

Michel Chrysos

TOUT EN FICHES

EXERCICES ET MÉTHODES DE

MÉCANIQUE QUANTIQUE

DUNOD

© Dunod, 2022

11, rue Paul Bert, 92240 Malakoff

www.dunod.com

ISBN 978-2-10-084702-0

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.

Και ξαφνικά πλημμύρισε κενό το πατρικό μας σπίτι.

Προσευχή στην ιερή της μνήμη.

Table des matières

Avant-propos	ix
1 Éléments de physique statistique	1
Fiche 1 Optimisation contrainte	1
Fiche 2 Définitions générales et vocabulaire.....	2
Fiche 3 Micro-état et macro-état.....	2
Fiche 4 Approximations, erreurs, et le bienfait du logarithme....	3
Fiche 5 Approximation de Stirling.....	4
Fiche 6 Principaux concepts	4
Fiche 7 Statistiques : définitions et analyse.....	5
QCM.....	7
Vrai ou faux ?.....	10
Exercices.....	12
2 Les prémices d'une révolution	21
Fiche 1 Corps noir : formules de base et vocabulaire	21
Fiche 2 Survol historique	22
Fiche 3 Densité spectrale et loi de Planck-Einstein	24
Fiche 4 Loi de Wien.....	24
Fiche 5 Intensité $\mathcal{I}$ et loi de Stefan-Boltzmann.....	25
Fiche 6 Effet photoélectrique	25
Fiche 7 Effet Compton	27
Fiche 8 Traitement dans un cadre relativiste	28
QCM.....	29
Vrai ou faux ?.....	32
Exercices.....	34
3 Spectre de H : modèles atomiques	47
Fiche 1 Raies visibles de H.....	47
Fiche 2 Généralisation de la formule de Balmer	49
Fiche 3 Atome de Thomson.....	50
Fiche 4 Atome de Rutherford.....	50
Fiche 5 Atome de Bohr et hypothèses de Bohr	51
Fiche 6 Atome de Bohr et spectre de H	51
Fiche 7 Atome de Bohr et dualité.....	53
Fiche 8 Atome de Sommerfeld-Wilson.....	54

	QCM.....	55
	Vrai ou faux ?.....	59
	Exercices.....	61
4	Équation de Schrödinger.....	73
	Fiche 1 Principe de dualité.....	73
	Fiche 2 Principe d'indétermination.....	74
	Fiche 3 Ondes de matière et fonctions d'onde.....	74
	Fiche 4 Équation de Schrödinger.....	75
	Fiche 5 Grandeurs classiques et opérateurs quantiques.....	76
	Fiche 6 ψ et $ \psi ^2$: interprétations.....	77
	Fiche 7 Au-delà de l'équation de Schrödinger.....	78
	QCM.....	80
	Vrai ou faux ?.....	83
	Exercices.....	85
5	Puits et barrières de potentiel.....	97
	Fiche 1 Puits de potentiel infini.....	97
	Fiche 2 Dégénérescences par symétrie et accidentelle.....	99
	Fiche 3 Au-delà du puits infini.....	100
	Fiche 4 Effet tunnel.....	101
	Fiche 5 Barrière de potentiel de forme quelconque.....	103
	Fiche 6 Transformations et invariances de jauge.....	104
	QCM.....	106
	Vrai ou faux ?.....	109
	Exercices.....	111
6	Formalisme de Dirac : vecteurs d'état, observables, mesures.....	121
	Fiche 1 Notation de Dirac.....	121
	Fiche 2 Opérateurs linéaires.....	123
	Fiche 3 Opérateurs hermitiens et observables.....	124
	Fiche 4 Opérateur appliqué sur un état quantique.....	124
	Fiche 5 Analyse d'une fonction en ondes planes.....	125
	Fiche 6 Amplitudes et fonctions d'onde : TF.....	126
	Fiche 7 Calcul de $\psi(x,t)$	127
	Fiche 8 Mesure quantique.....	128
	QCM.....	129
	Vrai ou faux ?.....	132
	Exercices.....	134
7	Moment cinétique.....	147
	Fiche 1 Moment cinétique.....	147
	Fiche 2 L_x, L_y, L_z , et $L_{\pm}$ en coordonnées sphériques.....	148
	Fiche 3 Opérateur $\vec{L}^2$	148
	Fiche 4 Nombres quantiques l, m	148
	Fiche 5 L_+, L_- , et échelle $ l, m\rangle$: socle mathématique.....	150
	Fiche 6 Nombres quantiques secondaire et tertiaire.....	150

	Fiche 7	Au-delà d'une particule ou d'un moment $\vec{L}$	151
		QCM.....	153
		Vrai ou faux ?.....	157
		Exercices.....	159
8		Harmoniques sphériques : introduction aux orbitales	167
	Fiche 1	Fonctions harmoniques et harmoniques sphériques.....	167
	Fiche 2	Calcul des harmoniques sphériques.....	168
	Fiche 3	Propriétés d'une harmonique sphérique.....	168
	Fiche 4	Illustrations graphiques.....	169
	Fiche 5	Cercles d'annulation.....	170
	Fiche 6	Orbitales atomiques.....	170
	Fiche 7	Notation utilisée pour désigner une OA.....	170
	Fiche 8	Orbitales moléculaires.....	172
		QCM.....	173
		Vrai ou faux ?.....	177
		Exercices.....	179
9		Molécules simples et leurs spectres	189
	Fiche 1	Centre de masse et masse réduite.....	189
	Fiche 2	Rotation d'une molécule diatomique AB	191
	Fiche 3	Spectroscopie d'absorption.....	192
	Fiche 4	Techniques d'approximation.....	192
	Fiche 5	Oscillateur harmonique.....	193
	Fiche 6	$A, A^\dagger, N$: socle mathématique.....	194
	Fiche 7	Éléments de matrice.....	194
	Fiche 8	Oscillateur anharmonique.....	195
		QCM.....	197
		Vrai ou faux ?.....	200
		Exercices.....	202
10		Atome de Schrödinger	215
	Fiche 1	Vocabulaire et principaux concepts.....	215
	Fiche 2	Séparation du degré de liberté radial.....	216
	Fiche 3	Équations à coefficients variables : méthodologie.....	216
	Fiche 4	Résolution de l'équation radiale : feuille de route.....	218
	Fiche 5	Développement en série de Frobenius.....	219
	Fiche 6	Fonction d'onde radiale : formules compactes.....	221
	Fiche 7	Illustrations.....	222
	Fiche 8	Ions hydrogénoïdes.....	222
		QCM.....	223
		Vrai ou faux ?.....	226
		Exercices.....	228
		Constantes, unités atomiques, conversions	238
		Index	239

Avant-propos

À la fois déroutante au premier abord et fascinante, la mécanique quantique ne laisse personne indifférent. Redoutée pour certains, confondant avec l'absurde ou avec le non-sens pour d'autres, incompréhensible ou tout simplement merveilleusement compliquée, cette discipline est au cœur de la science moderne et a su s'imposer au fil des décennies pour faire partie intégrante du paysage universitaire. Défiant constamment l'intuition, cette théorie fait des prédictions sans cesse vérifiées qui offrent la quasi-preuve de sa déconcertante exactitude, et d'une ingéniosité sans commune mesure des grands esprits qui l'ont conçue, ou qui font bouger ses lignes. L'ouvrage que je propose se veut adapté à un public de physiciens de niveau licence. À la fois complet et pédagogique, il est prêt à l'utilisation en enseignement supérieur, éventuellement dispensé de manière compartimentée en une série de trois ou quatre modules de cours, d'une vingtaine d'heures par module environ, à commencer par la L2 et à surtout approfondir au cours de la L3, semestres 5 et 6. Certains de ses concepts sont parfois abordés en Master. Au cours des dix chapitres de l'ouvrage, 75 fiches permettent au lecteur de prendre immédiatement connaissance des définitions et principales notions et formules. Des questionnaires à choix multiples (QCM) sont soigneusement préparés et corrigés au sein de chaque chapitre en vue d'une auto-évaluation pertinente. Quatre options, A à D, sont proposées pour chaque question, qui très souvent admet plus d'une bonne réponse. À la suite de chaque QCM, une série de questions « vrai/faux » est mise à disposition. Puis, à raison de plus d'une douzaine d'exercices par chapitre, 130 exercices minutieusement corrigés qui, en parcourant un large éventail de concepts (allant du formalisme quantique à la physique atomique, moléculaire, nucléaire, ou encore à la chimie ou la spectroscopie), permettent au lecteur un entraînement optimal. Tout au long de l'ouvrage, le logiciel de calcul formel et graphique MAPLE a été abondamment utilisé. Cet ouvrage trouvera sa place sur le bureau de tout étudiant (ou enseignant) universitaire de physique, fondamentale ou appliquée, licence des sciences physiques, licence de physique et applications, chimie théorique. Les élèves ingénieurs, les élèves des classes préparatoires, les candidats au CAPES et à l'agrégation en sont également des publics privilégiés. Au cœur de la mécanique quantique se trouve un formalisme mathématique inhabituel ardu. Ses outils forment un arsenal que le lecteur, pris par la main dès le premier chapitre, sera amené à maîtriser. À l'aide d'une série d'exemples, de méthodes, et de conseils méthodologiques, développés tout au long de l'ouvrage, le lecteur s'y habituera progressivement et aura même l'impression de jouer un rôle fondateur dans l'établissement des concepts qui sont abordés. Rendre physicien aguerri un nouvel arrivant est ma plus grande ambition. J'ai la ferme conviction que les clés pour atteindre ce but se trouvent dans les pages de ce livre et n'attendent que le lecteur motivé pour être saisies.

Michel Chrysos

Éléments de physique statistique

1

MOTS-CLÉS

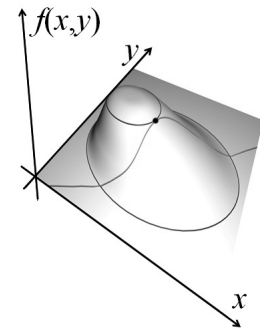
États, micro-états, macro-états, dégénérescence, approximation de Stirling, statistiques, statistique de Maxwell-Boltzmann, statistique de Bose-Einstein, statistique de Fermi-Dirac, optimisation contrainte, lagrangien, multiplicateurs de Lagrange.

Le but est de se familiariser avec des concepts de base de physique statistique. Ceux-ci forment le socle des observations quantiques puisqu'ils permettent de comprendre comment un grand nombre de particules, qu'elles soient matérielles ($m \neq 0$; électrons, atomes...) ou non ($m = 0$; photons...), peuplent les niveaux quantiques d'un système physique.

Fiche 1

Optimisation contrainte

Puissante méthode d'analyse mathématique, elle permet d'optimiser (extrémiser, soit minimiser ou maximiser) une fonction en présence de contraintes. La fonction doit être dérivable et peut être à plusieurs variables. À l'aide de paramètres $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ nommés les **multiplicateurs de Lagrange**, le problème d'optimisation d'une fonction à n dimensions $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ soumise à m contraintes est transformé en un simple problème d'optimisation d'une fonction L dépourvu de contraintes. La fonction L , souvent appelée le **lagrangien**, est une fonction à $n + m$ dimensions. La nappe illustrée ci-contre représente une fonction $f(x, y)$ soumise à une contrainte $g(x, y) = 0$. La courbe en forme de cloche représente la contrainte. Son intersection avec la nappe indique le maximum de $f(x, y)$ sous contrainte.



Définition 1.1 Lagrangien. Le lagrangien dans un problème quelconque, puis celui du problème évoqué en dernier ci-dessus, sont définis par :

$$L(x_1, x_2, \dots, x_n; \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) - \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1.1)$$

$$L(x, y; \lambda) = f(x, y) - \lambda g(x, y) \quad (1.2)$$



Conseil méthodologique On calcule $\frac{\partial L}{\partial x}$, $\frac{\partial L}{\partial y}$, et $\frac{\partial L}{\partial \lambda}$. Puis, on résout le système $\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial y} = \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$ pour enfin déterminer la solution $(x_0, y_0; \lambda_0)$. Le point (x_0, y_0) est l'extrémum cherché. Sa nature (maximum, minimum) nécessite un recours aux dérivées secondes. Cette partie ne sera pas abordée.

Exercice Optimisation contrainte d'une fonction à deux variables. Déterminer les extrémums de la fonction $f(x, y) = x^2 + y^2 - 4xy$ soumise à la contrainte $x^2 + y^2 = 8$.

Solution

$$L(x, y; \lambda) = x^2 + y^2 - 4xy - \lambda(8 - x^2 - y^2) \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 2x - 4y + 2\lambda x = 0 \quad ; \quad \frac{\partial L}{\partial y} = 2y - 4x + 2\lambda y = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = x^2 + y^2 - 8 = 0 \Rightarrow x^2 + y^2 = 8 \quad (1.5)$$

Si x est nul, y l'est aussi (Éq. (1.4 a)). Si y est nul, x l'est aussi (Éq. (1.4 b)). Or $x \neq 0$ et $y \neq 0$ ($x = y = 0$ est exclue par l'Éq. (1.5)). Divisons l'expression $2y = x + \lambda x$ issue de l'Éq. (1.4 a) par x et l'expression issue de l'Éq. (1.4 b) par y . Il vient :

$$\frac{y}{x} = \frac{x}{y} = \frac{1 + \lambda}{2} \Rightarrow x = \begin{cases} y \Rightarrow \lambda = 1 \\ \text{ou} \\ -y \Rightarrow \lambda = -3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x = \pm 2 & \text{et } y = \pm 2 \\ \text{ou} \\ x = \pm 2 & \text{et } y = \mp 2 \end{cases} \quad (1.6)$$

Les extrémums de $f(x, y)$ sont $(x_0, y_0) = (\pm 2, \pm 2), (\pm 2, \mp 2)$. Les points $(\pm 2, \pm 2)$ correspondent à $\lambda = 1$, tandis que $(\pm 2, \mp 2)$ à $\lambda = -3$. Une étude plus poussée, basée sur le calcul des dérivées secondes, montre que $(\pm 2, \pm 2)$ sont des minimums ; $(\pm 2, \mp 2)$ sont des maximums. On ne s'attardera pas sur cette analyse.

Fiche 2

Définitions générales et vocabulaire

Définition 1.2 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, la mécanique quantique est souvent considérée comme le plus formidable exploit de l'esprit humain. La place singulière qu'elle occupe 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.

Définition 1.3 Constante de Planck. Constante universelle $h = 6,626\,070\,04 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Introduite par Max Planck en 1900, son rôle est central en mécanique quantique.

Fiche 3

Micro-état et macro-état

Définition 1.4 Micro-état. Il désigne chacune des configurations microscopiques spécifiques qu'un système thermodynamique peut occuper au cours de ses fluctuations.