

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA
FACULTE DES SCIENCES



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique Computationnelle

Par

Abderrahmane Mohamed Azzedine

Sur le thème

Résolution numérique de L'équation de Pauli

Soutenu le 30/06/2021 devant le jury composé de :

Mr. Lasri Boumediene	Président	Pr	U. Saida
Mr. Kouidri Smail	Encadreur	MCA	U. Saida
Mme.Benhalima Nadia	Examinatrice	MCA	U. Saida

Année Universitaire 2020 - 2021

Dédicace

À ma chère mère

*Pour son amour irremplaçable pour moi et
pour tous ses sacrifices sans limites.*

A mon cher père

*Pour sa patience et son grand soutien pour
atteindre ce niveau.*

A mes sœurs et mon frère.

À tous mes amis.

Je dédie cet humble travail.

Remerciements

Je remercie Dieu Tout-Puissant de m'avoir accordé la grâce de rédiger et de compléter ce mémoire.

Tout d'abord, je remercie le Dr Kouidri Ismail pour son aide et ses conseils, pour la qualité de son encadrement, et pour tout ce qu'il a fait lors de la préparation de ce mémoire.

Je remercie vivement le président du jury et ces membres d'avoir accepté de revoir ce travail.

Je remercie toutes les personnes qui m'ont aidé et soutenu de près et de loin.

SOMMAIRE

Introduction générale	5
Référence	7
Chapitre I L'équation de Schrödinger	8
I.1.Introduction.....	9
I.2. L'équation de Schrödinger.....	10
I.2.a. L'équation originelle	10
I.2.b. Résolution de l'équation	12
I.3. L'atome d'hydrogène	12
I.4. Oscillateur harmonique	13
I.5. Solutions approximatives.....	14
I.6.Conclusion.....	14
References.....	15
Chapitre II L'équation de Pauli	16
II.1. Introduction.....	17
II.2. Équation de Schrödinger avec électromagnétisme	17
II.3. Fonction d'onde complexe	17
II.4. Momentum angulaire orbital	18
II.5. Analogie de spin intrinsèque Pauli	20
II.6. Equation de Pauli dans la notation matricielle	23
II.7. Equations des composants de la fonction d'onde de Pauli.....	26

II.8. Conclusion.....	27
References	28
Chapitre III Résolution numérique de l'équation de Pauli	29
III.1. Introduction.....	30
III.2. Equation de Pauli sous la vision de la méthode variationnelle	30
III.3. Résultats et discussion	38
III.3.a Organigramme de calcul	38
III.4. Conclusion.....	45
References.....	46
Conclusion général	47
Résumé	48

Introduction

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la préparation d'un
Diplôme en Master physique spécialité physique



Computationnelle où nous allons résoudre

Cette photo montre Pauli dans sa jeunesse il était
très beau.

l'équation de Pauli d'une manière approximative.

En se basant sur le fameux raisonnement de Wolfgang Pauli qui a représenté le formalisme de spin *via* une détermination matricielle.

Ce meilleur savant avait écrit des articles importants dans le domaine de la physique générale, notamment un article très important où il a reçu selon lui un doctorat en physique théorique à l'âge de vingt et un ans. Malgré son caractère non relativiste le modèle de Pauli a poussé le développement de la mécanique quantique relativiste vers son plus grand but et plus particulièrement pour les fermions de nouvelles particules qui obéissent à une statistique dite Fermi-Dirac [1-2]. D'ailleurs durant ces années si l'équation de Klein Gordon était la première équation qui a généralisé toute la physique et ceci avant bien sûr la découverte du spin en 1932 ce qui laissa Pauli et Dirac de mieux interpréter cette dernière équation qui ne marche pas pour les particules de spin demi entier conduisant à une probabilité négative et une énergie négative rejeté physiquement.

Pauli a utilisé des matrices à deux dimensions, qui servent pour représenter les algèbres de Clifford qui ont une très grande importance en géométrie différentielle [3]. Après ces découvertes il vient même à l'application de ces matrices de spin pour comprendre plusieurs phénomènes en physique quantique et plus généralement l'effet Zeeman qui nous guide vers un clivage du spectre atomique d'où lever de la dégénérescence.

Ce mémoire de master est composé de trois chapitres

Dans le premier nous allons guider vos yeux vers l'origine de l'équation de Schrödinger une équation qui décrit aussi bien les phénomènes à l'échelle atomique qu'à l'échelle nucléaire d'où la naissance de la mécanique quantique.

Dans le deuxième chapitre, nous nous intéressons à traiter d'une façon aussi bien accessible la célèbre équation de Pauli qui n'est autre que l'équation de Schrödinger plongé dans une région où règne un champ magnétique d'où translation au niveau des impulsions au lieu de travailler par P on travaille par $(P-eA)$.

Le troisième chapitre consiste à nous guider vers une conversion de tous nos équations vues aux chapitres I et II à des équations numériques ou nous allons construire un organigramme de calcul fiable pour nous donner des solutions acceptables physiquement via l'utilisation de la méthode variationnelle.

Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion qui porte sur ce que nous avons faits durant la traversée des trois chapitres.

Références

- [1] C. Ngô and H. Ngô, Physique Statistique, Dunod, Paris (2008), 3ème édition.
- [2] C. Texier, Physique statistique : des processus élémentaires aux phénomènes collectifs, université paris sud, paris (2016).
- [3] ARTIBANO MICALI et ORLANDO E. VILLAMAYOR Sur les algèbres de Clifford
Annales scientifiques de l'É.N.S. 4e série, tome 1, no 2, p. 271-304 (1968).

Chapitre I

L'équation de

Schrödinger

I.1 Introduction :

La physique générale durant sa naissance était composée que par l'électromagnétique de Maxwell, l'optique, la thermodynamique, l'électricité et la mécanique classique.

Mais avec le déclenchement de plusieurs expériences telle que l'effet photoélectrique, les fentes de Young, le rayonnement du corps noir a rencontré un grand obstacle pour pouvoir mieux les interpréter d'une manière satisfaisante.

Avec le bagage précédent cette physique présente un handicap qu'il fallait le soulever. Ce handicap vis-à-vis les résultats expérimentaux de l'époque les physiciens cherchent un modèle théorique qui ajustent les expériences et ceci d'une façon rigoureuse.

Malgré que l'expérience des fentes de Young ait trouvé son interprétation physique avec l'outil de l'électromagnétisme via Clark Maxwell toute en se basant que la lumière est de nature ondulatoire.

Mais cette nature ondulatoire n'a pas pu interpréter l'effet photoélectrique alors il fallait attendre l'année 1905 où A. Einstein à peu réussi de l'expliquer et ceci par un autre aspect dit ici aspect corpusculaire c'est-à-dire : la lumière est formée des grains et chaque grain a une énergie $h\nu$ (appelle *photon*). Cette réintroduction de la conception corpusculaire de la lumière va inciter Louis de Broglie à proposer une relation analogue à celle de Planck, mais pour la quantité de mouvement :

$$\vec{P} = h\vec{k} \quad (I. 1)$$

Où \vec{k} est un vecteur d'onde.

Donc la lumière est à la fois onde et corpuscule

Avec le principe d'équivalence entre l'optique ondulatoire inspiré par les équations des ondes électromagnétique Erwin Schrödinger y parvient et obtient une équation différentielle, portant désormais son nom, qui permet de décrire précisément l'évolution quantique d'une particule.

I.2 L'équation de Schrödinger :

Erwin Schrödinger (1887-1961), physicien autrichien, professeur aux universités de Berlin, Oxford et à l'Institute of Advanced Studies de Dublin. Il pose les bases de la mécanique quantique en postulant l'équation qui porte son nom. Il est versé aussi dans la philosophie et la littérature. En 1944, il publie *Qu'est-ce que la vie ?* où il tente d'expliquer l'hérédité biologique par les lois de la physique ; ce livre aura une grande influence dans la découverte du code génétique. Prix Nobel de physique en 1933.



Quand dans un séminaire, Erwin Schrödinger expose les idées de Louis de Broglie, son collègue Peter Debye s'exclame : « Qu'est-ce que c'est que cette onde qui n'a pas d'équation ? ». En effet, en général, les physiciens posent d'abord des équations, puis ils cherchent à les résoudre. Dans ce cas, au contraire, de Broglie avait d'abord postulé l'existence d'une onde sans en avoir posé d'équation. À la suite de ce séminaire, Schrödinger trouve en 1925 une équation pour les ondes de Louis de Broglie, posant ainsi les bases de la mécanique ondulatoire.

I.2.a L'équation originelle

Tout d'abord, il considéra le cas particulier d'une onde harmonique (localement) plane, ce qui s'écrit en notations complexes :

$$\psi(r, t) = \psi_0 e^{i(k \cdot r - \omega t)} \quad (\text{I. 2})$$

Puis, utilisant les relations proposées par de Broglie :

$$E = \hbar \omega \quad \text{et} \quad p = \hbar k \quad (\text{I. 3})$$

$$\psi(r, t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - Et)} \quad (\text{I. 4})$$

On constate alors qu'en dérivant dans l'onde par rapport au temps, vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = -\frac{i}{\hbar} E \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(r, t) \quad (\text{I. 5})$$

De même, le gradient de cette fonction d'onde donne :

$$\nabla \psi(r, t) = \frac{i}{\hbar} p \psi(r, t) \quad (\text{I. 6})$$

Nous avons donc, pour toute onde ψ de cette forme, en tout point et à tout instant :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E\psi \quad (\text{I. 7})$$

$$-i\hbar \nabla \psi = p\psi \quad (\text{I. 8})$$

Pour une particule donnée, d'après la mécanique classique, l'énergie mécanique est donnée par :

$$E = E_c + E_p \quad (\text{I. 9a})$$

$$= \frac{1}{2} m v^2 + V(r) \quad (\text{I. 9b})$$

$$= \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (\text{I. 9c})$$

Cette quantité apparaît en fait plus naturellement dans la formulation hamiltonienne de la mécanique classique : la somme de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique est appelée hamiltonien, qui s'identifie ici à l'énergie mécanique totale. En multipliant par la fonction d'onde :

$$\frac{p^2}{2m} \psi + V(r)\psi = E\psi \quad (\text{I. 10})$$

Et enfin en utilisant les résultats précédents, nous avons :

$$\frac{(i\hbar \nabla)^2}{2m} \psi + V(r)\psi = E\psi \quad (\text{I. 11})$$

Qui peut s'écrire sous la forme suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, t) + V(r) \psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} \quad (\text{I. 12})$$

I.2.b Résolution de l'équation

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution des ondes-particules, on peut donc répondre à un problème en la résolvant. Seulement voilà, ce n'est pas une tâche aisée, lorsqu'elle est seulement possible. En effet, il n'existe pas tellement de solutions exactes — on dit analytiques — à cette équation.

La première justification a été appliquée par l'atome d'hydrogène, de la faite que cet atome a été étudié classiquement par Niels Bohr, la première justification de l'équation de Schrödinger. C'est la recalcule d'énergie de liaison $E_n = \frac{-13,6 \text{ eV}}{n^2}$. Les valeurs qui sont culrn accord avec les valeurs de Bohr. Et Oscillateur harmonique et le reste des solutions.

I.3 L'atome d'hydrogène

L'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène (ou un atome semblable à l'hydrogène) est :

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi \quad (\text{I. 13})$$

Où q est la charge électronique, \mathbf{r} est la position de l'électron par rapport au noyau, $r = |\mathbf{r}|$ est la magnitude de la position relative, le terme potentiel est dû à l'interaction de Coulomb, où ϵ_0 est la permittivité de l'espace libre et :

$$\mu = \frac{m_q \cdot m_p}{m_q + m_p} \quad (\text{I. 14})$$

Est la masse réduite à 2 corps du noyau d'hydrogène (juste un proton) de masse m_p et l'électron de masse m_q , Le signe négatif apparaît dans le terme potentiel puisque le proton et l'électron sont chargés de manière opposée. La masse réduite à la place de la masse de l'électron est utilisée car l'électron et le proton orbitent ensemble autour d'un centre de masse commun et constituent un problème à deux corps à résoudre. Le mouvement de l'électron est d'un intérêt principal ici, donc le problème équivalent à un corps est le mouvement de l'électron utilisant la masse réduite.

L'équation de Schrödinger pour un atome d'hydrogène peut être résolue par séparation de variables. [1] Dans ce cas, les coordonnées polaires sphériques sont les plus pratiques. Ainsi :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (\text{I. 15})$$

Où R sont des fonctions radiales et $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ sont des harmoniques sphériques de degré ℓ et ordre m . C'est le seul atome pour lequel l'équation de Schrödinger a été résolue exactement. Les atomes multi-électrons nécessitent des méthodes approximatives. La famille de solutions est : [2]

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]}} e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \cdot Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (\text{I.16})$$

Où :

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e q^2} \text{ est le rayon de Bohr,}$$

$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\dots)$ Sont les polynômes de Laguerre généralisés de degré $n - \ell - 1$,

n, ℓ, m Sont respectivement les nombres quantiques principaux, azimutaux et magnétiques, qui prennent les valeurs :

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$$

$$m = -\ell, \dots, \ell$$

I.4 Oscillateur harmonique

La deuxième justification de l'équation de Schrödinger a été appliquée à l'oscillateur harmonique, est toujours pour l'atome d'hydrogène ou assimile le rayon atomique qui lie l'électron-au rayon à ressource de rondeur k au $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$.

L'équation de Schrödinger pour cette situation est :

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi \quad (\text{I.17})$$

Où x est le déplacement et ω la fréquence angulaire. Ceci est un exemple d'un système de mécanique quantique dont la fonction d'onde peut être résolue exactement. En outre, il peut être utilisé pour décrire approximativement une grande variété d'autres systèmes, y compris des atomes vibrants, des molécules [3] et des atomes ou des ions dans des réseaux [4], et se rapprocher d'autres potentiels près des points d'équilibre. C'est également la base des méthodes de perturbation en mécanique quantique.

Les solutions dans l'espace des positions sont :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot \mathcal{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad (\text{I. 18})$$

Où $n \in \{0,1,2, \dots\}$, et les fonctions \mathcal{H}_n sont les polynômes d'Hermite d'ordre n . L'ensemble de solutions peut être généré par :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)^n \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right)^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad (\text{I. 19})$$

Les valeurs propres sont :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (\text{I. 20})$$

Le cas $n = 0$ est appelé l'état fondamental, son énergie est appelée énergie du point zéro et la fonction d'onde est une gaussienne. [5]

L'oscillateur harmonique illustre la caractéristique générique de l'équation de Schrödinger selon laquelle les énergies des états propres liés sont discrétisées. [6]

I.5 Solution approximative

Le fait qu'on cherche toujours à donner des solutions approximatives à l'équation de Schrödinger réside dans l'absence d'une expression exacte de l'énergie potentielle.

Il n'est généralement pas possible de résoudre l'équation de Schrödinger exactement pour des situations d'intérêt physique. En conséquence, des solutions approximatives sont obtenues à l'aide de techniques telles que les méthodes variationnelles. Il est également courant de traiter un problème d'intérêt comme une petite modification d'un problème qui peut être résolu exactement, une méthode connue sous le nom de théorie des perturbations.

I.6 Conclusion

Bien que cette équation a trouvé sa résolution d'une manière approchée via un potentiel constant et un potentiel variable, son effet dans une région où règne un champ magnétique constant pose un problème vis-a- vis plusieurs physiciens tel que Pauli, Zeeman ...etc. Ce qui est l'objectif du deuxième chapitre.

References

- [1] Tipler, P. A.; Mosca, G. (2008). *Physics for Scientists and Engineers – with Modern Physics* (6th ed.). Freeman.
- [2] Griffiths, David J. (2008). *Introduction to Elementary Particles*. Wiley-VCH. pp. 162.
Retrieved 27 June 2011.
- [3] Atkins, P. W. (1978). *Physical Chemistry*. Oxford University Press.
- [4] Hook, J. R.; Hall, H. E. (2010). *Solid State Physics*. Manchester Physics Series (2nd ed.). John Wiley & Sons.
- [5] Townsend, John S. (2012). "Chapter 7: The One-Dimensional Harmonic Oscillator". A *Modern Approach to Quantum Mechanics*. University Science Books. pp. 247–250, 254–5, 257, 272.
- [6] Cohen-Tannoudji, Claude; Diu, Bernard; Laloë, Franck (2005). *Quantum Mechanics*. Translated by Hemley, Susan Reid; Ostrowsky, Nicole; Ostrowsky, Dan. John Wiley & Sons.

Chapitre II

L'équation de

Pauli

II.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à ce que Wolfgang Pauli a fait après avoir surmonté son biais initial contre le spin électronique. Il a développé une extension non relativiste de l'équation de Schrödinger, basée sur l'analogie avec le moment angulaire orbital, en utilisant des matrices comme extension mathématique.

Ces notes décrivent le processus de conversion de l'équation de Pauli du format de haut niveau en équations différentielles complexes au niveau des composants pour les fonctions d'onde. Et en utilisant des matrices sigma dans la formulation des effets de spin.

II.2 Équation de Schrödinger avec électromagnétisme

L'équation de Schrödinger standard pour un électron dans un champ électromagnétique, avant l'extension de spin de Pauli, peut être écrite en utilisant une fonction d'onde complexe comme :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi + \frac{iq\hbar}{m} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla}) \psi + \frac{iq\hbar}{2m} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \psi + \frac{q^2}{2m} A^2 \psi + q\phi \psi \quad (\text{II.1})$$

II.3 Fonction d'onde complexe

La fonction d'onde sans spin $\psi = \psi_r + i\psi_i$ est un champ complexe. Dans l'algèbre géométrique à trois dimensions, cela correspond à une combinaison scalaire plus trivecteur. En tant que multivecteur, il manque des termes vectoriels et bivecteurs [1]. Ce n'est toutefois pas surprenant, car il s'agit d'un modèle incomplet et le plus simple. L'ajout de spin, comme dans les équations de Pauli et de Dirac, remplira ce multivecteur.

En écrivant la fonction d'onde sous forme de composant, illustrant les termes manquants, nous avons

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_r \end{pmatrix} \quad (\text{II.2})$$

Revenant à notre équation de Schrödinger, nous séparons maintenant les composants réels et imaginaires pour ψ .

Organisation par variables

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_r = +\frac{q}{m} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi_r) + \frac{q}{2m} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) (\psi_r) - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi_i + \frac{q^2}{2\hbar m} A^2 (\psi_i) + \frac{q\phi}{\hbar} (\psi_i) \quad (\text{II.3})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_i = \frac{\hbar}{2m}\vec{\nabla}^2\psi_r - \frac{q^2}{2\hbar m}A^2(\psi_r) - \frac{q\phi}{\hbar}(\psi_r) + \frac{q}{m}(\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi_i) + \frac{q}{2m}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})(\psi_i) \quad (\text{II. 4})$$

II.4 Momentum angulaire orbital

Le moment angulaire en mécanique quantique était bien connu avant Pauli. Moment angulaire classique d'une particule dans un champ central, tel qu'un

Électron autour d'un proton massif dans l'atome d'hydrogène, est

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (\text{II. 5})$$

$$L_x = yp_z - zp_y \quad (\text{II. 6})$$

$$L_y = zp_x - xp_z \quad (\text{II. 7})$$

$$L_z = xp_y - yp_x \quad (\text{II. 8})$$

Maintenant, pour discuter de l'impulsion orbitale classique, nous présentons maintenant les relations de commutateurs classiques.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (\text{II. 9})$$

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (\text{II. 10})$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (\text{II. 11})$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{II. 12})$$

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (\text{II. 13})$$

$$L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (\text{II. 14})$$

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (\text{II. 15})$$

Le commutateur mécanique quantique est $[A, B] = AB - BA$, nous formons le commutateur entre les composants quantitatifs standards de \vec{L} , et absorbons les doubles produits négatifs pour réduire le désordre, nous avons :

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \phi \\ - i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \phi \quad (\text{II. 16a})$$

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \phi \\ + \hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \phi \quad (\text{II. 16b})$$

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial \phi}{\partial x} - x \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \\ + \hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial \phi}{\partial z} - z \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (\text{II. 16c})$$

Notez que j'utilise une fonction fictive ϕ pour réduire les erreurs imprudentes avec l'algèbre des opérateurs. Je supprimerai ce terme plus tard, une fois que le résultat souhaité sera atteint. En élargissant notre parenthèse, nous avons :

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial \phi}{\partial x} - x \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \\ + \hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial \phi}{\partial z} - z \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (\text{II. 17a})$$

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = -\hbar^2 \left(+y \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial \phi}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial z} x \frac{\partial \phi}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} z \frac{\partial \phi}{\partial x} + z \frac{\partial}{\partial y} x \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \\ + \hbar^2 \left(+z \frac{\partial}{\partial x} y \frac{\partial \phi}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} z \frac{\partial \phi}{\partial y} - x \frac{\partial}{\partial z} y \frac{\partial \phi}{\partial z} + x \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \quad (\text{II. 17b})$$

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = -\hbar^2 \left(+y \frac{\partial \phi}{\partial x} + yz \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z} - xy \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + zx \frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} \right) \\ + \hbar^2 \left(+yz \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - xy \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + x \frac{\partial \phi}{\partial y} + xz \frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} \right) \quad (\text{II. 17c})$$

$$(L_x L_y - L_y L_x)\phi = +\hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi \quad (\text{II. 17d})$$

$$(L_x L_y - L_y L_x) = +\hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (\text{II. 17e})$$

Nous savons que :

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (\text{II. 15})$$

Alors :

$$(L_x L_y - L_y L_x) = i\hbar L_z = [L_x, L_y] \quad (\text{II. 18})$$

De la même manière nous recueillons tout le groupe [2] :

$$[L_x, L_y] = (L_x L_y - L_y L_x) = i\hbar L_z \quad (\text{II. 18})$$

$$[L_y, L_z] = (L_y L_z - L_z L_y) = i\hbar L_x \quad (\text{II. 19})$$

$$[L_z, L_x] = (L_z L_x - L_x L_z) = i\hbar L_y \quad (\text{II. 20})$$

II.5 Analogie de spin intrinsèque Pauli

Alors, comment Wolfgang Pauli a-t-il martelé Spin intrinsèque dans l'équation de Schrödinger ? En l'absence de champs magnétiques, l'équation de Schrödinger étendue doit coïncider avec l'équation de Schrödinger d'origine. Cependant, la présence d'un champ magnétique, interagissant avec le moment magnétique dû au spin électronique, diminuera ou augmentera l'énergie électronique en fonction de l'alignement relatif du champ externe et du spin interne. Pauli s'est rendu compte que le système avait deux cas extrêmes, aligné de champ ou anti-aligné, et que tous les cas intermédiaires peuvent être modélisés comme une superposition à l'échelle de ces deux cas extrêmes. Sa solution était de doubler la fonction d'onde pour avoir deux composants complexes qui, en l'absence d'un champ magnétique, coïncideraient.

En termes de matrice, le champ est devenu une colonne à deux éléments. Pour l'équation de Schrödinger dépendant du temps, l'évolution du champ est régie par l'hamiltonien fonctionnant sur l'état actuel. Ceci, à son tour, signifiait que l'hamiltonien est devenu une matrice deux par deux.

La question suivante était de savoir comment gérer la direction de l'axe de rotation, car en général, l'axe de rotation serait indépendant de la position.

Pauli était catégorique sur le fait de garder l'axe de rotation distinct de l'espace de coordonnées. Peut-être a-t-il été influencé par des considérations d'espace à quatre dimensions, où nous pouvons avoir deux plans de rotation orthogonaux indépendants. Peut-être considérait-il l'électron comme une particule ponctuelle et estimait qu'une particule ponctuelle de dimension zéro [3], manquant d'étendue, ne pouvait pas tourner, générer un champ magnétique ou posséder un moment cinétique. Contrairement à Louis de Broglie, Pauli n'était pas ouvert à l'idée d'un électron en mouvement continu (action), auto-interactif, suivant une trajectoire courbe même en l'absence de champs magnétiques externes.

Le point de départ de Pauli était d'affirmer un modèle mathématique pour le spin \mathbf{S} , analogue au moment angulaire orbital \mathbf{L} . Le spin intrinsèque \mathbf{S} avait un ensemble de relations de commutateurs mimant \mathbf{L} .

$$[S_x, S_y] = (S_x S_y - S_y S_x) = i\hbar S_z \quad (\text{II. 21})$$

$$[S_y, S_z] = (S_y S_z - S_z S_y) = i\hbar S_x \quad (\text{II. 22})$$

$$[S_z, S_x] = (S_z S_x - S_x S_z) = i\hbar S_y \quad (\text{II. 23})$$

L'état de Spin est décrit par un spineur à deux composants :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 24})$$

Les matrices Pauli satisfont :

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (\text{II. 25})$$

Où ε_{ijk} est totalement antisymétrique avec $\varepsilon_{123} = 1, i, j, \dots = 1, 2, 3$, et il y a sommation sur des indices répétés.

Où spin up est $\chi_+ = (1 \ 0)^T$ et spin down est $\chi_- = (0 \ 1)^T$.

Les opérateurs de spin sont :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (\text{II. 26})$$

Où

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 27})$$

En mécanique quantique standard, nous écrivons l'expression suivante :

$$\sigma = i\sigma_x + j\sigma_y + k\sigma_z \quad (\text{II. 28})$$

Cette expression est un vecteur, nous la prenons comme une dyade. Une bonne référence pour les dyades et les dyadiques est Morse et Feshbach [4], et en pratique cette dyade est divisé en un vecteur pour obtenir un autre vecteur. En utilisant \vec{a} comme vecteur, nous avons :

$$(\sigma \cdot \vec{a}) = (i\sigma_x + j\sigma_y + k\sigma_z) \cdot (ia_x + ja_y + ka_z) \quad (\text{II. 29a})$$

$$= a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z \quad (\text{II. 29b})$$

Le prochain exercice standard, par exemple dans Arfken [5], est de montrer

$$(\sigma \cdot \vec{a})(\sigma \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\sigma \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) \quad (\text{II. 30})$$

Nous reconnaissons $i = \sigma_x\sigma_y\sigma_z$ [6] comme pseudoscalaire. Nous reconnaissons les produits scalaires de la dyade sigma comme vecteur. On a

$$(\sigma \cdot \vec{a})(\sigma \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\sigma \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) \quad (\text{II. 30})$$

$$(\sigma \cdot \vec{a}) = (a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z) \quad (\text{II. 31})$$

$$(\sigma \cdot \vec{b}) = (b_x\sigma_x + b_y\sigma_y + b_z\sigma_z) \quad (\text{II. 32})$$

$$\sigma \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = (a_yb_z - a_zb_y)\sigma_x + (a_zb_x - a_xb_z)\sigma_y + (a_xb_y - a_yb_x)\sigma_z \quad (\text{II. 33})$$

$$i = \sigma_x\sigma_y\sigma_z \quad (\text{II. 34})$$

$$i\sigma \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = (a_yb_z - a_zb_y)\sigma_y\sigma_z + (a_zb_x - a_xb_z)\sigma_z\sigma_x + (a_xb_y - a_yb_x)\sigma_x\sigma_y \quad (\text{II. 35a})$$

$$= \vec{a} \wedge \vec{b} \quad (\text{II. 35b})$$

Maintenant notre multiplication

$$\begin{aligned} (\sigma \cdot \vec{a})(\sigma \cdot \vec{b}) &= (a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z)(b_x\sigma_x + b_y\sigma_y + b_z\sigma_z) \\ &= a_x\sigma_x b_x\sigma_x + a_y\sigma_y b_y\sigma_y + a_z\sigma_z b_z\sigma_z + (a_yb_z - a_zb_y)\sigma_y\sigma_z \\ &\quad + (a_zb_x - a_xb_z)\sigma_z\sigma_x + (a_xb_y - a_yb_x)\sigma_x\sigma_y \end{aligned} \quad (\text{II. 36a})$$

$$\begin{aligned}
&= a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \\
&+ (a_y b_z - a_z b_y) \sigma_y \sigma_z + (a_z b_x - a_x b_z) \sigma_z \sigma_x + (a_x b_y - a_y b_x) \sigma_x \sigma_y \\
&= \vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \wedge \vec{b} \tag{II. 36b}
\end{aligned}$$

C'est le résultat de la multiplication de deux vecteurs en utilisant sigma [7].

II.6 Equation de Pauli en notation matricielle

Nous travaillons maintenant sur l'équation de Pauli Schrödinger au format standard. Pour référence, l'équation de Schrödinger pour une particule dans un champ électromagnétique est généralement écrite comme

$$E\psi = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right] \psi \tag{II. 37}$$

L'équation Pauli est

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{(\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2}{2m} + q\phi \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \tag{II. 38}$$

Nous allons travailler avec l'opérateur $(\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2$:

$$(\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2 = (\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A})) \cdot (\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A})) \tag{II. 39}$$

A l'aide de

$$(\sigma \cdot \vec{a})(\sigma \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\sigma \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) \tag{II. 30}$$

On a

$$(\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A})) \cdot (\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A})) = (\vec{p} - q\vec{A}) \cdot (\vec{p} - q\vec{A}) + i\sigma \cdot ((\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})) \tag{II. 40a}$$

$$= (\vec{p} - q\vec{A})^2 + i\sigma \cdot ((\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})) \tag{II. 40b}$$

Nous voyons que nous avons le terme Schrödinger plus un produit croisé. Travaillons avec le produit croisé, en utilisant une fonction fictive ϕ pour réduire la confusion avec l'opérateur.

Nous commençons par substituer $p = i\hbar\vec{\nabla}$

$$(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})\phi = (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \times (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})\phi \tag{II. 41a}$$

$$= (-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}) \times (-i\hbar\vec{\nabla}\phi - q\vec{A}\phi) \quad (\text{II. 41b})$$

$$= (i\hbar\vec{\nabla} + q\vec{A}) \times (i\hbar\vec{\nabla}\phi + q\vec{A}\phi) \quad (\text{II. 41c})$$

$$= -\hbar^2\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\phi + i\hbar\vec{\nabla} \times q(\vec{A}\phi) + q\vec{A} \times (i\hbar\vec{\nabla}\phi) + q\vec{A} \times (q\vec{A}\phi) \quad (\text{II. 41d})$$

Maintenant, nous perdons la boucle d'un gradient, et nous perdons la croix de \vec{A} avec lui-même.
Continuer à simplifier

$$(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})\phi = +iq\hbar\vec{\nabla} \times (\vec{A}\phi) + iq\hbar\vec{A} \times (\vec{\nabla}\phi) \quad (\text{II. 42a})$$

$$= +iq\hbar(\phi\vec{\nabla} \times \vec{A} - \vec{A} \times \vec{\nabla}\phi) + iq\hbar\vec{A} \times \vec{\nabla}\phi \quad (\text{II. 42b})$$

$$= iq\hbar\phi\vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (\text{II. 42c})$$

$$= iq\hbar\vec{B}\phi \quad (\text{II. 42d})$$

Après avoir atteint son objectif, supprimez maintenant la fonction fictive ϕ , et revenez à l'équation précédente

$$(\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A})) \cdot (\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A})) = (\vec{p} - q\vec{A})^2 + i\sigma \cdot ((\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})) \quad (\text{II. 43a})$$

$$= (\vec{p} - q\vec{A})^2 + i\sigma \cdot (iq\hbar\vec{B}) \quad (\text{II. 43b})$$

$$= (\vec{p} - q\vec{A})^2 - q\hbar\sigma \cdot \vec{B} \quad (\text{II. 43c})$$

Nous remplaçons maintenant l'équation de Pauli, et avons

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{(\sigma \cdot (\vec{p} - q\vec{A}))^2}{2m} + q\phi \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 44a})$$

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2 - q\hbar\sigma \cdot \vec{B}}{2m} + q\phi \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 44b})$$

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} - \left[\frac{q\hbar\sigma \cdot \vec{B}}{2m} \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 44c})$$

C'est une forme standard pour l'équation de Pauli. Nous avons les termes de l'équation standard de Schrödinger, appliquée au spineur à deux composants.

En l'absence de champ magnétique, les deux termes φ_1 et φ_2 coïncident.

Et nous avons les termes de champ magnétique liés au spin.

Termes liés aux Spin :

Je connais déjà les équations au niveau des composants pour l'équation de Schrödinger. Je veux maintenant regarder les termes de Spin :

$$\left[\frac{q\hbar\sigma \cdot \vec{B}}{2m} \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \frac{q\hbar}{2m} (B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 45})$$

On a

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad (\text{II. 25})$$

Nous avons donc

$$B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z = \begin{pmatrix} (B_z) & (B_x - iB_y) \\ (B_x + iB_y) & (-B_z) \end{pmatrix} \quad (\text{II. 46})$$

On peut maintenant écrire

$$\left[\frac{q\hbar\sigma \cdot \vec{B}}{2m} \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \frac{q\hbar}{2m} (B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 47a})$$

$$= \frac{q\hbar}{2m} \begin{pmatrix} (B_z) & (B_x - iB_y) \\ (B_x + iB_y) & (-B_z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 47b})$$

$$= \frac{q\hbar}{2m} \begin{pmatrix} (B_z)\varphi_1 & (B_x - iB_y)\varphi_2 \\ (B_x + iB_y)\varphi_1 & (-B_z)\varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 47c})$$

Nous remettons le substitut dans l'équation de Pauli et obtenons

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} - \left[\frac{q\hbar\sigma \cdot \vec{B}}{2m} \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 48a})$$

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \left[\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi \right] \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} - \frac{q\hbar}{2m} \begin{pmatrix} (B_z)\varphi_1 & (B_x - iB_y)\varphi_2 \\ (B_x + iB_y)\varphi_1 & (-B_z)\varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 48b})$$

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{(\vec{P} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi - \frac{q\hbar B_z}{2m} & (B_x - iB_y) \\ (B_x + iB_y) & \frac{(\vec{P} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi + \frac{q\hbar B_z}{2m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 48c})$$

À ce stade, nous pouvons écrire les équations différentielles complexes pour φ_1 et φ_2 . Avant de le faire, je signale que toutes les traces des matrices sigma ont disparu du système d'équations. Je n'avais pas du tout prévu cela.

En effet, les matrices sigma n'étaient qu'un échafaudage pour incorporer le spin. Ayant atteint son objectif, il est discrètement retiré.

II.7 Equations des composants de la fonction d'onde de Pauli

Le processus de conversion en équations de composants correspond au processus effectué avec l'équation de Schrödinger. Nous substituons d'abord aux opérateurs d'énergie et de Momentum [8].

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{II. 49})$$

$$E\psi = \frac{\partial}{\partial t} (i\hbar\psi) \quad (\text{II. 50})$$

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad (\text{II. 51})$$

$$\vec{p}\psi = -i\hbar\vec{\nabla}\psi \quad (\text{II. 52})$$

La fonction d'onde a des composants réels et imaginaires. Nous séparons ces deux équations.

Dans nos équations ci-dessus, les termes qui expriment l'équation de Schrödinger standard coïncident et sont directement traduits dans les termes ci-dessous. Les termes magnétiques, haut et bas, sont séparés par la fonction d'onde et l'état réel par rapport à l'état imaginaire.

Tout cela dit et fait, voici les quatre équations composantes de l'équation de Pauli :

Pour la fonction d'onde positive, nous avons

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{r1} = & + \frac{q}{m} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \varphi_{r1}) + \frac{q}{2m} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})(\varphi_{r1}) - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \varphi_{i1} + \frac{q^2}{2\hbar m} A^2(\varphi_{i1}) + \frac{q\phi}{\hbar}(\varphi_{i1}) \\ & - \frac{q\hbar}{2m} (B_x \varphi_{r2} + B_y \varphi_{i2} + B_z \varphi_{r1}) \end{aligned} \quad (\text{II. 53})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{i1} = & \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \varphi_{r1} - \frac{q^2}{2\hbar m} A^2(\varphi_{r1}) - \frac{q\phi}{\hbar}(\varphi_{r1}) + \frac{q}{m} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \varphi_{i1}) + \frac{q}{2m} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})(\varphi_{i1}) \\ & - \frac{q\hbar}{2m} (B_x \varphi_{i2} + B_y \varphi_{r2} + B_z \varphi_{i1}) \end{aligned} \quad (\text{II. 54})$$

Pour la fonction d'onde négative, nous avons

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{r2} = & + \frac{q}{m} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \varphi_{r2}) + \frac{q}{2m} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})(\varphi_{r2}) - \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \varphi_{i2} + \frac{q^2}{2\hbar m} A^2(\varphi_{i2}) + \frac{q\phi}{\hbar}(\varphi_{i2}) \\ & - \frac{q\hbar}{2m} (B_x \varphi_{r1} + B_y \varphi_{i1} + B_z \varphi_{r2}) \end{aligned} \quad (\text{II. 55})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{i2} = & \frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 \varphi_{r2} - \frac{q^2}{2\hbar m} A^2(\varphi_{r2}) - \frac{q\phi}{\hbar}(\varphi_{r2}) + \frac{q}{m} (\vec{A} \cdot \vec{\nabla} \varphi_{i2}) + \frac{q}{2m} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})(\varphi_{i2}) \\ & - \frac{q\hbar}{2m} (B_x \varphi_{i1} + B_y \varphi_{r1} + B_z \varphi_{i2}) \end{aligned} \quad (\text{II. 56})$$

II.8 Conclusion

Après avoir déterminé l'équation de Pauli qui n'est autre que l'équation de Schrödinger dans un champ magnétique, nous allons chercher à résoudre numériquement ce qui est l'objectif.

References

- [1] David Hestense,” Spin and uncertainty in the interpretation of quantum mechanics” Am. J. Phys., 47 (5), May 1979.
- [2] David J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics 2nd ed. 2005
Prentice Hall.
- [3] D. Hestenes and R. Gurtler, Am. J. Phys. 39, 1028 (1971).
- [4] Philip Morse and Herman Feshbach, Methods of Theoretical Physics 1953,
McGraw-Hill, New York.
- [5] George Arfken, Mathematical Methods for Physicist 3rd ed. Academic
Press 1985.
- [6] David Hestenes,” Clifford Algebra and the Interpretation of Quantum
Mechanics”, Clifford Algebras and their Applications in Mathematical
Physics. Reidel, Dordrecht/Boston (1986).
- [7] Chris Doran and Anthony Lasenby, Geometric Algebra for Physicists
Cambridge University Press. Nov 22, 2007.
- [8] Wolfgang P. Schleich, Marlon O. Scully,” Schrodinger Equation Revisited”,
Proceedings of the National Academy of Science (US), vol 110, no. 14. 18 Mar 2013.

Chapitre III

Résolution

numérique de

l'équation de

Pauli

III.1 Introduction

Maintenant nous arrivons à la partie la plus fructueuse de notre travail ou nous allons convertir tous ce que nous avons vues aux chapitres précédents à de équations numériques base sur un organigramme de calcul.

Dans cette partie nous allons utiliser la méthode variationnelle du fait qu'elle représente le cœur de ce travail vis-à-vis son critère de convergence et sa tendance a mieux minimiser l'énergie totale du système d'où état fondamental. Il est bien connu que dans cette méthode la recherche des bonnes fonctions d'onde est basée sur la variation du paramètre d'ajustage alpha. Nous rappelons que dans cette méthode on devrait avoir que la quantité physique suivante :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \text{ soit stationnaire [1-5].}$$

Mais avant de procéder à l'utilisation de cette méthode nous allons simplifier nos équations déjà vue au chapitre précédent.

III.2 Equation de Pauli sous la vision de la méthode variationnelle

Arrive à cette étape nous allons utiliser notre célèbre équation (II-48c) du chapitre II :

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{(\vec{P}-q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi - \frac{q\hbar B_z}{2m} & (B_x - iB_y) \\ (B_x + iB_y) & \frac{(\vec{P}-q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi + \frac{q\hbar B_z}{2m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{III.1})$$

Et nous procédons avec la méthode variationnelle, une méthode qui se base sur le choix d'un ensemble de fonction d'essai via la minimisation de l'énergie totale [1-5].

Alors partant de l'expression suivante des fonctions

$$\varphi_1(r) = A e^{-\alpha_1 r} \quad (\text{III.2})$$

$$\varphi_2(r) = B e^{-\alpha_2 r} \quad (\text{III.3})$$

Calculons constante A :

$$\int \varphi_1^*(r) \varphi_1(r) dr^3 = 1 \quad (\text{III.4a})$$

$$\Rightarrow \int A e^{-\alpha_1 r} . A e^{-\alpha_1 r} 4\pi r^2 dr = 1 \quad (\text{III.4b})$$

$$\Rightarrow A^2 \int e^{-2\alpha_1 r} . 4\pi r^2 dr = 1 \quad (\text{III.4c})$$

$$\Rightarrow 4\pi A^2 \int e^{-2\alpha_1 r} r^2 dr = 1 \quad (\text{III. 4d})$$

On a :

$$\int r^n e^{-\alpha r} dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \quad (\text{III. 4e})$$

Donc :

$$4\pi A^2 \int e^{-2\alpha_1 r} r^2 dr = 4\pi A^2 \cdot \frac{2!}{(2\alpha_1)^3} = 1 \quad (\text{III. 4f})$$

$$\Rightarrow \frac{8\pi A^2}{8\alpha_1^3} = 1 \quad (\text{III. 4g})$$

$$\Rightarrow A^2 = \frac{\alpha_1^3}{\pi} \quad (\text{III. 4h})$$

Avec la même manière nous trouvons la constante de normalisation B

$$B^2 = \frac{\alpha_2^3}{\pi} \quad (\text{III. 5})$$

Revenons à notre équation de Pauli

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{III. 6})$$

Et utilisant le principe variationnelle c'est-à-dire multipliant à gauche et droite par le Bra

$\langle\psi|$:

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|E|\psi\rangle \quad (\text{III. 3a})$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = E\langle\psi|\psi\rangle \quad (\text{III. 3b})$$

Et calculant E :

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (\text{III. 8})$$

Essayant d'expliciter les termes de l'équation de Pauli, alors le terme diagonal qui contient le champ magnétique $\frac{q\hbar B_z}{2m}$ [1-5].

Pour un bon calcul numérique nous allons faire le choix suivant

On prend un champ magnétique suivant l'axe des z $\left[\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix} \vec{u} \right]$, notre composante suivant cet axe est $B_z = 1$.

Or d'après les équations de Maxwell nous savons que \vec{B} s'écrit en fonction de \vec{A} comme :

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A} \quad (\text{III. 9a})$$

$$\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} \quad (\text{III. 9b})$$

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial y} A_z - \frac{\partial}{\partial z} A_y = 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} A_x - \frac{\partial}{\partial x} A_z = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} A_y - \frac{\partial}{\partial y} A_x = 1 \end{cases} \quad (\text{III. 9c})$$

Nous obtenons pour un meilleur choix les composantes de \vec{A} comme :

$$B_z = \frac{\partial}{\partial x} A_y - \frac{\partial}{\partial y} A_x = 1 \quad (\text{III. 10})$$

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} A_x = 0 \\ A_y = x \\ A_z = 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III. 11})$$

Alors

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III. 12})$$

Avec

$$x = r \quad (\text{III. 13})$$

Remplaçant les composantes de notre champ magnétique dans les l'équation de Pauli nous obtenons une matrice diagonale :

$$E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{(\vec{P} - q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi - \frac{q\hbar}{2m} & 0 \\ 0 & \frac{(\vec{P} - q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi + \frac{q\hbar}{2m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{III. 14})$$

Injectant l'expression de la fonction totale dans l'équation (III.6) :

$$|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle \quad (\text{III. 15})$$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{III. 6})$$

$$H [c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle] = E [c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle] \quad (\text{III. 16})$$

Avec les deux éléments de base $|\varphi_1\rangle = Ae^{-\alpha_1 r}$ et $|\varphi_2\rangle = Be^{-\alpha_2 r}$

Multiplier Eq à partir de la gauche par $\langle\varphi_1|$ et l'intégration sur tout l'espace donne la première rangée des éléments de la matrice :

$$c_1 H_{11} + c_2 H_{12} = c_1 E S_{11} + c_2 E S_{12} \quad (\text{III. 17})$$

De même, multiplier à partir de la gauche par $\langle\varphi_2|$ donne la deuxième ligne :

$$c_1 H_{21} + c_2 H_{22} = c_1 E S_{21} + c_2 E S_{22} \quad (\text{III. 18})$$

Cela nécessite que le déterminant soit nul :

$$\det \begin{pmatrix} H_{11} - E S_{11} & H_{12} - E S_{12} \\ H_{21} - E S_{21} & H_{22} - E S_{22} \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{III. 19})$$

Les expressions explicite des éléments de matrice H_{ij} et S_{ij} sont données en calculant les constantes de normalisation A et B qui donnent :

$$\int_0^\infty dr 4\pi r^2 A^2 e^{-2\alpha_1 r} \int_0^\infty dr 4\pi r^2 B^2 e^{-2\alpha_2 r} = 1 \quad (\text{III. 20})$$

Et en utilisant $\int_0^\infty dr r^n e^{-\alpha r} = \frac{n!}{(\alpha)^{n+1}}$ qui donne $A = \sqrt{\frac{\alpha_1^3}{\pi}}$ et $B = \sqrt{\frac{\alpha_2^3}{\pi}}$

Puis mène $S_{11} = S_{22} = 1$

Et les deux éléments S_{12} et S_{21} sont :

$$S_{12} = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int_0^\infty 4\pi r^2 A e^{-\alpha_1 r} \cdot B e^{-\alpha_2 r} dr \quad (\text{III. 21a})$$

$$= 4\pi A \cdot B \int_0^\infty r^2 e^{-(\alpha_1 + \alpha_2)r} dr \quad (\text{III. 21b})$$

$$= 4\pi \sqrt{\frac{\alpha_1^3}{\pi}} \sqrt{\frac{\alpha_2^3}{\pi}} \frac{2!}{(\alpha_1 + \alpha_2)^3} \quad (\text{III. 21c})$$

$$S_{12} = \frac{8\alpha_1^{\frac{3}{2}}\alpha_2^{\frac{3}{2}}}{(\alpha_1 + \alpha_2)^3} = S_{21} \quad (\text{III. 21d})$$

Et maintenant je calcule les éléments H_{ij} :

On a $H_{12} = H_{21} = 0$

$$H_{11} = \langle \varphi_1 | H | \varphi_1 \rangle = \int \varphi_1^* \left[\frac{(\vec{P} - q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi - \frac{q\hbar}{2m} \right] \varphi_1 4\pi r^2 dr^3 \quad (\text{III. 22})$$

On calcule partie par partie :

$$\left\langle \varphi_1 \left| \frac{(\vec{P} - q\vec{A})^2}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle = \left\langle \varphi_1 \left| \frac{p^2}{2m} - \frac{q\vec{P} \cdot \vec{A}}{2m} - \frac{q\vec{A} \cdot \vec{p}}{2m} + \frac{q^2 A^2}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle \quad (\text{III. 23})$$

En coordonnée polaire $p^2 = -i\hbar \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right]$, alors :

$$\left\langle \varphi_1 \left| \frac{p^2}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty A e^{-\alpha_1 r} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right] A e^{-\alpha_1 r} 4\pi r^2 dr \quad (\text{III. 24a})$$

$$= -\frac{4\pi A^2 \hbar^2}{2m} \int_0^\infty e^{-\alpha_1 r} \left[\frac{d^2}{dr^2} e^{-\alpha_1 r} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} e^{-\alpha_1 r} \right] r^2 dr \quad (\text{III. 24b})$$

$$= -\frac{4\pi A^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\int_0^\infty \alpha_1^2 e^{-2\alpha_1 r} r^2 dr \right) + \left(\int_0^\infty -\alpha_1 2r e^{-2\alpha_1 r} dr \right) \right] \quad (\text{III. 24c})$$

$$= -\frac{4\pi A^2 \hbar^2}{2m} \left[\alpha_1^2 \frac{2!}{(2\alpha)^3} - 2\alpha \frac{1!}{(2\alpha)^2} \right] \quad (\text{III. 24d})$$

$$= -\frac{4\pi A^2 \hbar^2}{2m} \cdot \alpha_1^2 \frac{2}{8\alpha_1^3} + \frac{4\pi \hbar^2 A^2}{2m} \cdot 2\alpha_1 \frac{1}{4\alpha_1^2} \quad (\text{III. 24e})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \frac{\alpha_1^3}{\pi} \alpha_1^2 \frac{2}{8\alpha_1^3} + \frac{\hbar^2}{2m} 4\pi \frac{\alpha_1^3}{\pi} 2\alpha_1 \frac{1}{4\alpha_1^2} \quad (\text{III. 24f})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \alpha_1^2 + \frac{\hbar^2}{m} \alpha_1^2 \quad (\text{III. 24g})$$

$$\langle \varphi_1 | \frac{p^2}{2m} | \varphi_1 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha_1^2 \quad (\text{III. 24h})$$

Nous avançons à $\langle \varphi_1 | \frac{q\vec{P} \cdot \vec{A}}{2m} | \varphi_1 \rangle$, on à $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ est pour le coordonnée polaire :

$$p_r = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \text{ Avec } \theta = 0 \quad (\text{III. 25a})$$

$$\text{Alors :} \quad \vec{P} = P_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{III. 25b})$$

Donc :

$$\langle \varphi_1 | \frac{q\vec{P} \cdot \vec{A}}{2m} | \varphi_1 \rangle = \frac{qA^2}{2m} \int_0^\infty e^{-\alpha_1 r} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \cdot r \right) e^{-\alpha_1 r} 4\pi r^2 dr \quad (\text{III. 26a})$$

$$= \frac{qA^2}{2m} \int_0^\infty 4\pi r^2 (-i\hbar) e^{-2\alpha_1 r} dr \quad (\text{III. 26b})$$

$$= -\frac{i\hbar q A^2 4\pi}{2m} \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha_1 r} dr \quad (\text{III. 26c})$$

$$= -\frac{i\hbar q 4\pi}{2m} \cdot \frac{\alpha_1^3}{\pi} \cdot \frac{2!}{8\alpha_1^3} \quad (\text{III. 26e})$$

$$\langle \varphi_1 | \frac{q\vec{P} \cdot \vec{A}}{2m} | \varphi_1 \rangle = -\frac{i\hbar q}{2m} \quad (\text{III. 26f})$$

Maintenant $\langle \varphi_1 | \frac{q\vec{A} \cdot \vec{P}}{2m} | \varphi_1 \rangle$:

$$\langle \varphi_1 | \frac{q\vec{A} \cdot \vec{P}}{2m} | \varphi_1 \rangle = \frac{qA^2 4\pi}{2m} \int_0^\infty e^{-\alpha_1 r} \left(r \cdot -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \right) e^{-\alpha_1 r} r^2 dr \quad (\text{III. 27a})$$

$$= \frac{i\hbar q A^2 4\pi}{2m} \alpha_1 \int_0^\infty r^3 e^{-2\alpha_1 r} dr \quad (\text{III. 27b})$$

$$= \frac{i\hbar q 4\pi}{2m} \frac{\alpha_1^3}{\pi} \alpha_1 \frac{3!}{16\alpha_1^4} \quad (\text{III. 27c})$$

$$\left\langle \varphi_1 \left| \frac{q\vec{A} \cdot \vec{P}}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle = \frac{i3\hbar q}{4m} \quad (\text{III. 27d})$$

Et maintenant $\left\langle \varphi_1 \left| \frac{q^2 A^2}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle$:

$$\left\langle \varphi_1 \left| \frac{q^2 A^2}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle = \frac{q^2 A^2}{2m} \int_0^\infty r^2 \cdot 4\pi r^2 e^{-2\alpha_1 r} dr \quad (\text{III. 28a})$$

$$= \frac{q^2}{2m} 4\pi \frac{\alpha_1^3}{\pi} \int_0^\infty r^4 e^{-2\alpha_1 r} dr \quad (\text{III. 28b})$$

$$= \frac{q^2 4\pi}{2m} \frac{\alpha_1^3}{\pi} \frac{4!}{(2\alpha_1)^5} \quad (\text{III. 28c})$$

$$= \frac{q^2 2\alpha_1^3}{m} \frac{24}{32\alpha_1^5} \quad (\text{III. 28d})$$

$$\left\langle \varphi_1 \left| \frac{q^2 A^2}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle = \frac{3q^2}{2\alpha_1^2} \quad (\text{III. 28e})$$

Et pour les deux parties restantes :

$$\langle \varphi_1 | q\varphi | \varphi_1 \rangle = q\varphi \quad (\text{III. 29})$$

$$\left\langle \varphi_1 \left| \frac{q\hbar}{2m} \right| \varphi_1 \right\rangle = \frac{q\hbar}{2m} \quad (\text{III. 30})$$

Et à partir de là, il est produit :

$$H_{11} = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha_1^2 + \frac{i\hbar q}{2m} - \frac{i3\hbar q}{4m} + \frac{3q^2}{2\alpha_1^2} + q\varphi + \frac{q\hbar}{2m} \quad (\text{III. 31})$$

Et le même pour H_{22} :

$$H_{22} = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha_2^2 + \frac{i\hbar q}{2m} - \frac{i3\hbar q}{4m} + \frac{3q^2}{2\alpha_2^2} + q\varphi - \frac{q\hbar}{2m} \quad (\text{III. 32})$$

Où on a pris que la partie réelle de H_{11} et H_{22} .

Et avec cela, nous avons :

$$\det \begin{pmatrix} H_{11} - ES_{11} & -ES_{12} \\ -ES_{21} & H_{22} - ES_{22} \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{III. 33a})$$

$$(1 - S_{12}^2)E^2 - (H_{11} + H_{22})E + H_{11}H_{22} = 0 \quad (\text{III. 33b})$$

Ou sont les racines :

$$E_1 = \frac{-(H_{11} + H_{22}) + \sqrt{(H_{11} + H_{22})^2 - 4(1 - S_{12}^2)(H_{11}H_{22})}}{2(1 - S_{12}^2)} \quad (\text{III. 34})$$

$$E_2 = \frac{-(H_{11} + H_{22}) - \sqrt{(H_{11} + H_{22})^2 - 4(1 - S_{12}^2)(H_{11}H_{22})}}{2(1 - S_{12}^2)} \quad (\text{III. 35})$$

III.3 Résultats et discussion :

III.3.a Organigramme de calcul :

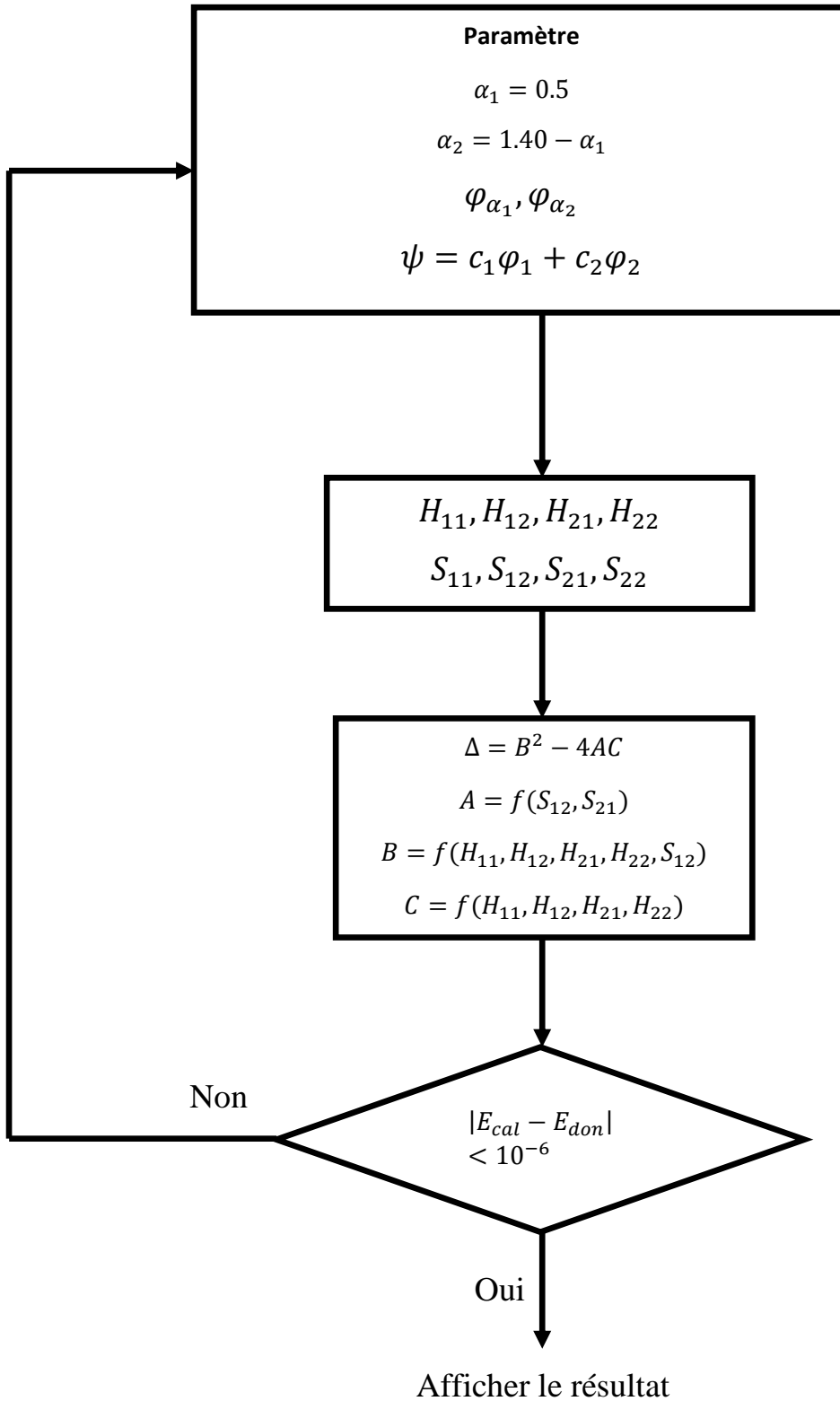


Figure III-1 : Organigramme de calcul

Nous présentons dans les figures au-dessous, nos résultats qui portent sur ce que nous avons étudié numériquement sur un code en Fortran 77 qui calcule l'énergie minimal ainsi que les fonctions φ_1 et φ_2 correspondantes.

L'utilisation de la méthode variationnelle basée sur le choix d'un ensemble de fonction d'essai via la minimisation de l'énergie totale ($\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0 \Rightarrow \alpha_{min} = \alpha_1$). Nous donnons le meilleur paramètre d'ajustage.

Dans un premier temps, on choisit une variation linéaire entre les paramètres α_1 et α_2 via la relation suivante :

$$\alpha_2 = (1.40 - \alpha_1).$$

Et à partir de là, nous avons calculé l'énergie et les fonctions φ_1 et φ_2 correspondantes.

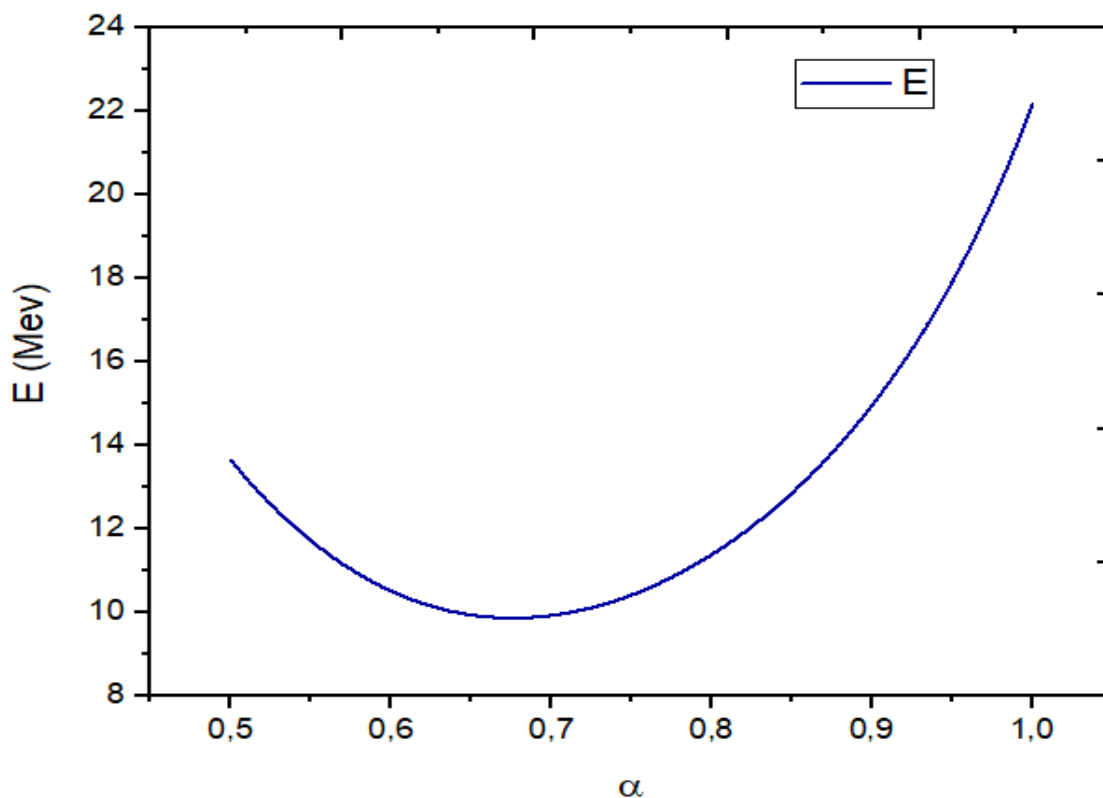


Figure III-2 : l'énergie E en fonction de α

La figure III-2 indique la variation de l'énergie E en fonction de α . Nous remarquons que l'énergie décroît jusqu'à ce qu'elle atteigne la valeur minimale, qui est : $E_{min} = 9.79 \text{ Mev}$,

qui lui correspond $\alpha_{min} = 0.6818$ puis elle croit vers des valeurs élevées rejeté par notre étude car le système doit être stable.

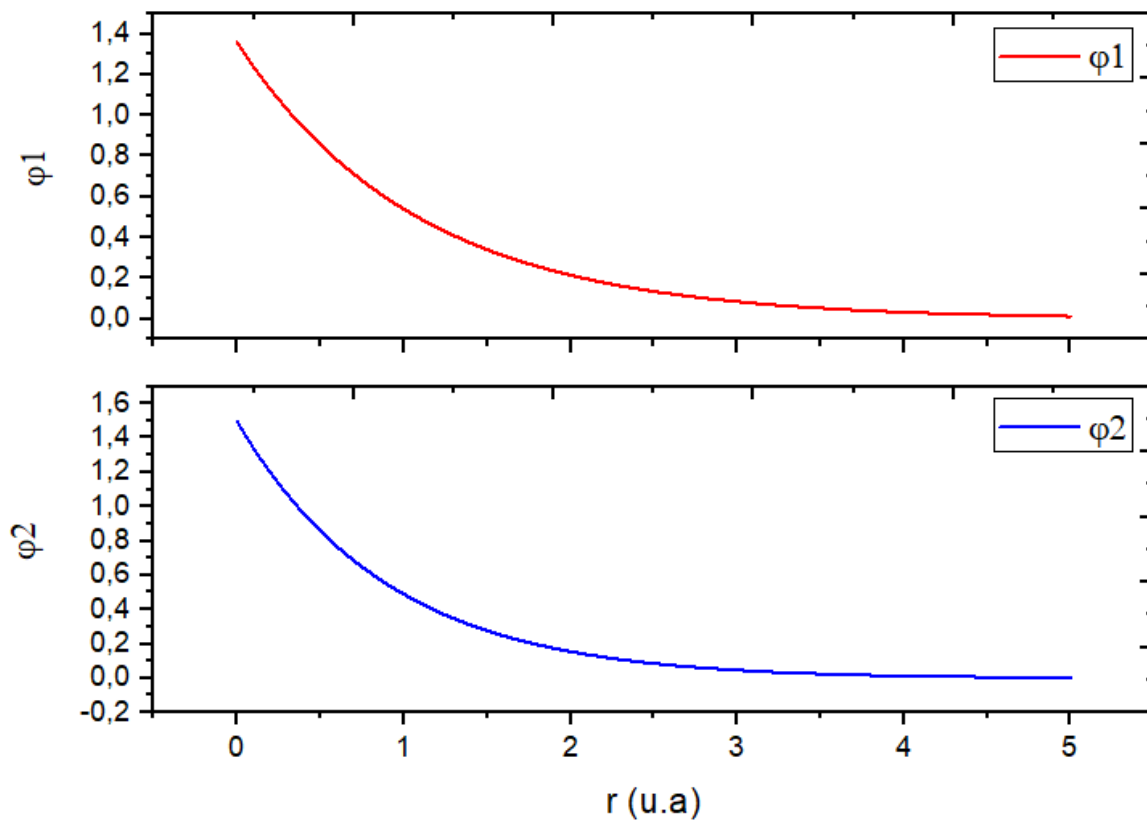


Figure III-3 : les fonctions φ_1 et φ_2 en fonction de r

La figure III-3 indique l'évolution des fonctions φ_1 et φ_2 en fonction de r . Une décroissance exponentielle est affichée, et une petite différence entre les fonctions φ_1 et φ_2 également remarquée.

Quand $r = 1$ u.a les deux fonctions deviendraient égaux à 0.5 et 0.6 respectivement et une tendance vers la valeur nulle.

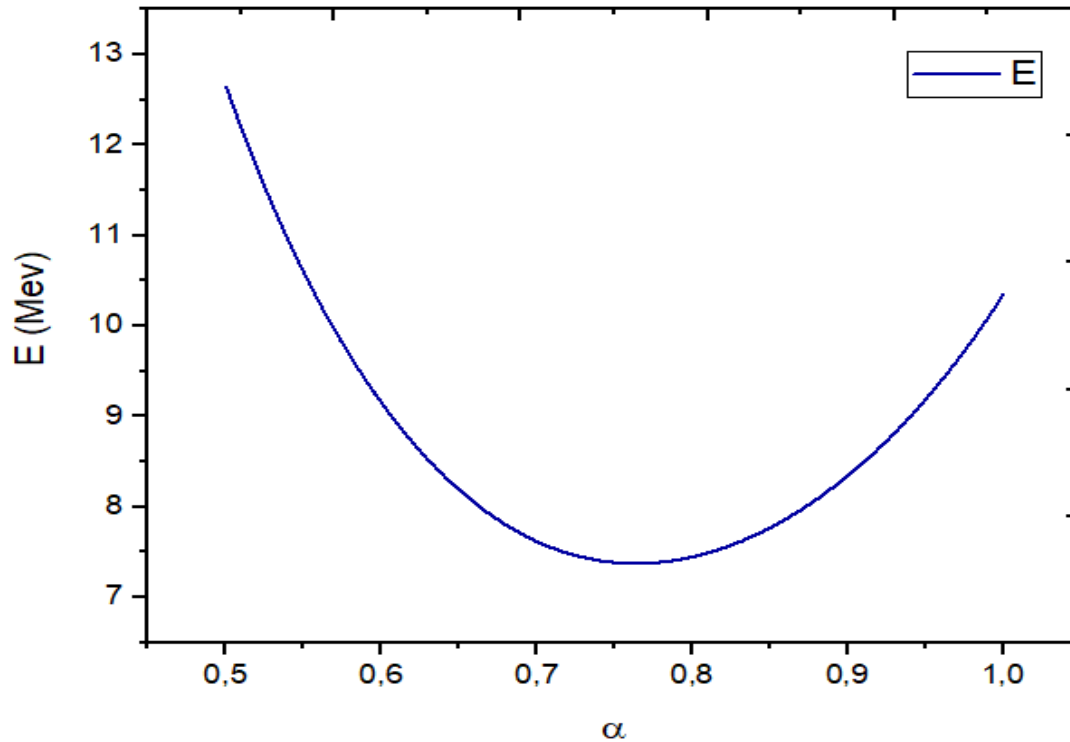


Figure III-4 : l'énergie E en fonction de α (2^{ème} choix)

La figure III-4 indique la variation de l'énergie E en fonction de α (2^{ème} choix). Dans cette sélection, nous avons supposé la relation entre α_1 et α_2 comme suit : $\alpha_2 = 1.60 - \alpha_1$.

Nous observons à travers cette courbe que l'énergie décroît jusqu'à ce qu'elle atteigne la valeur minimale qui est : $E_{min} = 7.36 \text{ Mev}$,

Elle correspond a un paramètre $\alpha_{min} = 0.7687$.

Une augmentation de l'énergie est observée juste après avoir dépassé la valeur du paramètre.

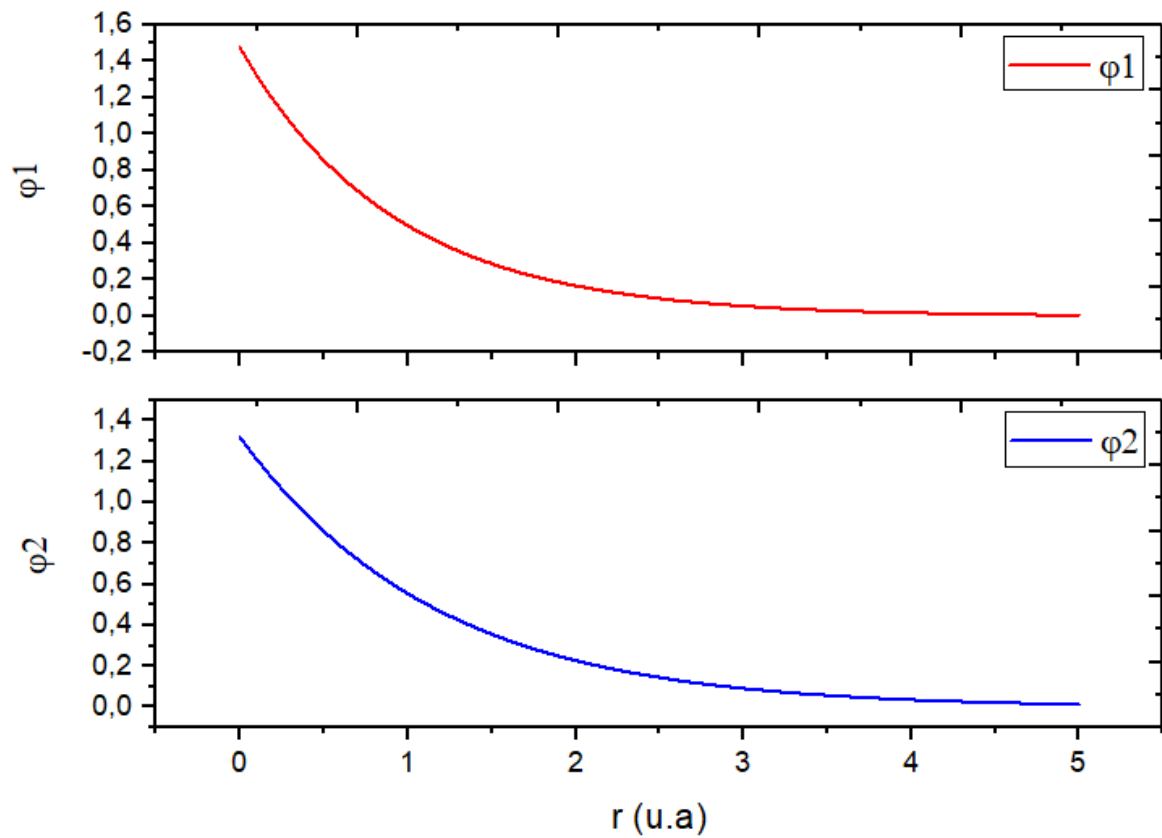


Figure III-5 : les fonctions φ_1 et φ_2 en fonction de r

La figure III-5 présente la variation de nos fonctions φ_1 et φ_2 en fonction de r via la variation linéaire et par conséquent le deuxième choix.

Une petite différence entre les fonctions φ_1 et φ_2 , est observée au fur a mesuré quand t'on dépasse la valeur $r = 1$ u.a

Les valeurs de ces fonctions seront : $\varphi_1 = 0.5$ et $\varphi_2 = 0.6$ puis une tendance vers zéro.

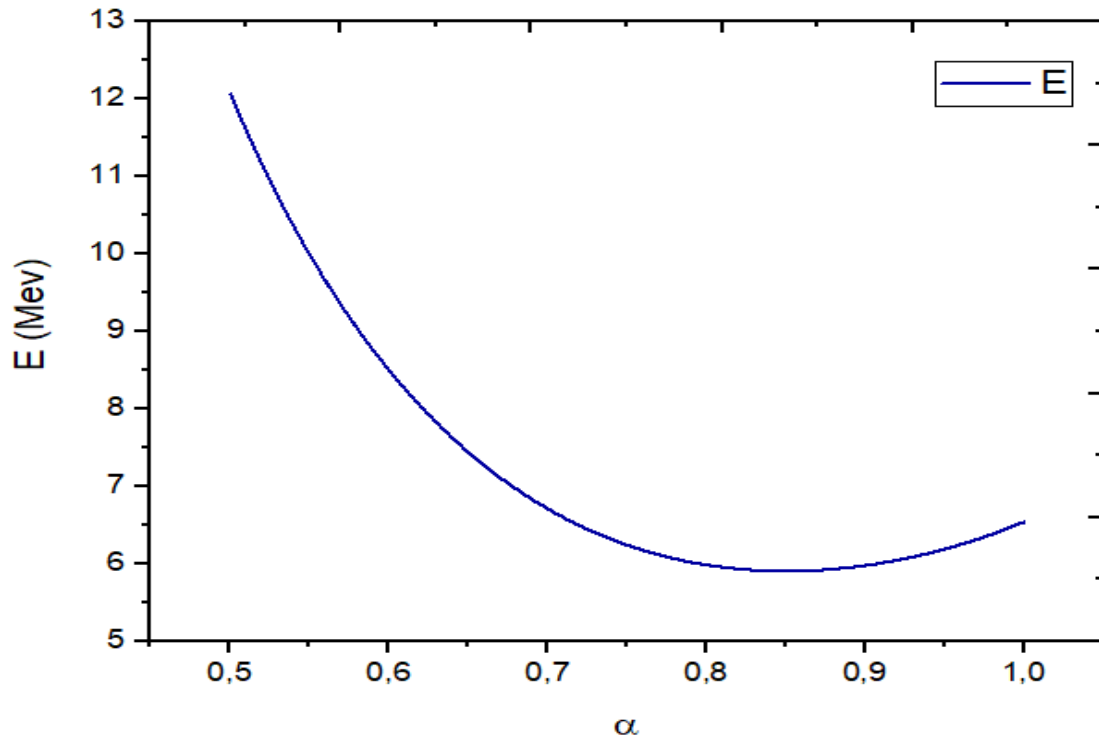


Figure III-6 : l'énergie E en fonction de α

La figure III-6 indique l'évolution de l'énergie E en fonction de α (3^{ème} choix). Pour ce choix, qui est le dernier choix dans notre travail, nous avons supposé une relation entre α_1 et α_2 sous cette forme : $\alpha_2 = 1.80 - \alpha_1$. A partir de cette courbe, on remarque que l'énergie décroît jusqu'à atteindre sa valeur la plus basse, qui est : $E_{min} = 5.88 \text{ Mev}$, qui correspond a $\alpha_{min} = 0.8490$.

Toujours une augmentation de l'énergie au-delà du paramètre.

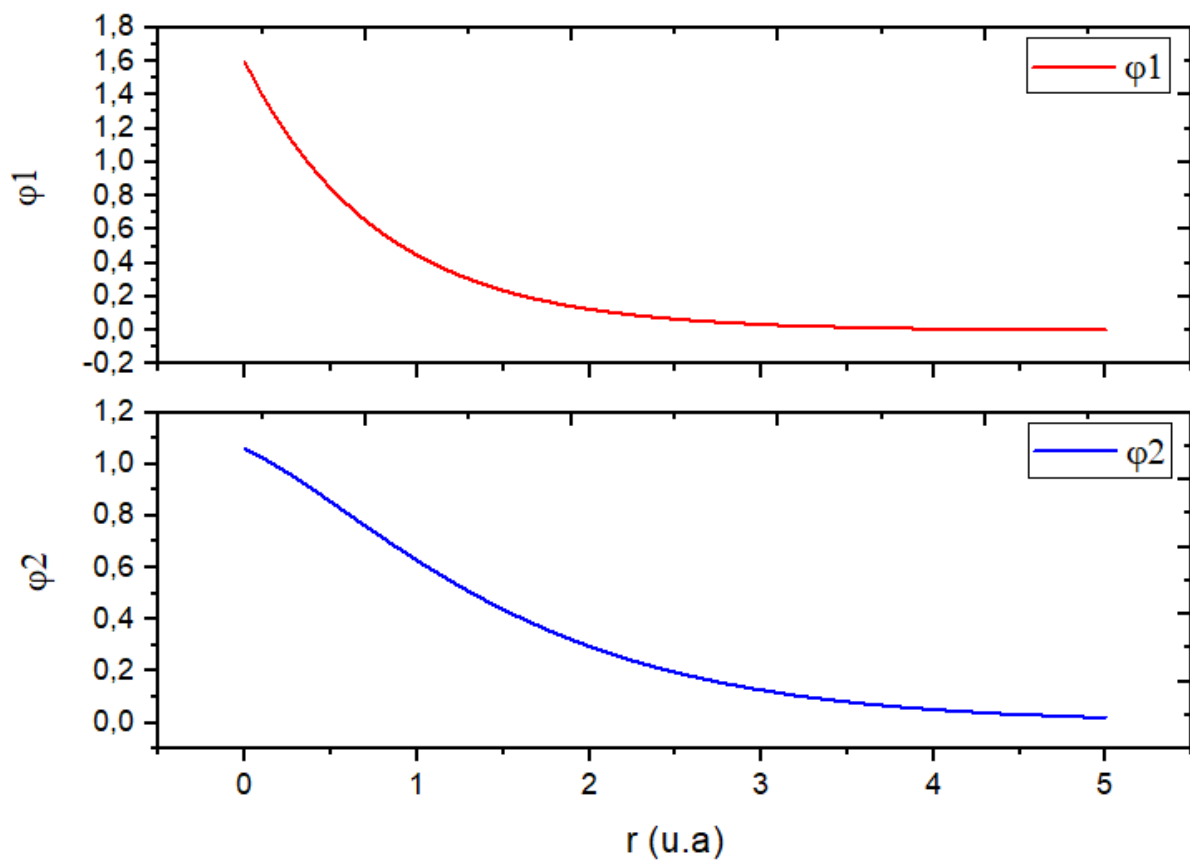


Figure III-7 : les fonctions φ_1 et φ_2 en fonction de r (3^{ème} choix)

La figure III-7 indique l'évolution des fonctions φ_1 et φ_2 en fonction de r . Dans ce dernier choix, on note une différence par rapport au choix précédent

Une légère différence de la fonction φ_2 , par rapport à la fonction φ_1 $r=1$ u.a, sa valeur est $\varphi_2 = 0.7$.

Les deux fonctions tendent vers des valeurs pratiquement nulles pour des r grand d'où convergence.

III.4 Conclusion

Les figures III-2, III-3, III-4, III-5, III-6 et III-7 montrent bien l'évolution de l'énergie minimale et de leurs fonctions associées. A travers ces figures, on remarque que le deuxième choix est optimal et nous convient ceci nous permettra de connaître le meilleur paramètre α_{min} . Une grande différence entre les choix est observée ce qui nous ramené a différencier et choisir la meilleure valeur.

La faite qu'on a choisi un champ magnétique B suivant l'axe de quantification l'axe des z nous a conduit à déterminer un bon potentiel vecteur A et par conséquent a de bons résultats via les énergies et leurs fonctions propres correspondante justifiant un système stable et son état décrit bien un état fondamental.

References

- [1] HARALD GROSSE and ANDRE MARTIN Particle Physics and the Schrodinger Equation book First published 1997 This digitally printed first paperback version 2005.
- [2] Pauli book *Published by* World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. P O Box 128, Fairer Road, Singapore 912805 *USA office:* Suite IB, 1060 Main Street, River Edge, NJ 07661 *UK office:* 57 Shelton Street, Covent Garden, London WC2H 9HE.(2001).
- [3] G.F. Torres del Castillo and J. Velazquez Castro REVISTA MEXICANA DE FÍSICA (2004) 50 (3) 306–310.
- [4] N. Masmoudi, N.J. Mauser, The Self consistent Pauli Equation, *Monat Shefte der Mathematica* (2001)132, 19-24.
- [5] Héctor Torres-Silva *Journal of Electromagnetic Analysis and Applications*, (2013), 5, 294-301.

Conclusion générale

Dans ce mémoire, nous avons étudié avec beaucoup plus de précision l'intelligence de Pauli est surtout lorsqu'il a inséré ses matrices dans l'équation de Schrödinger pour une particule dans un champ électromagnétique, prouvant l'existence du spin.

Et après avoir résolu l'équation de Pauli de manière approximative, où on s'est intéressé que à sa partie réelle nous avons converti toute notre équation théorique à des équations numériques puis on les a injectés dans un programme en Fortran 77. Nous avons obtenu des courbes d'énergie et de fonctions propres toute en se basant sur une méthode sophistiquée appelé méthode variationnelle. Il est bien connu que dans cette méthode le choix des fonctions d'essai joue un rôle primordial toute en respectant le critère de minimisation de l'Énergie totale du système d'où théorème de Ritz. Notre résultat affirme bien que le chemin suivi par Pauli pour donner son équation qui n'est autre que l'équation de Schrödinger plongée dans un champ magnétique donne assez d'information sur l'état fondamental du système ainsi que sur la probabilité de présence de la particule ainsi étudiée. L'astuce réside dans le choix du vecteur d'impulsion qui n'est autre que le vecteur ordinaire translate d'une quantité $-eA$.

Comme futur travail, nous pouvons aller au loin des choix ou, nous pouvons réajuster l'effet Zeeman qui permet de cliver les états énergétiques.

Résumé

Dans ce travail, nous avons cherché à comprendre l'origine de l'équation de Pauli. Une équation qui a bouleversé la physique de l'époque 1932 et qui n'est autre que l'équation de Schrödinger plongée dans un champ magnétique.

Nous avons utilisé la méthode variationnelle pour aborder ce sujet ou on s'est basée sur un ensemble de fonction d'essai capable de nous minimiser l'énergie et par conséquent nous donner le meilleur état fondamental de notre système étudié.

Mot clé : Equation de Schrödinger, Equation de Pauli, Méthode variationnelle.

ملخص

في هذا العمل ، سعينا لفهم أصل معادلة باولي. معادلة قلبت فيزياء عام 1932 رأساً على عقب وليست سوى معادلة شرودنجر مغمورة في مجال مغناطيسي.

استخدمنا طريقة التباين للتعامل مع هذا الموضوع حيث اعتمدنا على مجموعة من وظائف الاختبار القادرة على تقليل طاقتنا وبالتالي منحنا أفضل حالة أساسية لنظامنا قيد الدراسة.

الكلمة المفتاحية: معادلة شرودنجر ، معادلة باولي ، طريقة التباين.

Abstract

In this work, we have researched to understand the origin of the Pauli equation. An equation that has turned the physics of 1932 upside down and its only that the Schrödinger equation immersed in a magnetic field.

We have used the variational approach a subject where we relied on a set of test functions able of minimizing the total energy system and therefore giving us the best ground state of it.

Key word: Schrödinger's equation, Pauli equation, Variational method.