L'atome à Z électrons

Atome : Z électrons liés par un potentiel coulombien à symétrie sphérique

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{Z} \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^{Z} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\hat{1}}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\widehat{\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}}$$

énergie cinétique   attraction noyau   répulsion électron-électron

Première étape : passer à une somme de Hamiltoniens isotropes à une particule en utilisant une hypothèse de champ moyen.

$$\sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\widehat{\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}} = \sum_{i=1}^{Z} \hat{V}_{\text{moyen}}(\vec{r}_i)$$

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} \underbrace{- \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\hat{1}}{r_i} + V_{\text{moyen}}(\vec{r}_i)}_{\hat{W}(\vec{r}_i)}\right)$$

$$\boxed{\hat{H}_e = \sum_{i=1}^{Z} \hat{h}_{z,i}}$$

$$\boxed{\hat{h}_z = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \hat{W}(\vec{r})}$$

Deuxième étape : Calculer les états propres et les niveaux d'énergie du hamiltonien à une particule.

Les états électroniques

$$\hat{h}_z\,\psi = E\psi$$

- Potentiel à symétrie sphérique : le moment cinétique commute avec le hamiltonien.

$$\boxed{\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \times Y_l^m(\theta,\varphi)}$$

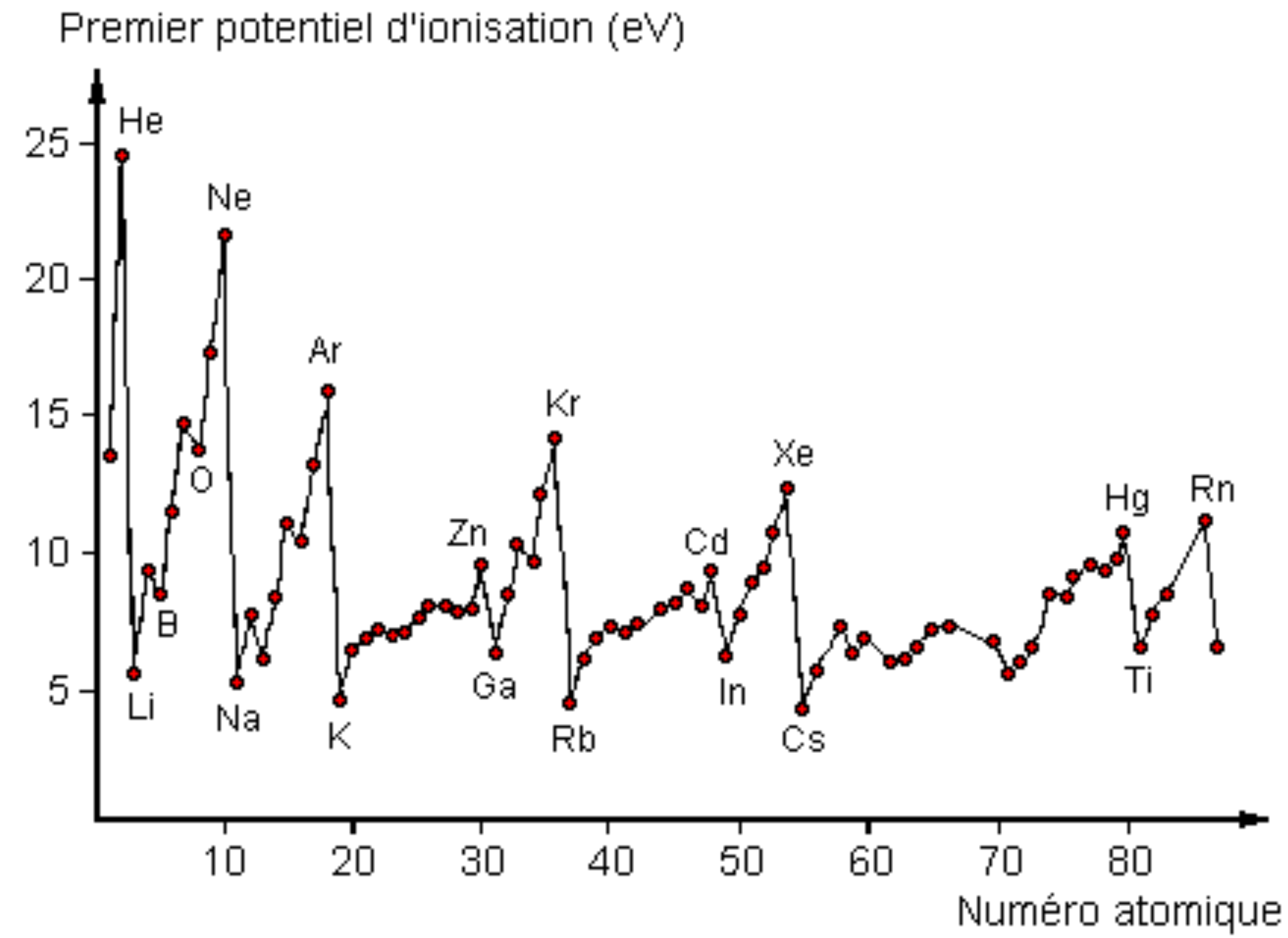
- Les énergies ne dépendent pas du nombre quantique magnétique m.
- Les énergies dépendent des nombres quantiques n et l.

  (sauf dans le cas du potentiel coulombien)
- Les énergies croissent avec le nombre quantique principal n.
- Les énergies croissent avec le nombre quantique orbital l.
- A partir de n=3, enchevêtrement des sous-couches.
- Seuls deux électrons peuvent occuper un même état n,l,m (spin).
- Répulsion apparente due au principe d'exclusion de Pauli.

Construction de l'état fondamental en remplissant
les couches par énergie croissante

Potentiel d’ionisation

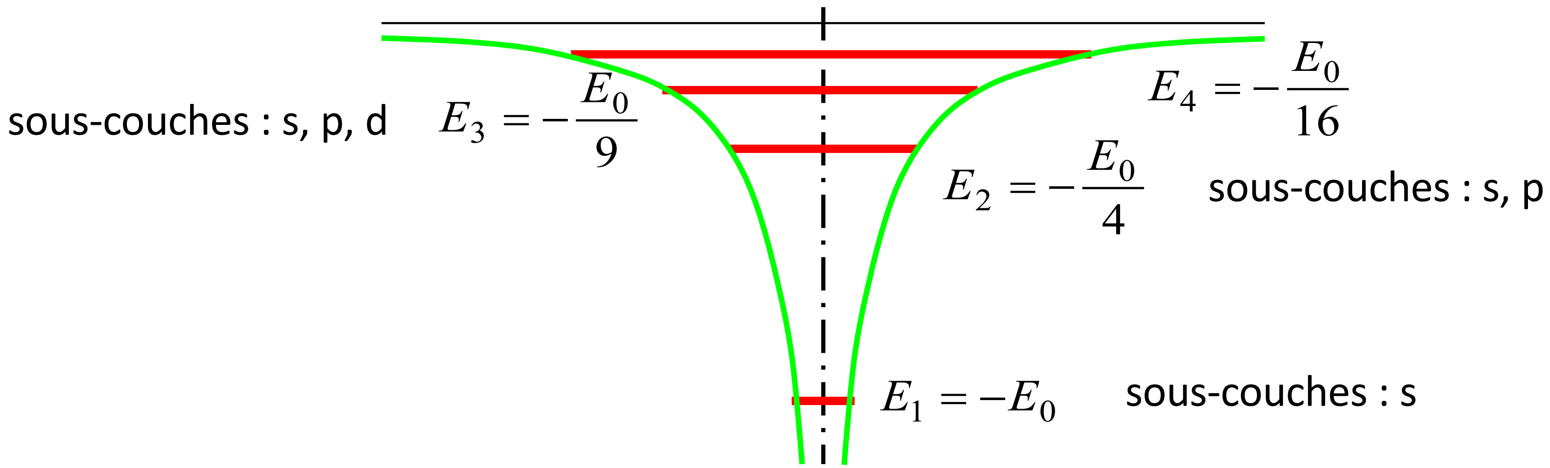
Énergie minimale à fournir pour arracher un électron à l’atome



Comment construire les atomes…

$$\boxed{\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \times Y_l^m(\theta,\varphi)}$$

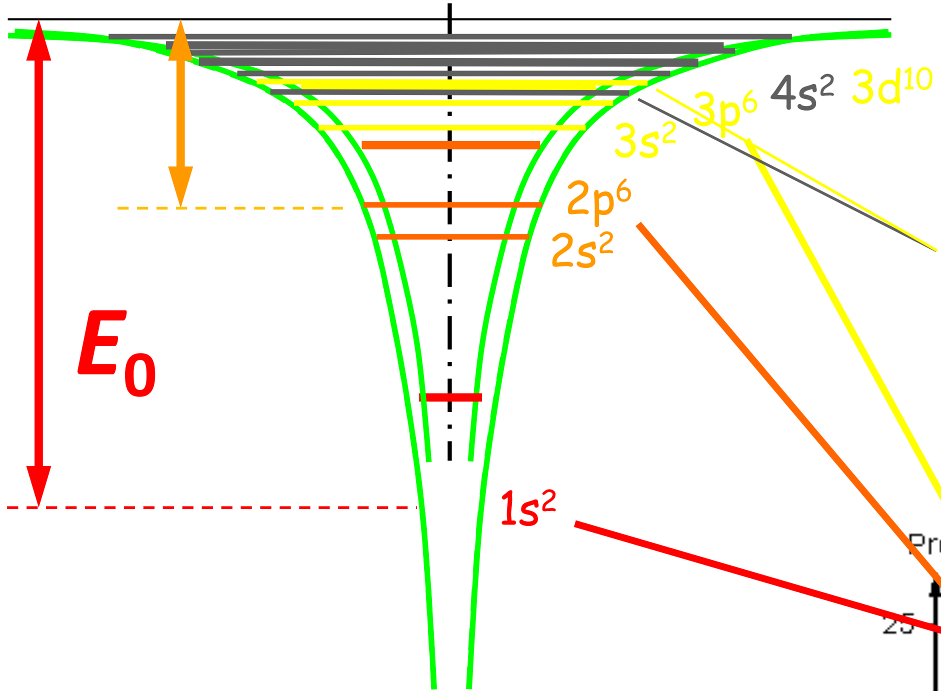
Pour $Z=1$ (hydrogène), on connaît exactement les énergies et les solutions radiales.



L'orbitale de nombre principal n est environ à $n \times$ rayon de Bohr.

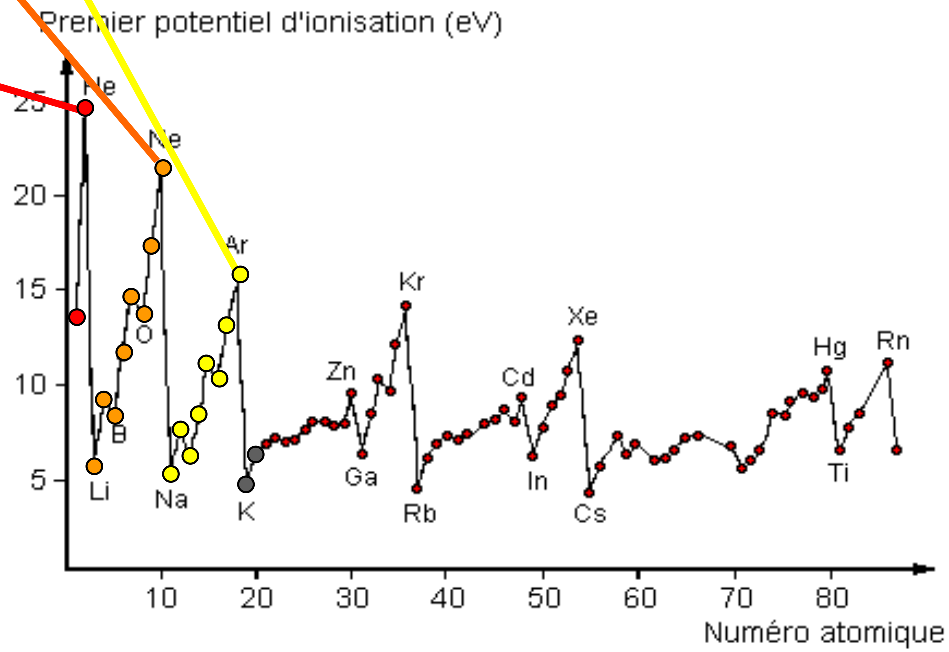
Comment construire les atomes…

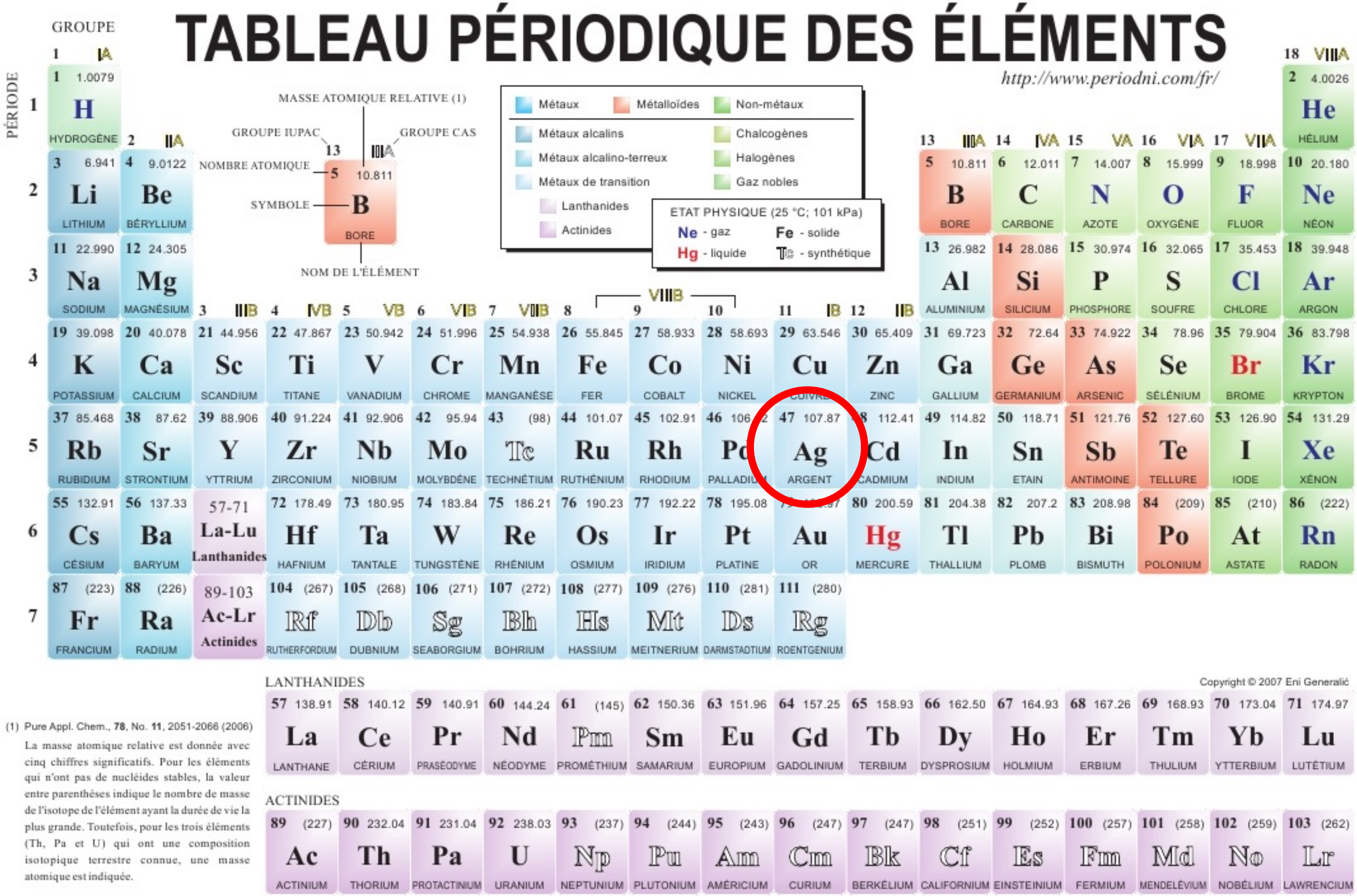
Pour un atome quelconque, Z protons



- Correction due aux interactions e⁻-e⁻
- Séparation des sous-couches
- Enchevêtrement éventuel
- Spin ½ de l'électron : remplissage avec deux électrons par niveau d'énergie.

Potentiel d'ionisation : énergie minimale pour arracher un électron





Argent : $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 4d^{10}\ 5s^1$

http://www.toutestquantique.fr

L’intrication quantique

L'intrication quantique

Soit un système de deux particules de spin ½ .

Un état de la première particule peut s'écrire : $|\psi_1\rangle = \lambda_1|+\rangle + \mu_1|-\rangle$

Un état « **produit** » donne un état à deux particules :

$$|\psi_1,\psi_2\rangle = \Big(\lambda_1\,|+\rangle + \mu_1\,|-\rangle\Big) \otimes \Big(\lambda_2\,|+\rangle + \mu_2\,|-\rangle\Big)$$

$$|\psi_1,\psi_2\rangle = \lambda_1\lambda_2\,|{+}{+}\rangle + \lambda_1\mu_2\,|{+}{-}\rangle + \mu_1\lambda_2\,|{-}{+}\rangle + \lambda_2\mu_2\,|{-}{-}\rangle$$

$$= a\,|{+}{+}\rangle + b\,|{+}{-}\rangle + c\,|{-}{+}\rangle + d\,|{-}{-}\rangle$$

C.N.S. pour qu'un état à deux particules soit un état produit : $\boxed{ad = bc}$

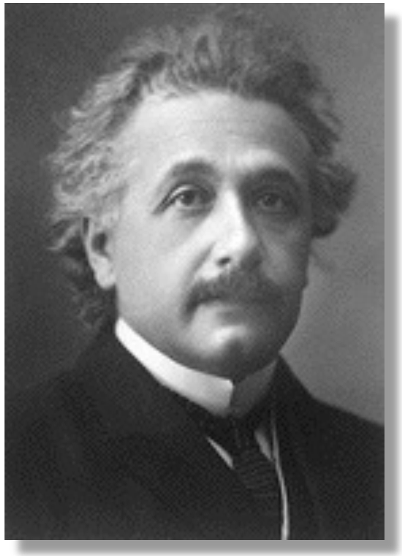
Conséquence : tous les états ne sont pas des états produits !!

Exemple : $|\Psi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(|{+}{+}\rangle + |{-}{-}\rangle\Big)$ est un état dit « **intriqué** »

Mesure du spin : si on mesure $+\dfrac{\hbar}{2}$ (proba. ½) pour la particule 1, alors l'état après réduction du paquet d'ondes est : $\boxed{|\Psi_{\text{après}}\rangle = |{+}{+}\rangle}$

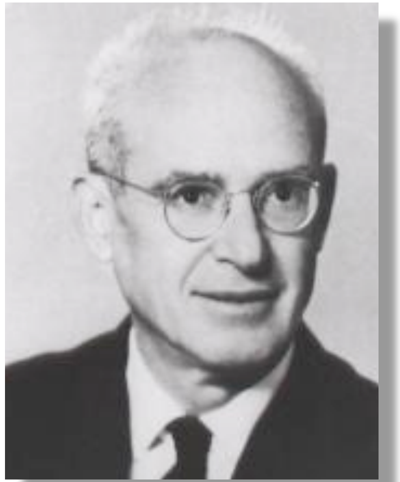
« La mesure de l'un a modifié l'état de l'autre »

Le paradoxe EPR



Albert Einstein
(1879 - 1955)

Boris Podolsky
(1896 - 1966)



Nathan Rosen
(1909 - 1995)

"Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?", *Physical Review*, **47**:777-780 , 1935.

Le paradoxe EPR

spin ½

désintégration d'une
particule de spin 0

mesure de $\hat{S}_z$

spin ½

mesure de $\hat{S}_{\vec{a}}$

Relativité restreinte :

Les mesures sont séparées par un intervalle de genre espace.

Mécanique quantique :

L'état initial des deux particules est : $$\boxed{|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1+\rangle|2-\rangle - |1-\rangle|2+\rangle\right)}$$

Une seule mesure entraîne la réduction du paquet d'ondes.

Si $\vec{a} = \vec{u}_z$, la mesure du spin de la particule 1 donne avec certitude celui de la particule 2.

Quelle est la première mesure ?

Transmission instantanée de l'information ?

Les principes invoqués

- **Principe de réalisme** : si on peut connaître une propriété d'un système sans le perturber, alors cette propriété correspond à une réalité existante en dehors de l'observateur.

- **Principe de séparabilité** : même si un système est lié à un autre, il conserve des propriétés physiques qui lui sont propres.

- **Principe de localité** : les mesures effectuées sur un système sont indépendantes des mesures effectuées sur un autre système suffisamment distant.

Réalisme ou localité ?

Mécanique quantique incomplète **OU** x, p, S n'ont pas de réalité propre

Mécanique quantique complète $\Rightarrow$	quantités incompatibles ne peuvent avoir de réalité simultanée
Mécanique quantique complète $\Rightarrow$	quantités incompatibles doivent posséder une réalité simultanée

<u>Solution du paradoxe ?</u> : La mécanique quantique est incomplète, il existe des **variables cachées** dont on n'observe que les conséquences statistiques.

John Stewart Bell
(1928 -1990)

« Dieu ne joue pas aux dés »

Albert Einstein

Possibilité de tester les théories **réalistes locales** (1964)

Une mesure quantique paradoxale

On considère trois particules de spin ½ que l'on suppose dans l'état :

$$\boxed{\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+++\rangle - |---\rangle\Big)}$$ dans la base des états propres de $\hat{S}_z$

On désire effectuer les trois mesures suivantes :

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_x^{(1)} \times \hat{\sigma}_y^{(2)} \times \hat{\sigma}_y^{(3)} \qquad \hat{B} = \hat{\sigma}_y^{(1)} \times \hat{\sigma}_x^{(2)} \times \hat{\sigma}_y^{(3)} \qquad \hat{C} = \hat{\sigma}_y^{(1)} \times \hat{\sigma}_y^{(2)} \times \hat{\sigma}_x^{(3)}$$

En interprétation classique :

$$A \times B \times C = \left(\sigma_x^{(1)}\sigma_y^{(2)}\sigma_y^{(3)}\right) \times \left(\sigma_y^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_y^{(3)}\right) \times \left(\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\sigma_x^{(3)}\right) = \sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}$$

$$\begin{aligned}
\hat{A}\,|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}_x^{(1)}\hat{\sigma}_y^{(2)}\Big(i\,|++-\rangle + i\,|--+\rangle\Big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\sigma}_x^{(1)}\Big(-|+--\rangle + |-++\rangle\Big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(-|---\rangle + |+++\rangle\Big) = \boxed{|\psi\rangle}
\end{aligned}$$

$$\sigma_x|z+\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |z-\rangle$$

$$\sigma_x|z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |z+\rangle$$

$$\sigma_y|z+\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i\,|z-\rangle$$

$$\sigma_y|z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i\,|z+\rangle$$

$|\psi\rangle$ est vecteur propre de $\hat{A}$ avec la valeur propre $+1$

Une mesure quantique paradoxale

- $|\psi\rangle$ est vecteur propre de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ avec la valeur propre $+1$

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle \qquad \hat{B}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle \qquad \hat{C}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Mesure de D, produit « classique » de A, B et C

$$\begin{aligned}\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}\,|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|++-\rangle - |--+\rangle\Big) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+--\rangle - |-++\rangle\Big)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|---\rangle - |+++\rangle\Big) = \boxed{-\,|\psi\rangle}\end{aligned}$$

Classiquement, on aurait la relation : $\langle D\rangle = \langle A\rangle \times \langle B\rangle \times \langle C\rangle$

Pour cet état, toute mesure des observables A, B ou C donne 1 avec probabilité $\mathbf{1}$

Pour cet état, la mesure de D donne -1 avec probabilité $\mathbf{1}$…

Violation claire du <u>réalisme local</u> !

Les inégalités de Bell

Le spin de la particule 1 peut être mesuré suivant $\vec{a}$ ou $\vec{a}'$

Le spin de la particule 2 peut être mesuré suivant $\vec{b}$ ou $\vec{b}'$

Mesure du spin de la particule 1 dans la direction $\vec{a}$: A

Mesure du spin de la particule 1 dans la direction $\vec{a}'$: A'

Mesure du spin de la particule 2 dans la direction $\vec{b}$: B

Mesure du spin de la particule 2 dans la direction $\vec{b}'$: B'

(= +1 ou -1)

Quantité $\boxed{X = \langle AB \rangle - \langle AB' \rangle + \langle A'B \rangle + \langle A'B' \rangle}$

On suppose que $\vec{b}$ est suivant Oz : $\langle AB \rangle = \dfrac{4}{\hbar^2} \left\langle \hat{S}^{(1)}_{\vec{a}} \, \hat{S}^{(2)}_z \right\rangle$

Calcul à deux particules : $\langle \psi_1 \otimes \psi_2 | \hat{A}_1 \hat{A}_2 | \varphi_1 \otimes \varphi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A}_1 | \varphi_1 \rangle \, \langle \psi_2 | \hat{A}_2 | \varphi_2 \rangle$

$$\frac{2}{\hbar} \hat{S}_{\vec{a}} = \sin\theta \, \sigma_2 + \cos\theta \, \sigma_3 = \sin\theta \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos\theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -i\sin\theta \\ i\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Les inégalités de Bell

John Stewart Bell
(1928 -1990)

$$\langle AB\rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{+}{-}\rangle - |{-}{+}\rangle\right)\middle| \frac{4}{\hbar^2}\hat{S}_{\vec{a}}^{(1)}\hat{S}_z^{(2)} \middle| \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|{+}{-}\rangle - |{-}{+}\rangle\right)\right\rangle$$

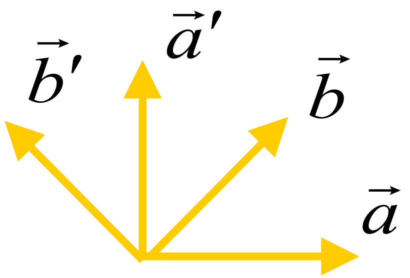
$$= \frac{1}{2}\left(-\langle + | \frac{2}{\hbar}\hat{S}_{\vec{a}}^{(1)} | + \rangle + \langle - | \frac{2}{\hbar}\hat{S}_{\vec{a}}^{(1)} | - \rangle\right) = \frac{1}{2}\left(-\cos\theta - \cos\theta\right) = \boxed{-\cos\theta}$$

$$X = \langle AB\rangle - \langle AB'\rangle + \langle A'B\rangle + \langle A'B'\rangle = \boxed{-\cos\theta_{ab} + \cos\theta_{ab'} - \cos\theta_{a'b} - \cos\theta_{a'b'}}$$

Réalisme local : ces quantités ont un sens « en dehors » de toute mesure

Donc $X = \langle \underbrace{A\left(B - B'\right) + A'\left(B + B'\right)}_{x} \rangle$ $\qquad |B| = |B'| = 1 \;\Rightarrow\; |x| = 2$

$$\boxed{-2 \leq X \leq +2}$$

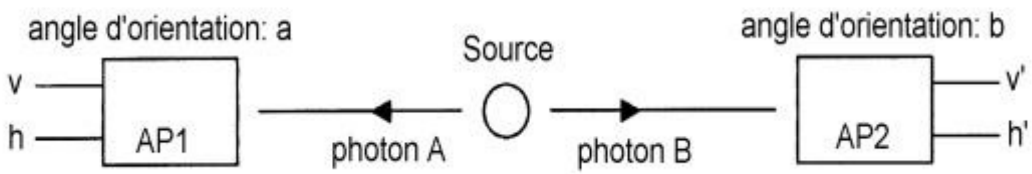


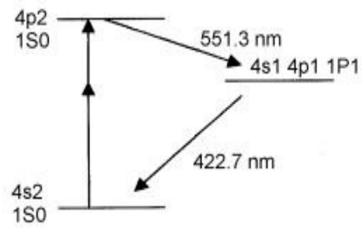
Mécanique quantique :

$$X = -\cos\frac{\pi}{4} + \cos\frac{3\pi}{4} - \cos\frac{\pi}{4} - \cos\frac{\pi}{4} = \boxed{-2\sqrt{2}}$$

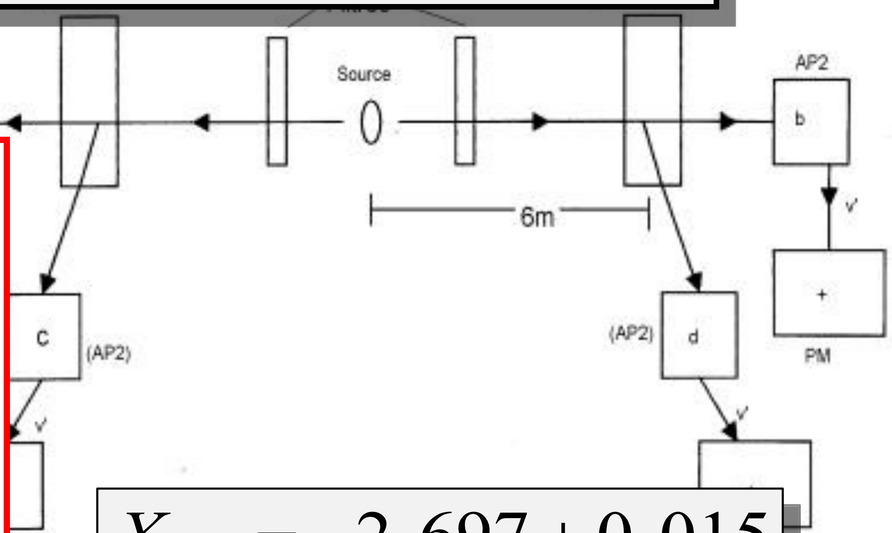
Les expériences d'Aspect

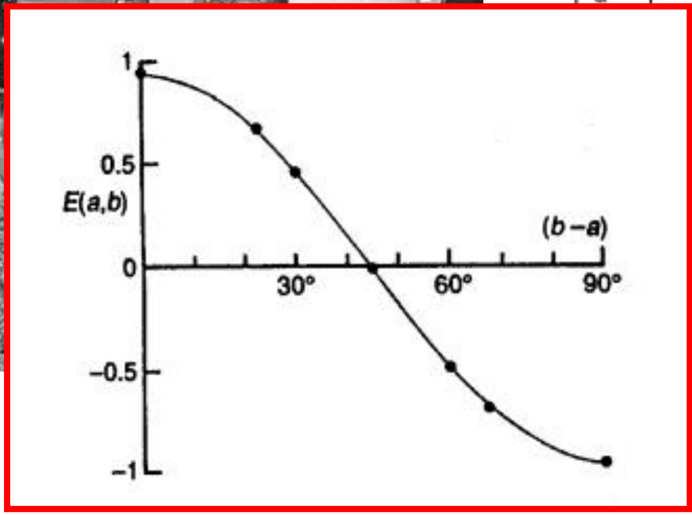
(Aspect, Dalibard, Grangier, Roger, 1982)





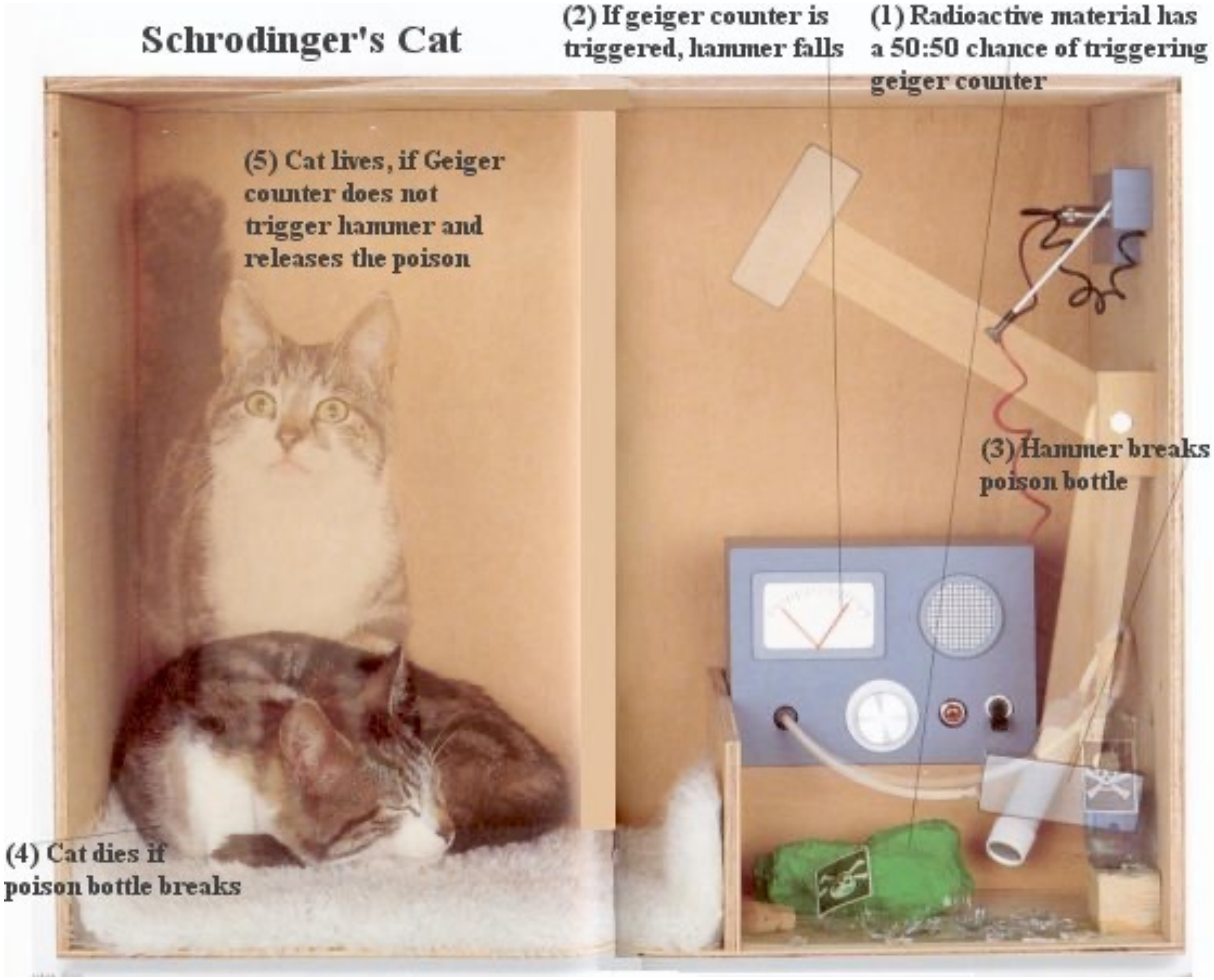
Les inégalités de Bell ne sont pas vérifiées





$$X_{\exp} = -2,697 + 0,015$$

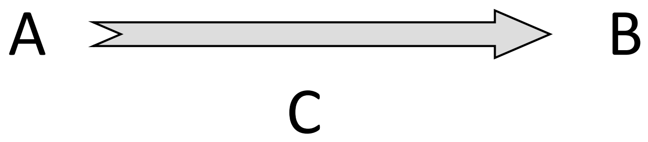
Le chat de Schrödinger et la décohérence

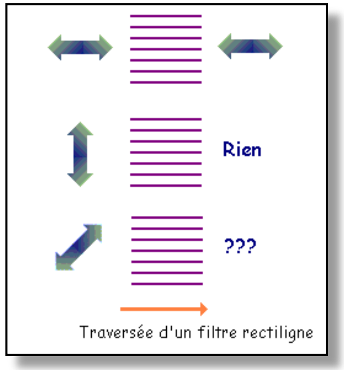


Schrödinger's Plates: They are both broken and not broken until you open the door.

L'intrication en pratique

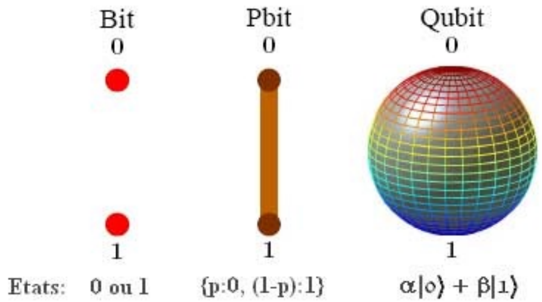
- La cryptographie quantique





- L'ordinateur quantique

  remplacer les bits par des « qubits »
  N qubits → 2^N informations.



- La « téléportation quantique »

  Anton Zeilinger (1997)

Après la physique quantique…

La physique quantique relativiste

La théorie quantique des champs

Le modèle standard

La physique quantique appliquée aux grands systèmes

La physique statistique

La théorie des solides cristallins : **la physique du solide**

La dynamique moléculaire

L'investigation, la maîtrise et la conception à l'échelle nanométrique

Les **nanosciences** et les **nanotechnologies**


PARISIENNE
DE PHOTO
GRAPHIE