

Physique Quantique :

Chapitre 6. Particules identiques

Mohammed EL Falaki

Master PM Rabat

13 octobre 2024

Considérations sur la Mécanique Quantique des Systèmes Multiples

- Jusqu'à présent, notre étude s'est concentrée sur la mécanique quantique des particules individuelles.
- La plupart des systèmes physiques impliquent l'interaction d'un grand nombre de particules, typiquement de l'ordre de 10^{23} , par exemple :
 - Des électrons dans un solide.
 - Des atomes dans un gaz.
- En mécanique classique, les particules sont toujours distinguables :
 - Les "trajectoires" dans l'espace des phases peuvent être retracées.
- En mécanique quantique, les particules peuvent être identiques et indiscernables :
 - Exemple : Les électrons dans un atome ou un métal.
- L'incertitude intrinsèque sur la position et l'impulsion nécessite une distinction entre :
 - Particules quantiques distinguables.
 - Particules quantiques indiscernables.

Particules Identiques dans une Boîte Unidimensionnelle

- Considérons deux particules identiques confinées dans une boîte unidimensionnelle.
- Par « identiques », nous entendons des particules qui ne peuvent pas être discriminées par un nombre quantique interne, par exemple :
 - Électrons de même spin.
- La fonction d'onde à deux particules $\psi(x_1, x_2)$ n'a de sens que si :

$$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2 \Rightarrow \psi(x_1, x_2) = e^{i\alpha} \psi(x_2, x_1) \quad (1)$$

- En introduisant l'opérateur d'échange \hat{P}_{ex} tel que :

$$\hat{P}_{\text{ex}} \psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) \quad (2)$$

- Étant donné que $\hat{P}_{\text{ex}}^2 = I$, nous avons :

- **Choix du signe :**

- Pour les bosons : $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$
- Pour les fermions : $\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$

- **Classification des particules élémentaires :**

- **Fermions :**

- Particules avec un spin demi- entier.
- Leur fonction d'onde doit être antisymétrique lors de l'échange des particules.
- Exemples : électron, positron, neutron, proton, quarks, muons, etc.

- **Bosons :**

- Particules avec un spin entier (y compris zéro).
- Leur fonction d'onde doit être symétrique lors de l'échange des particules.
- Exemples : pion, kaon, photon, gluon, etc.

Relation entre Spin et Statistiques

- **Cadre de la Mécanique Quantique Non-Relativiste :**
 - La corrélation entre le spin et les statistiques peut être considérée comme une loi empirique.
- **Unification de la Mécanique Quantique et de la Relativité Restreinte :**
 - La relation spin-statistiques émerge naturellement de cette unification.
- **Règle Générale :**
 - Les fermions possèdent un spin demi-entier,
 - Les bosons possèdent un spin entier.
- **Exemple :**
 - Deux noyaux identiques, composés de n nucléons (fermions), peuvent avoir un spin entier ou demi-entier.
 - La transformation dépend de la parité de n :
 - Si n est pair, ils se comportent comme un boson,
 - Si n est impair, ils se comportent comme un fermion.

Construction des fonctions d'onde pour trois fermions ou plus

- Considérons trois fermions ou plus, supposés ne pas interagir, confinés par un potentiel indépendant du spin.
- Le Hamiltonien du système est donné par :

$$H = \sum_i H_s[p_i, r_i], \quad H_s[p, r] = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (4)$$

- Les fonctions propres de l'équation de Schrödinger impliquent des produits d'états du Hamiltonien à une particule, H_s .
- Cependant, les produits simples de type $\psi_a(1)\psi_b(2)\psi_c(3) \dots$ ne respectent pas l'antisymétrie requise lors de l'échange de deux particules.
- Ici, a, b, c, \dots représentent les états propres de H_s , et 1, 2, 3, ... désignent à la fois les coordonnées spatiales et de spin (c.-à-d., 1 représente (r_1, s_1) , etc.).

Antisymétrisation des fonctions d'onde pour les fermions

- Pour antisymétriser par rapport aux particules 1 et 2, on peut soustraire le même produit avec 1 et 2 échangés :

$$\psi_a(1)\psi_b(2)\psi_c(3) \rightarrow [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)]\psi_c(3) \quad (5)$$

- Cependant, la fonction d'onde doit être antisymétrisée pour tous les échanges possibles.
- Pour trois particules, nous devons ajouter les 3! permutations de 1, 2, 3 dans les états a, b, c avec un facteur -1 pour chaque échange.
- Cette somme est connue sous le nom de déterminant de Slater :

$$\psi_{abc}(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \psi_c(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \psi_c(2) \\ \psi_a(3) & \psi_b(3) & \psi_c(3) \end{vmatrix} \quad (6)$$

- Cette construction peut être généralisée à N particules

Statistiques quantiques : Fermions

- La fonction d'onde des fermions pour trois particules peut être exprimée sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$\psi_{abc}(1, 2, 3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \psi_c(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \psi_c(2) \\ \psi_a(3) & \psi_b(3) & \psi_c(3) \end{vmatrix} \quad (7)$$

- L'antisymétrie de la fonction d'onde lors de l'échange de deux particules découle de l'antisymétrie du déterminant de Slater : $\psi_{abc}(1, 2, 3) = -\psi_{abc}(1, 3, 2)$.
- De plus, le déterminant est non nul uniquement si les trois états a, b, c sont différents, ce qui est une manifestation du principe d'exclusion de Pauli : deux fermions identiques ne peuvent pas occuper le même état.
- La fonction d'onde est exacte pour les fermions non-interagissants et constitue une base utile pour étudier les systèmes faiblement interagissants à l'aide

Statistiques quantiques : Bosons

- Dans les systèmes bosoniques, la fonction d'onde doit être symétrique lors de l'échange de deux particules.
- Une telle fonction d'onde peut être obtenue en développant tous les termes contribuant au déterminant de Slater et en remplaçant tous les signes par des signes positifs.
- Autrement dit, la fonction d'onde bosonique décrit une superposition uniforme (de phase égale) de toutes les permutations possibles des états produits.

Fonctions d'onde spatiales et de spin

- Lorsque le Hamiltonien est indépendant du spin, la fonction d'onde peut être factorisée en composantes spatiales et de spin.
- Pour deux électrons (fermions), il existe quatre états de base dans l'espace de spin :
 - L'état singulet (antisymétrique) de spin $S = 0$:

$$|\chi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle) \quad (8)$$

- Les trois états triplets (symétriques) de spin $S = 1$:

$$|\chi_1^T\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle, \quad |\chi_0^T\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\uparrow_2\rangle), \quad |\chi_{-1}^T\rangle = |\downarrow_1\downarrow_2\rangle \quad (9)$$

Fonctions d'onde spatiales et de spin

- Pour un état général, la fonction d'onde totale de deux électrons est donnée par :

$$\Psi(r_1, s_1; r_2, s_2) = \psi(r_1, r_2)\chi(s_1, s_2) \quad (10)$$

où $\chi(s_1, s_2) = \langle s_1, s_2 | \chi \rangle$.

- La fonction d'onde totale Ψ doit être antisymétrique sous l'échange des deux électrons.
- Ainsi, l'état de spin singulet (antisymétrique) doit avoir une fonction d'onde spatiale symétrique, tandis que les états triplets (symétriques) doivent avoir une fonction d'onde spatiale antisymétrique.
- Pour trois électrons, la construction des fonctions d'onde devient plus complexe... voir les notes pour plus de détails.
- Les conditions d'antisymétrie de la fonction d'onde impliquent des corrélations dépendantes du spin, même lorsque le Hamiltonien est indépendant du spin, avec de nombreuses manifestations physiques.

Exemple I : Capacité calorifique du gaz d'hydrogène (H_2)

- Avec deux degrés de liberté de protons de spin $1/2$, H_2 peut adopter une fonction d'onde de spin singulet (parahydrogène) ou de spin triplet (orthohydrogène).
- Bien que l'interaction des spins des protons soit négligeable, la statistique de spin contraint les états disponibles :
- Puisque la parité d'un état avec moment angulaire de rotation ℓ est donnée par $(-1)^\ell$, le parahydrogène, ayant une fonction d'onde spatiale symétrique, a ℓ pair, tandis que pour l'orthohydrogène, ℓ doit être impair.
- L'énergie du niveau de rotation avec moment angulaire ℓ est :

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} \hbar^2 \ell(\ell + 1) \quad (11)$$

où I désigne le moment d'inertie.

- Cela conduit à des capacités calorifiques très différentes (cf. IR)

Exemple II : Spectre des états excités de l'hélium

- Bien que l'hélium soit l'atome le plus simple après l'hydrogène ($Z = 2$), avec deux protons, deux neutrons et deux électrons liés, l'équation de Schrödinger est analytiquement intraitable.
- En l'absence d'interaction électron-électron, l'Hamiltonien électronique est donné par :

$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{n=1}^2 \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m} + V(r_n) \right) \quad (12)$$

où $V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$.

- Cet Hamiltonien est séparable, et les états peuvent être exprimés à travers les états propres $\psi_{n,m}$ de l'Hamiltonien ressemblant à celui de l'hydrogène.

Exemple II : Spectre des états excités de l'hélium

- L'Hamiltonien est donné par :

$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{n=1}^2 \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m} + V(r_n) \right) \quad (13)$$

- Dans cette approximation, la fonction d'onde de l'état fondamental implique que les deux électrons sont dans l'état 1s, avec une fonction d'onde de spin singulet antisymétrique :

$$|\Psi'_{\text{g.s.}} = (|100\rangle \otimes |100\rangle) |\chi'_S \quad (14)$$

- Auparavant, nous avons utilisé la théorie des perturbations pour déterminer comment l'énergie de l'état fondamental est perturbée par l'interaction électron-électron :

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad (15)$$

Implications de la statistique des particules

- La fonction d'onde de l'état fondamental appartient à la classe des états avec des fonctions d'onde spatiales symétriques et des fonctions d'onde de spin antisymétriques (singlet) – parahélium.
- En l'absence de l'interaction électron-électron $\hat{H}^{(1)}$, les premiers états excités dans la même classe sont dégénérés :

$$|\psi'_{\text{para}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle \otimes |2m'\rangle + |2m'\rangle \otimes |100\rangle) |\chi'_S \quad (16)$$

- La deuxième classe a une fonction d'onde spatiale antisymétrique et une fonction d'onde de spin symétrique (triplet) – orthohélium. Les états excités sont également dégénérés :

$$|\psi'_{\text{ortho}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle \otimes |2m'\rangle - |2m'\rangle \otimes |100\rangle) |\chi_{m_S}^{T'} \quad (17)$$

Énergie des états excités

- Malgré la dégénérescence, étant donné que les éléments de matrice hors-diagonaux entre des valeurs différentes de m et ℓ s'annulent, nous pouvons invoquer la théorie des perturbations du premier ordre pour déterminer le décalage d'énergie pour ortho- et parahélium :

$$\begin{aligned}\Delta E_{p,o}^{n''} &= \langle \psi_{p,o} | \hat{H}^{(1)} | \psi'_{p,o} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\psi_{100}(r_1)\psi_{n''0}(r_2) \pm \psi_{n''0}(r_1)\psi_{100}(r_2)|^2}{|r_1 - r_2|}\end{aligned}\quad (18)$$

- (+) pour parahélium et (−) pour orthohélium.
- Remarque : étant donné que l'élément de matrice est indépendant de m , la valeur de $m = 0$ considérée ici s'applique à toutes les valeurs de m .

Exemple II : Spectre des états excités de l'hélium

- Le décalage d'énergie pour parahélium et orthohélium est donné par :

$$\Delta E_{p,o}^{n''} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\psi_{100}(r_1)\psi_{n''0}(r_2) \pm \psi_{n''0}(r_1)\psi_{100}(r_2)|^2}{|r_1 - r_2|}. \quad (19)$$

Exemple II : Spectre des états excités de l'hélium

- En réorganisant cette expression, on obtient :

$$\Delta E_{p,o}^{n''} = J_{n''} \pm K_{n''} \quad (20)$$

où les termes diagonaux et croisés sont donnés par :

$$J_{n''} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{|\psi_{100}(r_1)|^2 |\psi_{n''0}(r_2)|^2}{|r_1 - r_2|} > 0. \quad (21)$$

Exemple II : Spectre des états excités de l'hélium

- Le terme $K_{n''}$ est défini comme suit :

$$K_{n''} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{\psi_{100}^*(r_1) \psi_{n''0}^*(r_2) \psi_{100}(r_2) \psi_{n''0}(r_1)}{|r_1 - r_2|}. \quad (22)$$

- Physiquement, $K_{n''}$ représente le terme d'échange qui reflète l'antisymétrie de la fonction d'onde totale.
- Comme $K_{n''} > 0$ et $\Delta E_{p,o}^{n''} = J_{n''} \pm K_{n''}$, il y a un décalage d'énergie positif pour le parahélium et un décalage négatif pour l'orthohélium.

Gazes quantiques idéaux : fermions

- Dans un système tridimensionnel, chaque état est associé à un volume dans l'espace des k :

$$N = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \cdot \frac{4}{3} \pi k_F^3, \quad (23)$$

ce qui donne une densité de particules :

$$n = \frac{N}{L^3} = \frac{k_F^3}{6\pi^2}. \quad (24)$$

- L'énergie de Fermi est exprimée par :

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi^2 n)^{2/3}. \quad (25)$$

- La densité d'états en fonction de l'énergie est donnée par :

$$n(E) = \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (26)$$