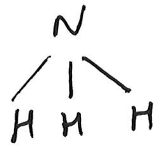
Cohen-Tannoudji IV. 1. C.
Feynmann Vol III, chapitre 10

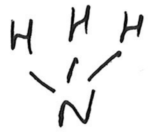
Resonance Quantique

Systemes quantique possédant 2 états liés par une symmétrie, donc à priori d'énergie identique.
Mais l'Hamiltonien permet de passer d'un état à l'autre.
$\longrightarrow$ apparition de 2 états non dégénéré.

Exemple 1 NH_3



$|1\rangle$



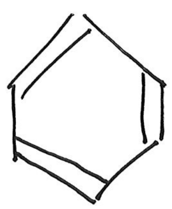
$|2\rangle$

Hamiltonien dans la base $|1\rangle, |2\rangle$: $H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$

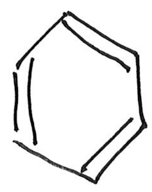
$\longrightarrow$ états propres $|\psi_{II}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ d'énergie $E_0 - A$

$|\psi_I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle)$ d'énergie $E_0 + A$

Exemple 2 Molécule de Benzène



$|1\rangle$



$|2\rangle$

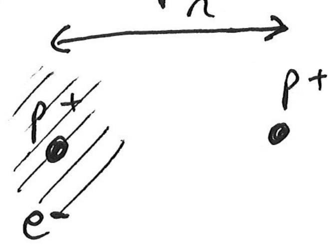
dans la base $|1\rangle, |2\rangle$: $H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$

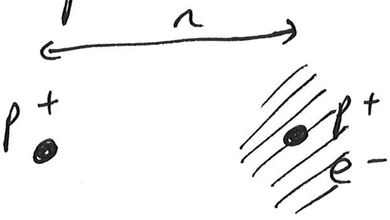
état fondamental : $\frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}$ d'énergie $E_0 - A$.

Cet état
- a une énergie plus faible que E_0 $\longrightarrow$ le benzene est une molécule très stable.
- est symmétrique, contrairement à $|1\rangle$ et $|2\rangle$ qui brisent la symmétrie

Exemple 3 Ion moléculaire H_2^+

2 protons p^+ et 1 électron séparés par une distance r.





état $|1\rangle$: l'e⁻ autour du proton de gauche

état $|2\rangle$: l'e⁻ est autour du proton de droite

par effet tunnel, l'électron peut passer d'un proton à l'autre.

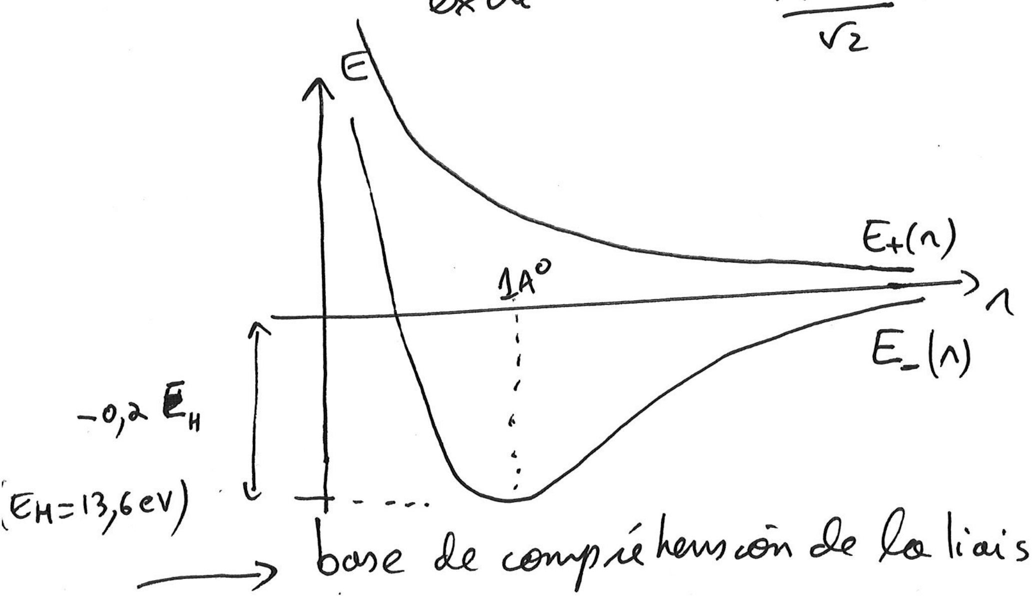
→ Hamiltonien $H = \begin{pmatrix} E_0(r) & -A(r) \\ -A(r) & E_0(r) \end{pmatrix}$

$A(r)$ dépend de la distance r

$E_0(r)$ dépend de la distance r : si les protons sont très proches, ils se repoussent.

→ état fondamental $\dfrac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}$ d'énergie $E_-(r) = E_0(r) - A(r)$

excité $\dfrac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}}$ d'énergie $E_+(r) = E_0(r) + A(r)$



→ base de compréhension de la liaison chimique.