

UNIVERSITÉ LIBRE DE BRUXELLES

RAPPELS THÉORIQUES

Physique quantique et statistique

PHYS-H-200

Auteur :
Enes ULUSOY

*Notes grandement retranscrites des
rappels de Nicolas Seigneur*

Année 2014 - 2015

TP 1 : Relativité et lois de conservation

- Energie d'une particule libre

$$E = E_0 + T \quad \text{avec } E_0 = m_0 c^2 \quad (1)$$

- e^- : $E_0 \approx 500 \text{ keV}$
- p : $E_0 \approx 1 \text{ GeV}$, $m \approx 1,67 \cdot 10^{-27}$ et $r \approx 0,8 \text{ fm}$
 \Rightarrow **IBA** : $T = 230 \text{ MeV}$, **LHC** : $T = 7 \text{ TeV}$

- Relation importante dans le **domaine ultrarelativiste**

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} \quad (2)$$

Pour un **photon** : $E = pc$

- Pour les particules dans le **domaine non relativiste**, on fait les calculs avec

$$T = \frac{1}{2} m v^2 \quad \text{et} \quad \vec{p} = m \vec{v} \quad (3)$$

- Longueur d'onde de De Broglie

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{h}{p} \quad \text{avec } \hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} \quad (4)$$

- Pendant une réaction, il y a conservation de **Q** (charge), **E** (énergie) et **p** (impulsion).
- La masse du système de particules libres **est inférieure** à la somme des masses des constituants. Ceci est dû à l'énergie de liaison (ex : $E_L(h) = 1 \text{ Ryd} = 13,6 \text{ eV}$)

TP 2 : Postulats et modèles unidimensionnels

Equation de Schrödinger

- Equation générale

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H \quad (5)$$

- Forme stationnaire

$$H\psi = E\psi \quad (6)$$

- Hamiltonien $H = T + V$ (= opérateur)
- Opérateur énergie cinétique unidimensionnelle

$$T = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (7)$$

- Equation homogène : $\phi = c\psi$ est une fonction d'onde $\forall c \in \mathbb{C}$ (après normalisation)

- Potentiel confinant

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} = \infty \quad (8)$$

Dans ce cas là, les énergies sont **discrètes** et les $\psi \in L^2(\psi)$ sont **liées**

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (9)$$

avec a qui est la coordonnée du potentiel.

Notation de Dirac

- Définition

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^* \psi d\vec{r} = \int |\psi|^2 d\vec{r} = 1 \quad (\text{si normée}) \quad (10)$$

- Propriétés

- $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$
- Si $|\phi\rangle = c|\psi\rangle$ alors $\langle \phi | = c^* \langle \psi |$
- $P(E = E_i) = |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2$

- Valeur moyenne d'une observable A

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^* A \psi d\vec{r} \quad (11)$$

Par exemple : $A = p_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \Rightarrow \langle p_x \rangle = \langle \psi | p_x | \psi \rangle = -i\hbar \int \psi^* \frac{d}{dx} \psi dx$

TP 3 : Maser à amoniac

- Equation de Schrödinger stationnaire à une dimension

$$H\psi = E\psi \Leftrightarrow \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi = E\psi \quad (12)$$

- Pour un potentiel plus complexe de la forme

$$\begin{cases} 0 & a < |x| < b \\ V_0 & |x| < a \\ \infty & |x| > b \end{cases} \quad (13)$$

La résolution de l'équation de Schrödinger devra être suivie de l'application des **conditions de continuité** et des **conditions aux limites** qui, dans ce cas, serait du type

$$\begin{cases} \psi(x_0^+) = \psi(x_0^-) \\ \psi'(x_0^+) = \psi'(x_0^-) \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \psi(b) = 0 \\ \psi(-b) = 0 \end{cases} \quad (14)$$

Ils sont ainsi les **conditions de quantification de l'énergie**.

- Pour obtenir l'équation de Schrödinger non-stationnaire, il suffit de multiplier par l'exponentielle

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \psi = H\psi \Rightarrow \phi_i(x, t) = \psi_i(x) \exp\left(\frac{-iE_i t}{\hbar}\right) \quad (15)$$

TP 4 : Marche de potentiel descendante et cyclotron

Le rappel théorique est le même que celui du précédent. On doit seulement rappeler que

- Impulsion et relation de De Broglie

$$p = \sqrt{2m(E - V_0)} \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (16)$$

- Coefficients de **réflexion** et de **transmission**

Pour une fonction de la forme

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} \end{cases} \Leftrightarrow \psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} \\ Te^{ikx} \end{cases} \quad (17)$$

où R est le coefficient de **réflexion** et T le coefficient de **transmission**. Le coefficient D est nul puisqu'on considère qu'il n'y a pas d'onde venant de la droite lors d'un **effet tunnel**.

- Le Volt

$$V = \frac{eV}{C} \quad (18)$$

Il est toujours utile de savoir ça, surtout dans ce tp où on donne un voltage pour l'ion H_2^+ . On doit donc multiplier par la charge de l'ion pour obtenir le potentiel en electron-volt. Dans ce tp, puisqu'on a un seul électron en trop, $V = eV$.

TP 5 : Moments cinétiques orbital et de spin, polarisation de la lumière

Moment cinétique orbital

- On a $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$ qui est obtenu par

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (19)$$

- Commutation

$$[L_i, L_j] = i\hbar L_k \quad \text{et} \quad [L^2, L_i] = 0 \quad (20)$$

- Fonctions propres communes à L^2 et L_z

$$Y_l^m(\theta, \phi) = c_{norm} \cdot e^{im\phi} \cdot \sin^{|m|}(\theta) \cdot p^{l-|m|}(\cos \theta) \quad (21)$$

avec l et m respectivement le **nombre quantique de moment cinétique orbital** et **nombre quantique magnétique** (projeté sur l'axe z)

- Avec l naturel et $m \in [-l, l] \Rightarrow (2l + 1)$ valeurs de m

$$\begin{cases} L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \\ L_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \end{cases} \quad (22)$$

Moment cinétique de spin

- On a $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ où les S_j sont les **matrices de Pauli**

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (23)$$

avec

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (24)$$

- Commutation

$$[S_i, S_j] = i\hbar S_k \quad \text{et} \quad [S^2, S_i] = 0 \quad (25)$$

- Fonctions propres communes à S^2 et S_z

$$\chi_s^{m_s} \quad (\text{spineur}) \quad (26)$$

où s est le **spin** et m_s la projection du spin sur l'axe z .

- pour l'électron, le proton et le neutron, le spin vaut $1/2$ et on les appelle **fermion**
- Avec $s = 1/2$ et $m_s \in [-s, s] \Rightarrow m_s = \pm 1/2 \Rightarrow (2s + 1)$ valeurs

$$\begin{cases} S^2 \chi_{m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{m_s} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{m_s} \\ S_z \chi_{m_s} = \hbar m_s \chi_{m_s} = \pm \frac{1}{2} \hbar \chi_{m_s} \end{cases} \quad (27)$$

- Photon $\Rightarrow s = 1$ et on les appelle **Boson**
- Etat **up** (à gauche) et état **down** (à droite)

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

TP6 : Système hydrogéoïde

- Unité : le Rydeberg

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0,529.10^{-7} \text{ mm} \quad Ryd = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} = 13,6 \text{ eV} \quad (29)$$

- Fonction d'onde

$$\psi_{Hyd}(\vec{R}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (30)$$

où, pour l'état $1s$ de l'hydrogène seulement (les autres sont donnés par une formule dégueu qui sera sans doute donnée)

$$R_{nl} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (31)$$

- Intégrale de normalisation

Lorsqu'on nous demande de vérifier si les fonctions R_{nl} et Y_l^m sont normées, il faut intégrer respectivement selon

$$r^2 dr \quad \text{et} \quad \sin \theta d\theta d\varphi \quad (32)$$

- Energie quantifié

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ryd \quad (33)$$

avec

- $n = n_R + l + 1 \geq 1$
- $l \in \mathbb{N} = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow$ couches s, p, d, f, g, ...
- $m \in [-l, l]$

- Système hydrogénoïde

$$a_0, Ryd \Leftrightarrow a_\mu = \frac{m_e}{\mu} a_0, Ryd_\mu = \frac{\mu}{m_e} Ryd \quad (34)$$

avec $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \dots$

TP 7 : Composition de moments cinétiques

- $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla})$
- $\vec{S} = spin$ et s est le nombre quantique de spin qui soit

$$s \in \frac{\mathbb{N}}{2} = \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \right\} (fermions) \quad \text{soit} \quad s \in \mathbb{N} (bosons) \quad (35)$$

- m_s : projection du spin sur l'axe z et varie par pas de 1 entre $-s \leq m_s \leq s$
- l : nombre quantique de moment cinétique orbital ($l \in \mathbb{N}$)
- m : nombre quantique magnétique avec $m \in \mathbb{Z} \mid -l \leq m \leq l$
- Pour un nombre quantique quelconque $\underbrace{\vec{j}}_{j,m} = \underbrace{\vec{j}_1}_{j_1,m_1} + \underbrace{\vec{j}_2}_{j_2,m_2}$ alors on utilise la **relation triangulaire**

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (36)$$

- Le nombre de valeur possible pour m est toujours $2j + 1$ valeurs
- Dans le cas d'un électron plongé dans un champ magnétique, il faut tenir compte de l'action de ce champ dans le hamiltonien en rajoutant un terme W au hamiltonien de l'état non perturbé H_0

$$H = H_0 + W \quad (37)$$

avec $W = -\vec{M}\vec{B}$ et $\vec{M} = -\frac{e}{2m_e}(\vec{L} + g.\vec{S})$. g est le facteur gyromagnétique ≈ 2

TP 8 : Les atomes

- Moment cinétique \vec{J} (opérateur vectoriel) : 2 nombre quantiques
 - j (≥ 0) : entier ou demi-entier (valeur propre de $J^2 = \hbar^2 j(j+1)$)
 - $m \in [-j, j]$ pour un total de $2j+1$ valeurs entières ou demi-entières (valeur propre de $J_z = \hbar m$)

- Composition de moment cinétique

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \Rightarrow |j_1 - j_2| \leq j \leq |j_1 + j_2| \quad (38)$$

- Structure fine : $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
- Structure hyperfine : $\vec{F} = \vec{J} + \vec{L}$ (spin du noyau)
- Système hydrogénoïde : état = $(n, l, m, m_s (= \pm 1/2))$ avec $n = n_r + l + 1$
 - l donné : $(2l+1)$ valeurs de m et 2 valeurs de $m_s \Rightarrow 2 \cdot (2l+1)$ états
 - $l = 0, 1, 2, \dots \Rightarrow s, p, d, f, g, \dots$
 - Sous-couche (nl) fermée : $l = 0 \Rightarrow J(\text{atome}) = J(\text{dernière couche})$
 - Notation spectroscopique (dernière couche atome)

$$^{2S+1}L_J \quad (39)$$

- * L et S : moment cinétique orbital et spin **total** de la dernière couche
- * Sur demande de Cédric Hamnotier, lorsque l'exercice demande d'établir la structure de la dernière couche, on doit
 1. Ecrire la configuration (1s2s2p...) et répartir le nombre d'électrons de l'atome
 2. Relever le nombre d'électrons sur la dernière couche et déduire L d'après la lettre associée à la couche ($S : L = 0, P : L = 1, \dots$)
 3. Dessiner un nombre $m_L \in [-L, L]$ de case représentant chaque m_L et placer les électrons selon le principe de Pauli
 4. En utilisant

$$S = \sum m_S \quad \text{et} \quad L = \sum m_L \quad (40)$$

Calculer ces derniers en sommant les nombres quantiques de chaque électrons (faire attention aux spin opposés pour S)

5. Ecrire la notation $^{2S+1}L_J$ en n'oubliant pas que J se compose selon l'inégalité triangulaire et peut donc avoir plusieurs valeurs
- * Helium : toujours un électron en 1s (stabilité)

TP 9 : Rotation et vibration des molécules diatomiques

- Vibration de molécules diatomiques

- Approximation parabolique

$$V = \frac{1}{2}\mu\omega^2(R - R_0)^2 \quad (41)$$

- Energie de vibration valable à courtes distances

$$E_{n,vib} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (42)$$

- Rotation de molécules diatomiques

- Hamiltonien de rotation

$$H_{rot} = \frac{L^2}{2I} \quad \Rightarrow \quad E_{l,rot} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad \text{avec } I = \mu r_0^2 \quad (43)$$

- Classification des différentes énergies

$$E_{rot} < E_{vib} < Ryd \quad (44)$$

- Transition dipolaire électrique $\Delta l = 1$

- Absorption : $l_f = l_i + 1$
- Emission : $l_f = l_i - 1$
- Les raies d'absorption et d'émission correspondent aux énergies de transition admises

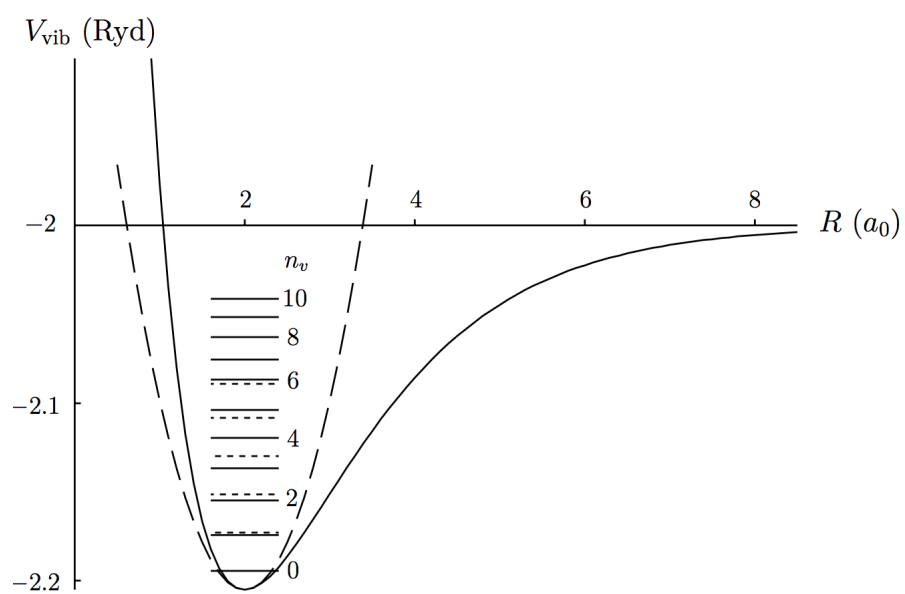


FIGURE 1 – Spectre de vibration de la molécule H_2 .