

**TOUT EN
FICHES**

Michel Chrysos

L'ESSENTIEL DE

MÉCANIQUE QUANTIQUE

LICENCE

DUNOD

Direction artistique : Élisabeth Hébert
Conception graphique : Pierre-André Gualino
Mise en page : Lumina

Image de couverture : © peterschreiber.media – Shutterstock.com

© Dunod, 2020
11 rue Paul Bert, 92240 Malakoff
ISBN 978-2-10-081909-6
www.dunod.com

Le Code de la propriété intellectuelle n'autorisant, aux termes de l'article L. 122-5, 2° et 3° a), d'une part, que les « copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective » et, d'autre part, que les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration, « toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause est illicite » (art. L. 122-4).

Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait donc une contrefaçon sanctionnée par les articles L. 335-2 et suivants du Code de la propriété intellectuelle.

Table des matières

Avant-propos	V
Le mot de l'auteur	VI
Fiche 1. Introduction	1
Fiche 2. Principe d'indétermination	8
Fiche 3. Rudiments de physique statistique	16
Fiche 4. Éléments de mécanique analytique	24
Fiche 5. Corps noir	32
Fiche 6. Lois de Wien et de Stefan-Boltzmann	43
Fiche 7. Effet photoélectrique	51
Fiche 8. Sur l'effet Compton	59
Fiche 9. Spectre de l'atome d'hydrogène	67
Fiche 10. Premiers modèles atomiques	75
Fiche 11. Plus de dualité : atome de Bohr et au-delà	83
Fiche 12. Équation de Schrödinger	91
Fiche 13. ψ et $ \psi ^2$: interprétations	101
Fiche 14. Au-delà de l'équation de Schrödinger	109
Fiche 15. Vitesses d'une onde	117
Fiche 16. Particule dans une boîte	127
Fiche 17. Puits de hauteur finie	134

Fiche 18.	Effet tunnel	143
Fiche 19.	Notation de Dirac	151
Fiche 20.	Mécanique quantique et lois classiques	160
Fiche 21.	Paquet d'ondes gaussien et transformée de Fourier	168
Fiche 22.	Moment cinétique	176
Fiche 23.	Nombres quantiques l & m	185
Fiche 24.	Harmoniques sphériques	195
Fiche 25.	Orbitales réelles	203
Fiche 26.	Autour du centre de masse	212
Fiche 27.	Méthodes d'approximation	221
Fiche 28.	Oscillateur harmonique et au-delà	230
Fiche 29.	Atome de Schrödinger	240
Fiche 30.	Fonction radiale : applications	251
Index		259
Crédits iconographiques		265

Avant-propos

La singularité de cet ouvrage réside dans sa façon de développer dans un volume restreint l'essentiel d'une vaste matière peu commode. L'ouvrage s'adresse aux étudiants de la deuxième et de la troisième année des Licences de physique, de physique et applications ou de physique et chimie, ainsi qu'aux élèves ingénieurs et aux élèves des écoles supérieures de physique et de chimie. Avec ses trente fiches, un arsenal d'outils pédagogiques (40 exercices résolus, 60 exemples, 70 méthodes, et plus d'une centaine d'illustrations) est mobilisé et accompagne le lecteur dans son apprentissage. Partant du système d'unités atomiques et du principe d'Heisenberg, l'essentiel de la mécanique quantique est donné de manière rigoureuse et ludique. Des éléments de physique statistique, de mécanique analytique et d'autres notions qui font partie historiquement de l'époque préquantique sont abordés en amont et, en faisant le lien avec l'électromagnétisme et la physique classique, permettent à l'étudiant de se mettre le pied à l'étrier. La résolution mathématique exhaustive de l'atome d'hydrogène est l'ultime sujet étudié. Le concept de spin est abordé très succinctement. Pour compléter la lecture du livre, des approfondissements sont disponibles sur la page de l'ouvrage sur dunod.com.

Le mot de l'auteur

Si l'électromagnétisme maxwellien est l'une des plus belles matières à enseigner en Licence, la mécanique quantique est, par son sens contre-intuitif et ses surprenants succès sans cesse vérifiés dans la description de l'infiniment petit, le couronnement des théories scientifiques et l'ultime aboutissement de la théorie électromagnétique. Maîtriser ses bases, c'est maîtriser des outils mathématiques avancés et le fonctionnement de très nombreux concepts abstraits. Aboutissement d'une longue expérience dans l'enseignement supérieur et la recherche, cet ouvrage n'aurait pas vu le jour sans la confiance de mon éditrice Lætitia Hérin, les échanges avec Henri Piel, et surtout le soutien de mes proches, Annick et Eléna. Merci Eléna pour ta collaboration ô combien efficace.

À Roland Lefebvre. À ma mère.

Michel Chrysos

Angers, juillet 2020

1. Définitions et vocabulaire

Mécanique quantique Théorie fondamentale et branche majeure de la physique moderne. Elle a pour but la description mathématique de la structure de la matière et du rayonnement, et l'évolution dans l'espace et le temps des phénomènes physiques à l'échelle de l'infiniment petit (atomes, molécules, noyaux atomiques ...). Fruit intellectuel de savants notamment du XX^e siècle, elle est souvent considérée comme le plus formidable exploit de l'esprit humain. La place singulière de la mécanique quantique s'explique par l'extraordinaire et infaillible précision sans cesse vérifiée dont elle fait preuve, et par sa capacité à décrire la quasi totalité des phénomènes naturels. L'immense majorité de ces derniers survient par suite d'échanges d'énergie entre la matière et la lumière, qu'ils soient visibles ou non à l'œil humain. Or le concept d'énergie et ses échanges sont à la base même de cette théorie.

Constante de Planck Constante universelle (h, c, G), son rôle est central en mécanique quantique. Introduite par Max Planck en 1900, son symbole¹ est h et sa valeur $6,62607004 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

Diffraction Phénomène ayant lieu lorsqu'une onde rencontre un obstacle ou une fente (objet diffractant). Les extrémités de l'obstacle, tout comme le pourtour de la fente, deviennent alors des sources secondaires qui, par suite d'une interférence d'ondes émises, donnent lieu à des figures de diffraction caractéristiques de la forme de l'objet diffractant.

Interférence Phénomène consistant à superposer deux ondes pour donner naissance à une seule onde dont l'amplitude, par comparaison aux amplitudes d'origine, peut être croissante ou décroissante.

Corpuscule Très petite partie d'un corps, spatialement localisée et dotée d'un volume et d'une masse. Communément appelé **particule**, il

1. Il semblerait que l'origine du symbole soit le mot « Hilfe » (à l'aide) que Max Planck aurait prononcé en un moment de désespoir avant sa percée.

est, sur le principe, l'antithèse même d'une onde, mais la signification profonde du concept se voit bouleversée en mécanique quantique. Ainsi, le photon est bien une particule alors que sa masse au repos est nulle¹. À l'inverse, l'électron, qui est une **particule matérielle** puisqu'il possède une masse au repos $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg, semble être dépourvu de volume, ce qui ne fait que rajouter à l'incompréhension. L'avènement de la dualité onde-corpuscule rend davantage confuses certaines notions, ainsi que nous le verrons par la suite.

Dualité onde-corpuscule Principe selon lequel une onde de pulsation ω et de vecteur d'onde $\vec{k}$ peut présenter des propriétés qui sont propres aux corpuscules, à savoir, une énergie E et une quantité de mouvement $\vec{p}$ telles que² :

$$E = \hbar\omega \quad ; \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (1.1)$$

La manifestation et le degré d'apparition de ces propriétés lors d'une expérience dépendent à la fois de l'objet étudié et de l'appareillage. Ainsi, les ondes électromagnétiques ($\omega, \vec{k}$) peuvent se manifester sous forme de photons d'énergie et quantité de mouvement données par l'Éq. (1.1), une proposition révolutionnaire introduite en 1909 par Albert Einstein (voir aussi Fiches 5 & 7)³. Le principe fonctionne également dans le sens inverse, ce que l'on nomme souvent la **double dualité**, à savoir, qu'un corpuscule peut présenter des propriétés ondulatoires : $\omega = E/\hbar$; $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$. C'est ce que Louis De Broglie proposa en 1924 au sujet des électrons qui, tout en étant des particules matérielles, seraient aussi des ondes d'une nature non-électromagnétique.

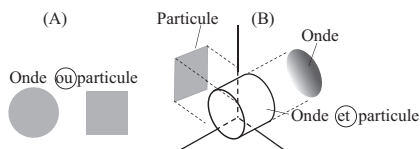
Hypothèse de De Broglie Émise par Louis De Broglie en 1924, elle affirme que toute matière est dotée d'une onde associée, ce qui peut se résumer par la phrase « tout est onde ». Aujourd'hui on sait que « tout est onde de probabilité ».

-
1. Une particule à masse nulle, tel le photon, est dite **non-matérielle**.
 2. $\hbar = \frac{h}{2\pi}$: constante de Planck réduite, nommée aussi constante de Dirac.
 3. Une illustration utile de la frise du spectre électromagnétique (EM) figure sur la page de l'ouvrage sur dunod.com.

Métaphore du cylindre : tantôt disque tantôt rectangle

Le disque et le carré schématisés ci-contre (Fig. (A)) ne diffèrent qu'en apparence. Telle l'ombre d'un cylindre, ces formes sont des facettes d'une seule et même entité plus complexe (Fig. (B)).

Il en va de même pour la mécanique quantique : elle permet de se départir de la vue caricaturale « onde ou particule » au profit de concepts unifiés inédits.



2. Unités atomiques

Système d'unités atomiques (u.a.) Système d'unités dans lequel la masse et la charge (au signe près) de l'électron, la constante de Planck réduite, et la constante de Coulomb sont toutes égales à l'unité. Dans ce système, la vitesse de la lumière dans le vide est égale à 137,036 afin que la constante de structure fine puisse conserver sa valeur universelle.

Le tableau suivant recense les principales informations.

Il est vivement souhaité que les étudiants connaissent par cœur le contenu de ce tableau, y compris ses valeurs numériques arrondies à au moins un chiffre après la virgule.

entité physique	symbole/expression	valeur en u.a.	appellation	valeur en unités ordinaires
masse de l'électron	m_e	1		$9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$
charge élémentaire	e_0	1		$1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$
constante de Planck réduite	$\hbar$	1		$1,055 \times 10^{-34} \text{ Js}$
constante de Coulomb	$1/4\pi\epsilon_0$	1		$8,988 \times 10^9 \text{ m/F}$
célérité de la lumière	c	137,036		137,036
e^2	$e_0^2/4\pi\epsilon_0$	1		pas besoin
rayon de Bohr ; u.a. de longueur	$\hbar^2/m_e e^2$	1	$a_0, r_0, r_1, \text{ Bohr}$	$0,529177 \text{ \AA}$
u.a. d'énergie	$m_e e^4/\hbar^2$	1	$E_h, \text{ Ha, Hartree}$	$27,2116 \text{ eV}$
énergie d'ionisation de H	$m_e e^4/2\hbar^2$	1/2	Ry, Rydberg	$13,6057 \text{ eV}$
constante de structure fine	$e^2/\hbar c$	$137,036^{-1}$	α	$137,036^{-1}$

Avantages et inconvénients

- Le fait d'imposer la valeur 1 à plusieurs constantes physiques dans un système d'unités permet de simplifier l'écriture mathématique et, de ce fait, de grandement augmenter la lisibilité des équations liées aux phénomènes étudiés.
- La restitution des unités normales n'est pas toujours une tâche aisée.

Principales grandeurs en unités atomiques

Les unités atomiques pour les principales grandeurs physiques sont définies à partir de l'expression de l'unité de temps en S.I.

Unité de temps Elle est définie par l'expression $\hbar/E_h$, par suite de la définition d'une action comme étant énergie $\times$ temps.

S'en suivent les unités atomiques d'autres grandeurs physiques : ① quantité de mouvement, ② vitesse, ③ force, ④ température, ⑤ pression, ⑥ champ, ⑦ potentiel et ⑧ moment dipolaire électriques. Pour ces grandeurs, les définitions s'obtiennent à l'aide des expressions affichées dans le tableau ci-après. Toutes découlent des formules familières traitées en exemples ou en exercice.

Temps	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
$\hbar/E_h$	$\hbar/a_0$	$a_0 E_h/\hbar$	E_h/a_0	E_h/k_B	E_h/a_0^3	$E_h/e_0 a_0$	E_h/e_0	$e_0 a_0$

$\textcircled{k_B} = \frac{R}{N_A}$ est la **constante de Boltzmann**¹. $\textcircled{R} = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol} \cdot \text{K}^{-1}$ est la **constante des gaz parfaits** et $\textcircled{N_A} = 6,022 \times 10^{23}$ particules/mol la **constante d'Avogadro**.

1. Le paramètre $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est très couramment utilisé dans les calculs en thermodynamique et en physique statistique pour désigner l'inverse de cette énergie célèbre.

Le contenu du tableau est obtenu à l'aide de deux méthodes :

MÉTHODE

- ① On écrit « action = quantité de mouvement $\times$ longueur ». On en déduit l'u.a. de quantité de mouvement. 1 u.a. de p vaut $\frac{1,055 \times 10^{-34}}{0,529 \times 10^{-10}} = 1,9929 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$.
- ② On écrit $p = mv$, puis on définit l'u.a. de vitesse par $\frac{\hbar}{m_e a_0}$. À l'aide des expressions $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ et $E_h = \frac{m_e e^4}{\hbar^2}$, cela peut s'écrire de trois façons :

$$\frac{\hbar}{m_e a_0} = \frac{e^2}{\hbar} = \left(\frac{a_0 E_h}{\hbar} \right) \quad (1.2)$$

La dernière est le résultat cherché.

Remarques

$\frac{e^2}{\hbar} = \alpha c$. En u.a., αc vaut $\frac{137,036}{137,036} = 1$. Dans le S.I., cela vaut $\frac{1}{137,036} \times 2,998 \times 10^8 = 2,1877 \times 10^6 \text{ m/s}$. C'est la vitesse de l'électron dans la première orbite de Bohr.

- ③ On écrit « travail = force $\times$ déplacement ». On en déduit l'u.a. de force. 1 u.a. de F vaut $\frac{27,211 \times 1,602 \times 10^{-19}}{0,529 \times 10^{-10}} = 8,237 \times 10^{-8} \text{ N}$.
- ④ On écrit l'énergie comme un produit $k_B T$. 1 u.a. de T vaut $\frac{E_h}{k_B} = \frac{27,211 \times 1,602 \times 10^{-19}}{1,38 \times 10^{-23}} = 3,1577 \times 10^5 \text{ K}$.

MÉTHODE

- ⑤ À l'aide de ③ et de l'expression « pression = force/surface ».
- ⑥ & ⑦ « Force électrostatique = $q \times \mathcal{E}$ » pour l'u.a. de $\mathcal{E}$ et « énergie électrostatique = $q \times V$ » pour l'u.a. de V .
- ⑧ À l'aide de « moment dipolaire = $q \times l$ » où q est la charge positive du dipôle et l sa longueur.

EXEMPLE. PROTON EN MOUVEMENT

Soit $p = 1$ u.a. la quantité de mouvement d'un proton. Calculons sa vitesse en m/s et u.a., puis son énergie cinétique.

D'après la définition ① $\frac{h}{a_0}$, on a $p = \frac{1,055 \times 10^{-34}}{0,529 \times 10^{-10}} = 1,9937 \times 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$ et $v = \frac{1,9937 \times 10^{-24}}{1836 \times 9,1 \times 10^{-31}} = 1192 \text{ m/s}$. S'il s'agissait d'un électron, celui-ci aurait une vitesse de 1 u.a. Or, $\frac{m_p}{m_e} = 1836$, ce qui donne pour le proton une vitesse de $\frac{1}{1836}$ u.a. S'en suit $E_c = \frac{1}{2} m_p v^2 = \frac{1}{2} \times 1836 \times \frac{1}{1836^2} = 2,7233 \times 10^{-4} \text{ Ha}$.

Mach 3 ou l'avion ultra-rapide MIG-25 qui ne l'est pas assez

Une vitesse de 1192 m/s est suffisamment faible pour justifier l'utilisation de la formule non-relativiste $p = mv$. En outre, $1192 \text{ m/s} = \underbrace{(1/1836)}_{v \text{ en u.a.}} \times \underbrace{3 \times 10^8 / 137 \text{ m/s}}_{\alpha c = 1 \text{ u.a. de } v}$.

Des pièges peuvent apparaître lors de l'utilisation des unités atomiques ainsi que le montre l'exemple ci-dessous.

EXEMPLE. U.A. ET $E = MC^2$

L'équation $E = mc^2$, une fois exprimée en unités atomiques, semble mener à une contradiction puisque $E = m = 1$ u.a. tandis que $c = 137,036$. C'est un paradoxe apparent qui se résout par une simple observation : dans le cadre de cette équation, on ne peut pas simultanément avoir $E = E_h$ et $m = m_e$, puisque, pour $c = 137,036$ et $m = m_e$, il en ressort $m_e c^2 = 18779 \text{ u.a.} \gg 1 \text{ u.a.}$ On retrouve le principe du fonctionnement des centrales nucléaires : l'énergie équivalente à une petite masse est énorme. En revanche, à l'instar de l'expression $E = \frac{1}{2} m v^2$, l'égalité « énergie = masse $\times$ vitesse² » laisse une totale liberté aux trois grandeurs et, une fois traduite en u.a., donne : $E_h = m_e (\alpha c)^2$. En u.a., ceci est une tautologie. Dans le S.I., l'égalité s'écrit $\frac{m_e c^4}{h^2} = m_e \left(\frac{c^2}{h}\right)^2$, ce qui est également vrai.

EXERCICE Restitution de constantes manquantes

La fonction radiale de l'orbitale $7f$ de l'atome H est en u.a. :

$$R(r) = \sqrt{\frac{1}{588}} \left(\frac{2}{7}\right)^{\frac{9}{2}} r^3 \left(1 - \frac{3}{28}r + \frac{1}{294}r^2 - \frac{1}{30870}r^3\right) e^{-\zeta} \quad (1.3)$$

L'exprimer en unités S.I. sachant que $\int_0^\infty R^2 r^2 dr = 1$.

Solution

On y remplace r par $\frac{r}{a_0}$ pour garantir l'homogénéité des termes polynomiaux et des exposants, sans oublier que le résultat doit acquérir une dimension de « longueur^{-3/2} » pour satisfaire la condition de normalisation :

$$\sqrt{\frac{1}{588}} \left(\frac{2}{7a_0} \right)^{\frac{9}{2}} r^3 \left[1 - \frac{3}{28} \left(\frac{r}{a_0} \right) + \frac{1}{294} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 - \frac{1}{30870} \left(\frac{r}{a_0} \right)^3 \right] e^{-\frac{r}{7a_0}}$$

EXERCICE Moment et champ magnétiques : de S.I. à u.a.

Justifier les expressions pour l'u.a. des grandeurs suivantes :

1. intensité de courant électrique : $\frac{e_0 E_h}{\hbar}$; 2. moment magnétique : $\frac{e_0 \hbar}{m_e}$;
3. champ magnétique : $\frac{\hbar}{e_0 a_0^2}$.

Solution

1. $i = dq/dt$. S'en suit l'u.a. de i : $\frac{e_0}{\hbar/E_h} = \frac{e_0 E_h}{\hbar}$.
2. $\vec{\mathcal{M}} = i\vec{S}$, où i est l'intensité de courant dans une boucle et $\vec{S}$ la surface de la boucle. S'en suit l'u.a. de $\mathcal{M}$:

$$\frac{e_0 E_h a_0^2}{\hbar} = \frac{e_0 \hbar}{m_e} \quad (1.4)$$

où on a utilisé les définitions $E_h = \frac{m_e e^4}{\hbar^2}$ et $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$.

Magnéton de Bohr et u.a. de moment

L'Éq. (1.4) correspond au double d'une célèbre quantité : le magnéton de Bohr défini par $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e}$.

3. L'expression $B = \mathcal{E}/c$, pour une onde plane, donne pour l'u.a. de B la valeur de $2,35 \times 10^5$ T et les expressions :

$$\frac{E_h/(e_0 a_0)}{\alpha c} = \frac{m_e e^2}{\hbar e_0 a_0} = \frac{\hbar}{e_0 a_0^2} \quad (1.5)$$