

SCIENCES SUP

*Cours et exercices corrigés*

Master • Écoles d'ingénieurs

# MÉCANIQUE QUANTIQUE

Atomes et noyaux  
Applications technologiques

3<sup>e</sup> édition

*Jean Hladik  
Michel Chryso  
Pierre-Emmanuel Hladik  
Lorenzo Ugo Ancarani*

530-40.1

DUNOD

# Table des matières

<b>AVANT-PROPOS</b>	IX
<b>CHAPITRE 1 • SOURCES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE</b>	I
1.1 Fonction d'onde	I
1.2 Contenu physique des fonctions d'onde	7
1.3 Particule dans un état stationnaire	12
1.4 Effet tunnel	16
<b>EXERCICES</b>	19
<b>CHAPITRE 2 • OPÉRATEURS LINÉAIRES</b>	27
2.1 Types d'opérateurs linéaires	27
2.2 Vecteurs et valeurs propres	34
2.3 Matrice d'un opérateur	37
2.4 Espaces de Hilbert	42
<b>EXERCICES</b>	46
<b>CHAPITRE 3 • FORMALISME DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE</b>	51
3.1 Réalisations des fonctions d'onde	51
3.2 Espace des états quantiques	55

3.3	Système complet d'observables qui commutent	63
3.4	Postulats de la mécanique quantique	66
3.5	Propriétés des observables	71
	EXERCICES	75
	<b>CHAPITRE 4 • OSCILLATEUR HARMONIQUE</b>	79
4.1	Approximation harmonique	79
4.2	Niveaux d'énergie	81
4.3	Vecteurs d'état	85
4.4	Fonction d'onde	86
4.5	Système de deux particules en interaction	88
4.6	Vibrations d'une molécule diatomique	90
	EXERCICES	94
	<b>CHAPITRE 5 • LES GROUPES ET LEURS REPRÉSENTATIONS</b>	103
5.1	Définition d'un groupe	103
5.2	Représentation d'un groupe	106
5.3	Représentation en mécanique quantique	111
5.4	Groupe des rotations dans un plan	113
5.5	Groupe des rotations spatiales	117
	EXERCICES	121
	<b>CHAPITRE 6 • MOMENT CINÉTIQUE</b>	128
6.1	Moment cinétique orbital	128
6.2	Opérateurs de moment cinétique	131
6.3	Fonctions propres du moment cinétique orbital	139
6.4	Rotation d'une molécule diatomique	141
6.5	Composition des moments cinétiques	144
	EXERCICES	148
	<b>CHAPITRE 7 • ATOME D'HYDROGÈNE</b>	163
7.1	Historique	163
7.2	Champ central symétrique	165

7.3 Étude en coordonnées sphériques	168
7.4 Étude en coordonnées paraboliques	177
<b>EXERCICES</b>	179
<b>CHAPITRE 8 • MÉTHODES D'APPROXIMATION</b>	185
8.1 Perturbations indépendantes du temps	185
8.2 Méthode des variations	190
<b>EXERCICES</b>	192
<b>CHAPITRE 9 • SPINEURS</b>	203
9.1 Groupe $SU(2)$	203
9.2 Matrices de rotation	206
9.3 Les spineurs de l'espace tridimensionnel	208
9.4 Représentation spinorielle de $SO(3)$	211
<b>EXERCICES</b>	214
<b>CHAPITRE 10 • SPIN</b>	220
10.1 Mise en évidence expérimentale	220
10.2 Spin de l'électron	224
10.3 Spin des particules quantiques	232
10.4 Équation de Pauli	237
<b>EXERCICES</b>	242
<b>CHAPITRE 11 • STRUCTURE FINE DE L'ATOME D'HYDROGÈNE</b>	253
11.1 Équation de Dirac	254
11.2 Structure fine du niveau $n = 2$	260
11.3 Structure fine des niveaux d'énergie	263
11.4 Structure des transitions	265
11.5 Effet Stark	266
<b>EXERCICES</b>	268
<b>CHAPITRE 12 • IDENTITÉ DES PARTICULES</b>	274
12.1 Particules indiscernables	274

12.2	Construction des vecteurs d'états physiques	279
12.3	Atome d'hélium	282
	EXERCICES	287
	<b>CHAPITRE 13 • ATOMES</b>	291
13.1	Approximation du champ central	291
13.2	Structure fine des niveaux d'énergie : couplage $l - s$	296
13.3	Détermination des termes spectraux	300
13.4	Structure fine des niveaux d'énergie : couplage $j - j$	304
	EXERCICES	305
	<b>CHAPITRE 14 • ATOME D'HÉLIUM</b>	313
14.1	Hamiltonien, spectre et énergies	314
14.2	Propriétés de l'hamiltonien	317
14.3	Approximation d'Hartree-Fock	323
14.4	État fondamental	327
14.5	États excités	335
14.6	Comparaison avec l'expérience	337
14.7	Propriétés et applications	338
	EXERCICES	341
	<b>CHAPITRE 15 • TRANSITION SOUS L'ACTION D'UNE PERTURBATION</b>	351
15.1	Perturbation dépendant du temps	351
15.2	Perturbation sinusoïdale	355
15.3	Transitions dipolaires électriques d'un atome	360
15.4	Masers et lasers	365
	EXERCICES	369
	<b>CHAPITRE 16 • NOYAU ATOMIQUE ET STRUCTURE HYPERFINE DES NIVEAUX ÉLECTRONIQUES</b>	377
16.1	Caractéristiques du noyau atomique	377
16.2	Modèle en couches	381
16.3	Structure hyperfine des niveaux atomiques	386
	EXERCICES	396

<b>CHAPITRE 17 • ACTION D'UN CHAMP MAGNÉTIQUE</b>	402
17.1 Énergie de couplage	402
17.2 Effet Zeeman de structure fine de l'atome d'hydrogène	405
17.3 Effet Zeeman de structure hyperfine de l'atome d'hydrogène	411
17.4 Résonance magnétique	415
<b>EXERCICES</b>	419
<b>ANNEXE A • UNITÉS ET CONSTANTES PHYSIQUES</b>	424
A.1 Notation	424
A.2 Unités en dehors du Système International	424
A.3 Constantes physiques fondamentales	425
A.4 Constantes utilisées	426
<b>ANNEXE B • COMPLÈMENTS MATHÉMATIQUES</b>	427
B.1 Polynômes d'Hermite	427
B.2 Polynômes de Laguerre	429
B.3 Fonctions de Legendre associées	431
B.4 Harmoniques sphériques	433
B.5 Fonctions hypergéométriques	436
<b>BIBLIOGRAPHIE</b>	439
<b>INDEX</b>	441

## Avant-propos

La mécanique quantique constitue la base de toutes les disciplines fondamentales de la physique et de la chimie contemporaines. C'est donc une formation scientifique générale qui sera ensuite utilisée dans tous les secteurs de la physique fondamentale mais également lors de l'étude de technologies récentes. Ainsi tous les programmes des licences et masters de physique et de chimie comportent un enseignement de mécanique quantique. Étant une culture scientifique de base, la mécanique quantique est d'ailleurs introduite dès le premier cycle des études supérieures.

La matière à enseigner est très vaste et il faut faire nécessairement des choix pour rester dans les limites imposées par le nombre d'heures des programmes d'enseignement en un nombre de pages « raisonnable ». Nous avons donc résumé le contenu essentiel d'un cours sans entrer dans le détail d'exemples qui peuvent être développés au cours de travaux pratiques.

Examinons quelques aspects pédagogiques de cet enseignement. Sans doute est-il indispensable d'introduire rapidement la notion de vecteur d'état et la notation de Dirac puisque c'est un langage pratique et classique. Mais il ne faut pas oublier que, pour le débutant, cette notion abstraite, pour être bien assimilée, doit découler naturellement de la notion de fonction d'onde. Celle-ci comporte en effet un aspect plus familier en tant que solution d'une équation d'onde et c'est son expression explicite qui, finalement, concrétise la solution d'un problème.

De même la notion de spineur paraît être un préalable à l'introduction d'un vecteur d'état représentant le concept de spin. La seule utilisation du symbolisme abstrait de Dirac, pour la représentation du spin, est insuffisante pour une bonne compréhension de ce phénomène car ainsi certaines propriétés du spin n'apparaissent pas clairement en liaison avec les rotations dans l'espace tridimensionnel.

L'introduction de la théorie des groupes, de manière structurée ainsi que nous l'avons faite, est également indispensable. Souvent il est fait allusion à la théorie des groupes dans certains chapitres des ouvrages de mécanique quantique. C'est le cas, par exemple, à l'occasion des translations, des rotations, des permutations, mais ces allusions sont faites sans intégration dans la logique générale de l'exposé.

Or les principes d'invariance et de symétrie se révèlent primordiaux en mécanique quantique et ils sont bien mis en valeur par la théorie des groupes. D'autre part, lorsqu'il faut trouver un équilibre entre la présentation des idées fondamentales de la théorie quantique et la machinerie mathématique qu'elle nécessite, la théorie des groupes vient précisément simplifier l'exposé. Les groupes révèlent les fondements d'une théorie tout en utilisant un formalisme qui permet d'obtenir des résultats importants avec un arsenal restreint de calculs.

Nous avons utilisé le formalisme de la théorie des groupes de Lie pour l'étude du moment cinétique et des spineurs ainsi que les représentations irréductibles de ces groupes. Si la théorie des groupes de Lie est difficile et n'est généralement pas connue des étudiants en master de physique, il est cependant possible d'en donner quelques aperçus et de les utiliser pour nos besoins. En se limitant aux groupes linéaires les plus classiques et en utilisant leurs représentations sous la forme matricielle, on obtient aisément des données suffisantes pour un cours de mécanique quantique de master.

L'utilisation de la théorie des groupes dès le début de l'enseignement de la mécanique quantique est une excellente introduction à ses développements ultérieurs dans divers domaines tels que la physique du solide, la spectroscopie moléculaire, la cristallographie, la chimie théorique, etc. Mais ce sont surtout dans les prolongements de la mécanique quantique à l'univers des particules fondamentales que la théorie des groupes apparaît comme un instrument de travail essentiel.

Ainsi l'étude des représentations du groupe  $SU(3)$  conduisit à la classification des hadrons en multiplets bien définis. Les particules qui ne semblaient obéir à aucune règle furent alors comprises comme des réalisations des représentations de  $SU(3)$ , ce qui permit la prévision de la particule  $\Omega^-$  avant sa découverte expérimentale. Les modèles quantiques à trois ou quatre quarks correspondent à des représentations des groupes  $SU(3)$  et  $SU(4)$ .

Le titre de la première édition de cet ouvrage était : *Mécanique quantique. Atomes et molécules*. Dans la deuxième édition, nous avons ajouté des *Applications technologiques*, afin de montrer que la mécanique quantique est à la base de la conception et de la mise en œuvre de nombreux systèmes inventés seulement depuis quelques décennies. Certaines technologies sont d'une utilisation courante en recherche fondamentale ou appliquée. C'est le cas, par exemple, de la microscopie électronique ainsi que de celle à effet tunnel. D'autres sont devenues si courantes, comme les lasers, que chacun en use sans même savoir qu'il s'en sert. Celui qui a recours au GPS se doute-t-il qu'une horloge atomique est intégrée dans le système qui lui permet de se positionner avec une si grande précision ? Nombre de techniques médicales sont dérivées de la maîtrise des propriétés des atomes et des molécules acquise grâce à

la mécanique quantique. Ainsi celle-ci s'est immiscée dans notre vie quotidienne au cours du dernier demi-siècle. Sans doute certains étudiants ou autres lecteurs seront-ils plus motivés pour l'étude de la mécanique quantique s'ils prennent conscience que cette théorie n'est plus seulement abstraite mais permet de mieux maîtriser l'infiniment petit pour le mettre au service de l'homme.

Dans cette troisième édition, nous n'avons pas repris le chapitre de l'ouvrage original consacré aux molécules qui fait partie traditionnellement de l'enseignement de la chimie quantique.

Par contre, un nouveau chapitre vient compléter la partie du cours réservée aux atomes, en donnant une étude détaillée de l'atome d'hélium qui joue un rôle très important en mécanique quantique. C'est une étude approfondie des travaux théoriques effectués sur les atomes de type héliumoïde, et dont les difficultés sont d'un niveau élevé. Ce texte original est une synthèse qui faisait défaut dans l'enseignement classique.

De plus, le titre de cette troisième édition met l'accent sur les noyaux atomiques. Un chapitre est consacré au modèle en couches du noyau et à son influence sur la structure hyperfine des niveaux électroniques; un tel chapitre est rarement présent dans les ouvrages d'enseignement traitant des bases de la mécanique quantique.

Le succès rencontré par les première et deuxième éditions de ce cours montre qu'il répond bien aux besoins d'un enseignement de physique de niveau universitaire. Rédigé de façon suffisamment concise, cet ouvrage permet en effet aux étudiants de retrouver l'essentiel de la mécanique quantique enseignée en master de physique.

Rappelons que deux des auteurs<sup>1</sup> ont rédigé une *Introduction à la mécanique quantique* pour les débutants dans cette matière. Une étude préalable de ce texte est évidemment recommandée avant d'aborder le présent ouvrage.

Ainsi revue, corrigée, complétée et améliorée, nous espérons que cette troisième édition constituera un complément et une aide efficace pour l'enseignement de la mécanique quantique.

J. Hladik, M. Chrysos, P.-E. Hladik et L. U. Ancarani

1. J. HLAĐEK et M. CHRYSOS, *Introduction à la mécanique quantique. Cours et exercices corrigés*, Dunod (2000).