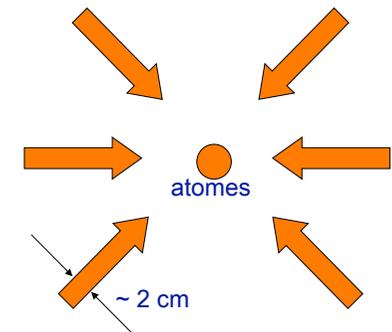
également d'énergie : NE_a

Comment former un condensat de Bose-Einstein (1) ?

1^{ère} étape : pré-refroidissement d'un gaz d'atomes par laser



un milliard d'atomes de sodium ^{23}Na à 100 microkelvins



Pour un choix judicieux de la fréquence des lasers, la superposition des 6 forces de pression de radiation crée une force de frottement visqueux, comme pour une cuillère dans un pot de miel

diminue l'agitation thermique \rightarrow refroidissement

Comment former un condensat de Bose-Einstein (2) ?

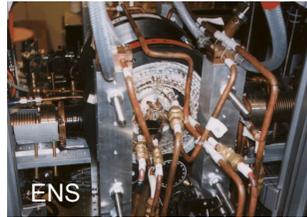
2^{ème} étape : on branche un « piège magnétique » autour des atomes pré-refroidis

Energie d'un dipôle magnétique dans le champ

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

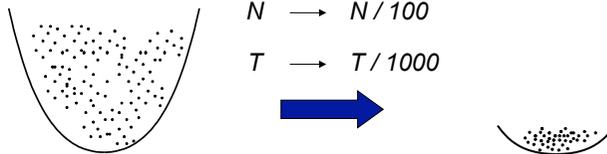
Si le dipôle et le champ ont même direction et des sens opposés :

$$E = +|\vec{\mu}| |\vec{B}|$$



Cuvette de potentiel au voisinage d'un point où $|\vec{B}(\vec{r})|$ est minimum

3^{ème} étape :
refroidissement
par évaporation



$$N \rightarrow N/100$$

$$T \rightarrow T/1000$$



La méthode du champ moyen

Calcul plus précis des niveaux d'énergie de N particules en interaction:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\hat{r}_n) \right) + \sum_{(n,n')} W_{\text{int.}}(\hat{r}_n - \hat{r}_{n'})$$

problème non soluble analytiquement même pour $N=3$

Une méthode approchée consiste à étudier $\hat{H} = \sum_{n=1}^N \frac{\hat{p}_n^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\hat{r}_n)$
où $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ est la somme :

- ➔ du potentiel extérieur (i.e. le noyau d'un atome) : $V_{\text{ext}}(\vec{r})$
- ➔ du potentiel représentant de manière approchée l'effet sur une particule des $N-1$ autres. On le déduit de la densité de particules obtenue à partir des fonctions propres de

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\hat{r})$$

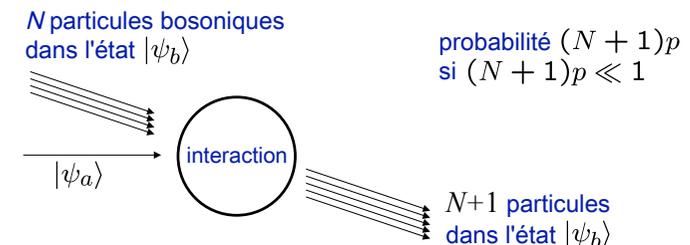
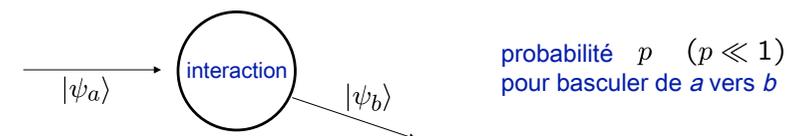
méthode « auto-cohérente »

3.

Conséquences physiques du principe de Pauli

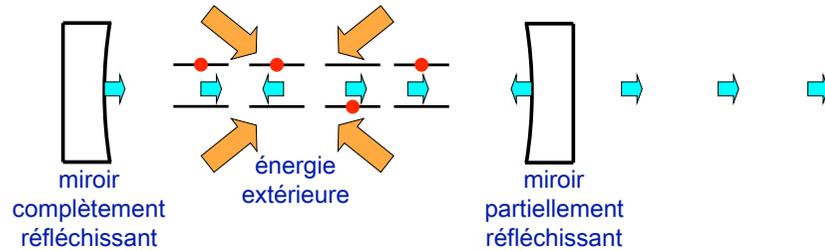
l'émission stimulée et l'émission inhibée

L'émission stimulée (bosons)



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".



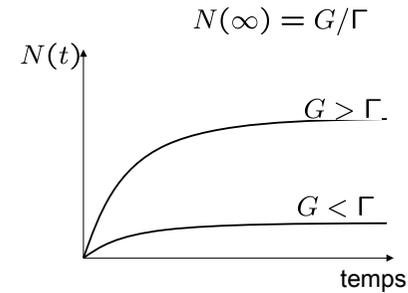
Nombre de photons dans le mode laser :

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

L'effet Laser

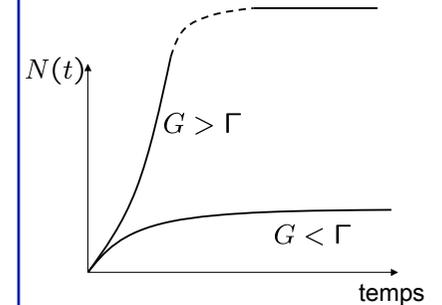
S'il n'y avait pas d'émission stimulée

$$\frac{dN}{dt} = -\Gamma N + G(N + 1)$$



En présence d'émission stimulée

$$\frac{dN}{dt} = -\Gamma N + G(N + 1)$$



L'émission inhibée (fermions)

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



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)

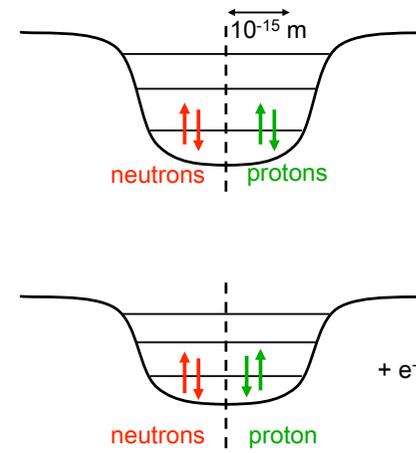
Deux protons + deux neutrons : stable

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

Nous sommes sauvés par le principe de Pauli

Noyau de tritium \longrightarrow hélium 3

(durée de vie 12 ans)

description quantitative compliquée par la répulsion coulombienne entre protons

+ e^- + $\bar{\nu}$