



CLAUDE ASLANGUL

Mécanique quantique 2

4^e
édition

Développements et
applications à basse énergie

MASTER DE PHYSIQUE

- Cours
- Applications fondamentales
- Exercices et problèmes

deboeck **B**
SUPÉRIEUR

Table des Matières

III Développements	721
17 Symétrie et lois de conservation	723
17.1 Le principe euclidien de relativité et le rôle de la symétrie en physique	723
17.2 Opérateurs unitaires, opérateurs antiunitaires	733
17.3 Symétrie spatiale continue : translations et rotations	735
17.3.1 Translations	736
17.3.2 Rotations	748
17.4 Invariance de jauge	755
17.5 Symétries discrètes	762
17.6 Symétrie et dégénérescence	770
17.7 Invariance \mathcal{PT}	772
17.8 Exercices et problèmes	774
17.8.1 Produits scalaire et vectoriel de deux opérateurs vectoriels	774
17.8.2 Invariance de $[q, p] = i\hbar\mathbf{1}$ par symétrie miroir	774
17.8.3 Opérateur de translation	774
17.8.4 Transformation de Galilée	775
17.8.5 Invariance de Galilée de l'équation de Schrödinger	775
17.8.6 Particule sur réseau unidimensionnel	776

17.8.7	Particule sur réseau : une autre approche	778
17.8.8	Renversement du temps	779
17.8.9	Dynamique d'un électron dans une cage atomique	779
17.8.10	Groupe des rotations planes	781
17.8.11	Dilatations	782
17.8.12	Symétrie par rotation autour d'un axe	784
17.8.13	Un exemple à propos de l'invariance \mathcal{PT}	785
18	Théorie du moment cinétique	787
18.1	Importance du moment cinétique	787
18.2	Propriétés générales des valeurs et vecteurs propres d'un moment cinétique	792
18.3	États propres du moment cinétique orbital	797
18.4	Cas particuliers des moments cinétiques $j = \frac{1}{2}$ et $j = 1$	813
18.5	Addition de deux moments cinétiques. Coefficients de Clebsch-Gordan	819
18.5.1	Comment apparaît la somme des moments cinétiques	819
18.5.2	Somme de deux moments cinétiques	822
18.5.3	Propriétés des coefficients de Clebsch-Gordan. Principes de leur méthode de calcul	829
18.6	Théorème de Wigner-Eckart. Règles de sélection	832
18.7	Exercices et problèmes	839
18.7.1	Le vecteur \vec{L} en coordonnées sphériques	839
18.7.2	Quantification d'une variable angulaire	839
18.7.3	Complétude des fonctions propres $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$ de L_z . Condition de Vitali	841
18.7.4	Quelques résultats à propos d'un moment cinétique	841
18.7.5	Mesures du spin sur une paire intriquée	842
18.7.6	Moment cinétique $j = \frac{1}{2}$	843

18.7.7	Collision de deux spins discernables $J = 1$	843
18.7.8	Calcul de $\langle j1j0 jj \rangle$ et démonstration de $\langle j100 j0 \rangle = 0$	844
18.7.9	Le théorème de Wigner-Eckart pour les opérateurs vectoriels . . .	845
18.7.10	Addition de deux moments cinétiques	846
18.7.11	Moment cinétique total de N spins $\frac{1}{2}$	846
18.7.12	Oscillateur harmonique à deux dimensions	847
18.7.13	Matrices de Pauli et vecteur polarisation	848
18.7.14	Dynamique d'un système à deux niveaux. Oscillation de Rabi . .	849
18.7.15	Étude et mesure d'un spin $J = 1$	850
18.7.16	À propos des polynômes de Legendre	852
19	Potentiel central et atome d'hydrogène	853
19.1	Définition du champ central et exemples	853
19.1.1	Hamiltonien du problème central	855
19.1.2	Comportements de la fonction radiale	867
19.1.3	La particule libre	870
19.1.4	Puits "carré" sphérique	876
19.2	Atome d'hydrogène	885
19.2.1	Résolution de l'équation radiale	886
19.2.2	Analyse des états propres	896
19.2.3	Symétrie dynamique du potentiel coulombien	910
19.3	Exercices et problèmes	919
19.3.1	Démonstration de l'égalité (II-19.26)	919
19.3.2	Champ central dans le plan	919
19.3.3	Difficultés du puits δ en dimension $D = 2$	920
19.3.4	La coquille de Dirac	921

19.3.5	Puits “carré” circulaire et limite δ	921
19.3.6	Particule libre en coordonnées sphériques dans \mathbb{R}^3	922
19.3.7	Puits sphérique infini dans \mathbb{R}^3	922
19.3.8	Piège profond en phase solide	923
19.3.9	Désintégration du tritium	924
19.3.10	États liés sphériques du deutéron	925
19.3.11	Oscillateur harmonique à trois dimensions	925
19.3.12	Sur l’atome d’hydrogène	926
19.3.13	Une curieuse correspondance entre l’atome d’hydrogène et un oscillateur harmonique... qui n’existe pas	928
19.3.14	Compléments sur les fonctions radiales hydrogénoïdes	929
19.3.15	Méthode de Laplace et fonction hypergéométrique	931
19.3.16	À propos du vecteur de Lenz-Runge	932
19.3.17	Écart à l’interaction de Coulomb : écrantage en loi-puissance. Suppression de la dégénérescence accidentelle	933
19.3.18	Un potentiel très (trop ?) attractif	933
20	Le spin	935
20.1	Insuffisances de la description par une seule fonction d’onde	935
20.2	Magnétisme atomique : l’atome d’hydrogène	949
20.3	Rotation d’un spin	953
20.4	Retour sur le renversement du temps	957
20.5	Équation de Dirac	962
20.5.1	Émergence du spin dans un cadre relativiste	962
20.5.2	Construction de l’équation de Dirac	964
20.5.3	États stationnaires d’un électron libre	974
20.6	Champ central et atome d’hydrogène en théorie de Dirac	981

20.7	Limite faiblement relativiste et Hamiltonien de Pauli	989
20.8	Exercices et problèmes	993
20.8.1	Constantes du mouvement en théorie de Dirac	993
20.8.2	Homomorphisme $SU(2) \rightarrow SO(3)$	993
20.8.3	Harmoniques sphériques spinorielles	995
20.8.4	Limite faiblement relativiste de la densité et du courant	995
20.8.5	Correction de Darwin	995
20.8.6	Ordres de grandeur des corrections relativistes	996
20.8.7	Mesure de l'anomalie magnétique de l'électron	997
20.8.8	Transformation de Foldy-Wouthuysen	999
20.8.9	Zitterbewegung	1000
20.8.10	Puits carré en théorie de Dirac	1001
20.8.11	Paquet d'ondes gaussien de Dirac	1003
21	Illustration des postulats de la Mécanique quantique	1005
21.1	L'effet Zénon quantique	1005
21.2	Sauts quantiques	1024
21.3	Cryptographie quantique	1040
21.3.1	Principes de la détection infaillible d'une écoute indésirable	1041
21.3.2	Exemples	1042
21.3.3	Communication de la clé secrète entre Alice et Bob	1047
21.4	Décohérence	1052
21.5	Intrication	1064
21.6	Exercices et problèmes	1069
21.6.1	Traitement phénoménologique d'un atome à trois niveaux	1069
21.6.2	Effet Zénon sur un neutron	1070

21.6.3	À propos de la fonction de Wigner	1071
21.6.4	Disparition de la cohérence spatiale pour une particule libre	1072
21.6.5	Évolution de la cohérence quantique d'un atome lors de l'émission spontanée	1073
21.6.6	Déviaton d'un atome par un champ classique	1079
21.6.7	Un exemple d'intrication spin-espace	1083
22	Particules identiques	1087
22.1	Indiscernabilité des particules identiques en Mécanique quantique	1087
22.2	Le postulat de symétrisation	1093
22.3	Permutations. Opérateurs de symétrisation et d'antisymétrisation	1102
22.4	États d'un système de particules indépendantes : différence fondamentale entre bosons et fermions	1109
22.5	Introduction à la seconde quantification	1117
22.6	Exercices et problèmes	1128
22.6.1	Retour sur le trou de Fermi	1128
22.6.2	États de spin de trois électrons	1129
22.6.3	Étude détaillée du groupe des permutations \mathcal{S}_3	1129
22.6.4	Quatre spins $\frac{1}{2}$	1131
22.6.5	Interaction entre deux spins $\frac{1}{2}$ par l'intermédiaire d'un boson	1132
22.6.6	N fermions	1134
22.6.7	N fermions libres	1135
22.6.8	Correction quantique à la fonction de partition classique d'un gaz parfait	1136
22.6.9	Équations du mouvement pour les opérateurs de champ	1137

23 Méthodes d'approximation pour les états propres	1139
23.1 Méthode variationnelle	1139
23.1.1 Formulation variationnelle de l'équation aux valeurs et vecteurs propres	1139
23.1.2 Calcul variationnel des états discrets (états liés)	1144
23.1.3 Méthode de Hartree-Fock	1148
23.2 Théorie des perturbations stationnaires	1154
23.2.1 Cas d'un niveau non dégénéré	1158
23.2.2 Cas d'un niveau dégénéré	1167
23.2.3 Développement systématique à l'aide de la résolvante	1172
23.2.4 Approximation de l'équation aux valeurs propres sous sa forme intégrale	1180
23.3 Exemples d'application : effets Stark et Zeeman pour l'atome d'hydrogène	1183
23.3.1 Effet Stark	1183
23.3.2 Effet Zeeman	1187
23.4 Exercices et problèmes	1189
23.4.1 De l'importance des conditions aux limites pour une fonction approchée	1189
23.4.2 Méthode variationnelle	1191
23.4.3 Champ auto-cohérent à une dimension : deux fermions en interaction de contact	1194
23.4.4 La méthode de Brillouin-Wigner	1195
23.4.5 Exemples simples de perturbations	1196
23.4.6 Deux oscillateurs couplés	1196
23.4.7 Effet anharmonique pour un oscillateur	1197
23.4.8 Terme de contact pour l'électron dans l'atome d'hydrogène	1197
23.4.9 Effet Stark pour l'hydrogène	1197

23.4.10	Effet de taille finie du noyau	1199
23.4.11	Rôle du continuum pour la correction du second ordre	1199
23.4.12	Effet Zeeman en champ assez fort : croisements de niveaux ?	1200
23.4.13	Atome d'hydrogène dans deux champs croisés	1201
23.4.14	Effet Zeeman sur un atome alcalin	1201
23.4.15	Structure hyperfine de l'atome de Lithium	1202
23.4.16	Effet Zeeman sur un oscillateur harmonique isotrope : traitements perturbatif et exact	1204
23.4.17	Matrice densité de Bloch	1206
24	Théorie des perturbations dépendant du temps	1209
24.1	Présentation générale	1209
24.2	Calcul systématique de l'opérateur d'évolution et approximations successives	1216
24.3	Amplitudes de transition entre états discrets : exemples	1222
24.3.1	Perturbation constante	1223
24.3.2	Perturbation sinusoïdale	1225
24.4	Amplitudes de transition entre un état discret et un continuum d'états finals. Règle d'or de Fermi	1227
24.5	Applications exemplaires	1234
24.5.1	Interaction d'un atome avec un champ électromagnétique (description semi-classique)	1234
24.5.2	Théorie élémentaire de l'effet photoélectrique	1238
24.6	Le théorème de Gell-Mann et Low	1245
24.7	Exercices et problèmes	1249
24.7.1	Excitation coulombienne	1249
24.7.2	Collision de deux spins $\frac{1}{2}$	1250
24.7.3	Impureté magnétique en phase solide	1250

24.7.4	Transitions à deux photons	1252
24.7.5	Retournement d'un spin par un champ magnétique éphémère	1253
24.7.6	Perturbation électrique transitoire de l'atome d'hydrogène	1253
24.7.7	Retour sur l'oscillation de Rabi	1255
24.7.8	Perturbations constante et gaussienne	1255
24.7.9	Perturbation d'un oscillateur isotrope	1256
24.7.10	Oscillateur en champ alternatif : traitements approché et exact	1256
24.7.11	Deux spins en interaction	1258
24.7.12	Réponse linéaire d'un système dans un état pur : susceptibilité	1259
24.7.13	Réponse linéaire d'un système dans un état mixte : susceptibilité, fonctions de corrélation et relaxation	1259
24.7.14	Illustration du théorème de Gell-Mann et Low	1261
25	Introduction à la description purement quantique de l'interaction champ-matière	1265
25.1	Hamiltonien atome + champ	1267
25.1.1	Lagrangien d'un champ scalaire classique unidimensionnel	1267
25.1.2	Hamiltonien du champ libre	1271
25.1.3	Hamiltonien du système couplé charges + champ	1281
25.2	Description élémentaire de l'émission spontanée	1284
25.3	De Wigner-Weisskopf à Rabi	1293
25.4	Description électrodynamique de l'interaction de van der Waals	1297
25.5	Exercices et problèmes	1306
25.5.1	Quelques propriétés du champ libre	1306
25.5.2	Hamiltonien spin-boson	1308
25.5.3	États cohérents du champ	1310
25.5.4	Calcul explicite de l'amplitude (25.168)	1312

26 Introduction à la théorie des collisions (diffusion)	1315
26.1 Présentation	1315
26.2 Diffusion par un potentiel	1318
26.3 Équation intégrale de la diffusion	1323
26.4 Analyse en ondes partielles. Méthode des déphasages	1330
26.5 Résonances de diffusion	1340
26.6 Exercices et problèmes	1345
26.6.1 Équation intégrale de la diffusion dans \mathbb{R}	1345
26.6.2 Absence de diffusion pour le potentiel de Dirac	1345
26.6.3 Analyse de l'approximation de Born en fonction de l'énergie	1346
26.6.4 Décroissance avec l'énergie de la dérivée logarithmique β_l définie en (26.97)	1346
26.6.5 Diffusion de l'onde S par un puits carré	1347
26.6.6 Approximation de Born pour le puits carré	1348
26.6.7 Miracle de l'approximation de Born pour le potentiel coulombien nu	1348
26.6.8 Approximation de Born pour le potentiel de Yukawa	1348
26.6.9 Densité en champ moyen pour un gaz d'électrons	1349
 IV Applications à basse énergie	 1351
27 Atomes à plusieurs électrons	1353
27.1 Modèle à électrons indépendants	1354
27.2 Termes spectraux	1357
27.3 Structure fine. Multiplets	1359
27.4 Structure hyperfine	1362
27.5 Théorème du Viriel	1365

27.6	Au-delà de l'approximation à électrons indépendants	1367
27.7	L'atome d'hélium	1371
27.8	Exercices et problèmes	1381
27.8.1	Opérateur effectif spin-spin pour deux électrons	1381
27.8.2	L'ion H^- existe-t-il ?	1381
27.8.3	Positivité d'une intégrale d'échange	1382
27.8.4	États de moments angulaires donnés associés à une configuration électronique	1382
27.8.5	Structure fine du carbone. Effets Zeeman et Paschen-Back	1383
27.8.6	Étude de l'atome d'azote	1383
27.8.7	Interaction de configurations pour l'atome d'hélium	1384
27.8.8	Structure hyperfine du fondamental de l'ion Be^+	1384
27.8.9	Nature de la transition de la raie 21 cm	1384
28	Introduction à la physique des molécules	1385
28.1	L'approximation de Born et Oppenheimer	1385
28.1.1	Ordres de grandeur	1385
28.1.2	Approximation de Born et Oppenheimer	1389
28.1.3	Discussion	1393
28.2	Structure électronique des molécules. Nature physique de la liaison chimique	1397
28.2.1	L'ion moléculaire H_2^+	1398
28.2.2	Méthodologie pour une description approchée	1403
28.2.3	La molécule d'hydrogène : la méthode de Heitler-London	1408
28.2.4	La molécule de benzène	1415
28.2.5	Le polyacétylène	1423
28.2.6	Nature physique de la liaison chimique	1431

28.3	Mouvement des noyaux. Spectres de vibration et de rotation	1434
28.3.1	Molécules diatomiques	1435
28.3.2	Effet Raman	1444
28.3.3	Molécules polyatomiques	1446
28.4	Exercices et problèmes	1450
28.4.1	Constantes du mouvement électronique pour une molécule diatomique	1450
28.4.2	Méthode LCAO pour l'ion moléculaire H_2^+	1450
28.4.3	Stabilité comparée des molécules He_2 et H_2	1451
28.4.4	La molécule d'hydrogène selon Heitler et London	1451
28.4.5	Le polyacétylène : limite N infini et analyse de la corrélation électronique	1452
28.4.6	États liés du potentiel de Morse	1454
28.4.7	Fonction de partition rotationnelle	1455
28.4.8	Modes normaux de vibration de X_3	1455
29	Matière condensée ordonnée	1459
29.1	Préliminaires	1459
29.2	Énergie de cohésion des solides ordonnés	1463
29.2.1	Présentation	1463
29.2.2	Cohésion des solides moléculaires	1464
29.2.3	Cohésion des réseaux ioniques	1468
29.2.4	Cohésion des métaux	1470
29.3	Ordre spatial d'un cristal. Diffraction	1474
29.3.1	Réseaux. Structure physique d'un réseau	1474
29.3.2	Diffraction par un réseau	1477
29.3.3	Facteurs de structure (géométrique et atomique)	1486

29.4 Exercices et problèmes	1488
29.4.1 Molécule de van der Waals	1488
29.4.2 Gaz d'électrons dans le modèle du jellium	1490
29.4.3 Le jellium : influence de la densité et de la portée des interactions sur les propriétés magnétiques de l'état fondamental	1493
29.4.4 Diffusion de neutrons par un gaz diatomique	1494
30 Électrons dans un cristal	1495
30.1 Préliminaires	1495
30.2 Théorème de Bloch	1498
30.3 Premières conséquences du théorème de Bloch	1507
30.3.1 Équation pour la fonction $u_{\vec{k}}$	1507
30.3.2 Impulsion de l'électron dans le cristal	1508
30.3.3 Vitesse d'un électron de Bloch	1509
30.3.4 Symétrie de la fonction $\varepsilon(\vec{k})$	1509
30.3.5 Surface de Fermi	1511
30.4 Applications choisies du théorème de Bloch	1512
30.4.1 L'approximation des électrons presque libres	1514
30.4.2 L'approximation des liaisons fortes	1527
30.5 Conducteurs, semi-conducteurs, isolants	1535
30.6 Les magnons : un exemple de l'ordre magnétique d'un solide	1545
30.6.1 Définition des magnons (ferromagnétiques)	1547
30.6.2 États liés de deux magnons	1551
30.7 Exercices et problèmes	1560
30.7.1 Modification de la sphère de Fermi pour un alcalin	1560
30.7.2 Modulation de l'énergie de site pour un réseau en liaisons fortes	1563
30.7.3 Règle de sélection pour un cristal parfait	1565

30.7.4	Un modèle pour le graphite	1566
30.7.5	États d'un électron presque libre sur un réseau hexagonal bidimensionnel	1569
30.7.6	États localisés dus à une impureté	1571
30.7.7	Variation en température de la chaleur spécifique d'un solide possédant des excitations sans <i>gap</i>	1573
30.7.8	Magnétisme localisé : le modèle d'Anderson	1573
30.7.9	Tour d'horizon des propriétés magnétiques des solides	1575
30.7.10	Magnons et états liés de magnons dans le modèle de Heisenberg .	1580
30.7.11	Excitations d'un réseau de spins	1584
30.7.12	Boîte quantique sous champ magnétique	1587
30.7.13	Oscillations de Bloch pour un atome	1591
30.7.14	Atomes dans un réseau optique	1594
30.7.15	Compétition entre confinement magnétique et interactions dans un réseau de plaquettes	1600
31	Vibrations d'un solide ordonné	1611
31.1	L'approximation harmonique	1612
31.2	Modes normaux d'un réseau unidimensionnel	1615
31.3	Modes normaux d'un réseau unidimensionnel à deux atomes par maille . .	1625
31.4	Modes normaux d'un réseau tridimensionnel	1631
31.4.1	Réseau sans base	1631
31.4.2	Réseau avec base	1633
31.5	Quantification des vibrations de réseau	1633
31.6	Contribution des phonons à la chaleur spécifique	1634
31.7	Manifestation des phonons dans les spectres de diffraction	1638
31.8	Mesure des relations de dispersion des phonons : diffusion inélastique des neutrons	1644

31.9 Exercices et problèmes	1645
31.9.1 Vibration d'une chaîne monoatomique 1D	1645
31.9.2 Vibration d'un réseau unidimensionnel de dimères	1647
31.9.3 Vibration d'un réseau avec des couplages harmoniques à longue portée	1648
31.9.4 Instabilité de Peierls	1649
31.9.5 Identité de Bloch	1652
32 Notions de transport dans les solides	1653
32.1 Généralités	1653
32.2 Le modèle semi-classique	1657
32.3 Conséquences du modèle semi-classique	1660
32.3.1 Mouvement dans un champ électrique constant dans le temps . . .	1660
32.3.2 Mouvement dans un champ magnétique constant	1663
32.4 Conductivité statique d'un métal	1665
32.5 Introduction à la supraconductivité	1672
32.5.1 Manifestations expérimentales de l'état supraconducteur	1672
32.5.2 La théorie BCS	1673
32.6 Exercices et problèmes	1686
32.6.1 Orbites semi-classiques d'un électron dans un métal	1686
32.6.2 Variation en température du <i>gap</i> supraconducteur (couplage faible)	1687
32.6.3 Grandeurs thermodynamiques dans les phases normale et supraconductrice	1688
Bibliographie	1691
Index	1713