

JEAN HLADIK

Mécanique quantique

Atomes et molécules

P
Enseignement
de la
Physique

MASSON 

TABLE DES MATIÈRES

(See contents page XIII)

Avant-propos	XVII
Chapitre I — Sources de la mécanique quantique	1
I. <i>Fonction d'onde</i>	1
1. Description d'un système physique par un paquet d'ondes	1
2. Équation de Schrödinger pour une particule libre	3
3. Règles de correspondance	4
4. Règle générale de formation de l'équation de Schrödinger	5
5. L'équation de Schrödinger comme postulat	6
II. <i>Contenu physique des fonctions d'onde</i>	7
1. Interprétation statistique des fonctions d'onde	7
2. Propriétés des fonctions d'onde	9
3. Fonction d'onde dans l'espace des impulsions	10
4. Valeur moyenne	10
5. Relations d'incertitude de Heisenberg	11
6. Particularités de la théorie quantique	12
III. <i>Particule dans un état stationnaire</i>	13
1. État stationnaire	13
2. Molécules d'un gaz dans une enceinte fermée	14
3. Particule en rotation	16
IV. <i>Exercices résolus</i>	18
Chapitre II — Opérateurs linéaires	25
I. <i>Types d'opérateurs linéaires</i>	25
1. Définitions	25
2. Produit scalaire	27
3. Opérateur adjoint	28
4. Opérateurs hermitiens	29
5. Opérateurs unitaires	30
6. Fonction d'opérateur	30
7. Espace produit tensoriel.....	31

II. Vecteurs et valeurs propres	32
1. Définitions	32
2. Opérateurs hermitiens	33
3. Opérateurs qui commutent	34
4. Fonction d'opérateur	35
III. Matrice d'un opérateur	36
1. Définitions	36
2. Propriétés des matrices représentatives	37
3. Base propre d'un opérateur hermitien	38
4. Changement de base	39
5. Matrices particulières	40
IV. Espaces de Hilbert	41
1. Espaces des fonctions de carré intégrable	41
2. Définition d'un espace de Hilbert	41
3. Base orthonormée	42
4. Distributions propres	44
5. Opérateurs linéaires et matrices	45
V. Exercices résolus	46
Chapitre III — Formalisme de la mécanique quantique	51
I. Réalisations des fonctions d'onde	51
1. Espace vectoriel des fonctions d'onde	51
2. Réalisation- φ_n	52
3. Réalisation- p	52
4. Réalisation- r	53
5. Réalisation- φ_α	54
II. Espace des états quantiques	55
1. Vecteur d'état	55
2. Produit scalaire	56
3. Opérateurs linéaires	58
4. Opérateurs de projection	59
5. Réalisations	60
6. Opérateurs R et P	61
III. Système complet d'observables qui commutent	63
1. Observables qui commutent	63
2. Système complet d'observables qui commutent	65
3. Mesures expérimentales et SCOC	66
IV. Postulats de la mécanique quantique	66
1. Postulats fondamentaux	67
2. Construction de l'opérateur hamiltonien	68
3. Probabilité d'obtention d'une valeur propre lors d'une mesure	69
4. Valeurs moyennes d'une observable	71
V. Propriétés des observables	71
1. Évolution de la valeur moyenne d'une observable	71
2. Constante du mouvement	73
3. Théorème d'Ehrenfest	73
4. Courant de probabilité	75
5. Écart quadratique moyen	76
VI. Exercices résolus	76

Chapitre IV — Oscillateur harmonique	81
I. <i>Approximation harmonique</i>	81
1. L'oscillateur harmonique en physique	81
2. Équation de Schrödinger	82
II. <i>Niveaux d'énergie</i>	83
1. Opérateurs	83
2. Vecteurs propres de N	84
3. Spectre des valeurs propres	85
4. Opérateurs de création et d'annihilation	86
III. <i>Vecteurs d'état</i>	87
1. Réalisation- $ n\rangle$	87
2. Matrices des opérateurs	87
IV. <i>Fonctions d'onde</i>	88
1. État fondamental	88
2. Fonctions propres	89
V. <i>Système de deux particules en interaction</i>	90
1. Équation de Schrödinger	91
2. Séparation des variables	92
VI. <i>Vibrations d'une molécule diatomique</i>	92
1. Énergie potentielle d'interaction	92
2. Spectres infrarouges	94
VII. <i>Exercices résolus</i>	95
Chapitre V — Les groupes et leurs représentations	103
I. <i>Définition d'un groupe</i>	103
1. Intérêt de la théorie des groupes	103
2. Axiomes de définition d'un groupe	104
3. Propriétés élémentaires des groupes	104
II. <i>Représentation d'un groupe</i>	106
1. Exemple de représentation	106
2. Définition d'une représentation d'un groupe	107
3. Représentations réductibles et irréductibles	108
4. Représentations équivalentes	109
5. Produit direct de représentations	109
III. <i>Représentation en mécanique quantique</i>	111
1. Opérateur agissant sur des fonctions d'onde	111
2. Représentation d'un groupe	112
IV. <i>Groupe des rotations dans un plan</i>	113
1. Groupe $SO(2)$	113
2. Exemple de représentation	114
3. Générateur infinitésimal	115
4. Matrice infinitésimale	117
V. <i>Groupe des rotations spatiales</i>	118
1. Groupe $SO(3)$	118
2. Représentation matricielle à trois dimensions de $SO(3)$	118
3. Opérateurs infinitésimaux	119
4. Rotation autour d'un axe quelconque	120
5. Relations de structure	121
6. Opérateurs hermitiens	122
VI. <i>Exercices résolus</i>	123

Chapitre VI — Moment cinétique	129
I. <i>Moment cinétique orbital</i>	129
1. Définitions.....	129
2. Opérateur moment cinétique agissant sur les vecteurs d'état.....	130
3. Opérateur L_z en coordonnées sphériques.....	131
II. <i>Opérateurs de moment cinétique</i>	132
1. Définition.....	132
2. Valeurs propres de J^2 et J_z	133
3. Représentations irréductibles de SO(3).....	135
4. Représentations matricielles irréductibles de SO(3).....	136
5. Rotation infinitésimale et rotation finie.....	138
6. Base standard de l'espace des états.....	139
III. <i>Fonctions propres du moment cinétique orbital</i>	140
1. Opérateurs de moment cinétique orbital en coordonnées sphériques.....	140
2. Fonctions propres communes de L_z et L^2	141
IV. <i>Rotation d'une molécule diatomique</i>	143
1. Rotateur rigide.....	143
2. Spectre de rotation pure.....	144
V. <i>Composition des moments cinétiques</i>	146
1. Position du problème.....	146
2. Opérateur de moment cinétique total.....	146
3. Base de $E^{(ij)}$	147
4. Décomposition de Clebsch-Gordan.....	148
VI. <i>Exercices résolus</i>	151
Chapitre VII — Atome d'hydrogène	163
I. <i>Historique</i>	163
1. Séries spectrales de l'atome d'hydrogène.....	163
2. Niveaux d'énergie et séries spectrales.....	164
II. <i>Champ central symétrique</i>	165
1. Équation de Schrödinger.....	165
2. Séparation des variables.....	165
3. Équation radiale.....	166
4. Nombres quantiques.....	167
III. <i>Étude en coordonnées sphériques</i>	168
1. Équation radiale.....	168
2. Fonctions radiales.....	169
3. Niveaux d'énergie.....	171
4. Fonctions d'onde.....	172
5. Densité de probabilité radiale.....	174
6. Courant dans l'atome d'hydrogène.....	174
7. Valeurs moyennes des puissances de r	177
IV. <i>Étude en coordonnées paraboliques</i>	177
1. L'atome d'hydrogène en coordonnées paraboliques.....	177
2. Solutions de l'équation de Schrödinger.....	178
V. <i>Exercices résolus</i>	179
Chapitre VIII — Méthodes d'approximation	183
I. <i>Perturbations indépendantes du temps</i>	183
1. Position du problème.....	183
2. Valeurs propres non dégénérées : perturbation du premier ordre.....	184
3. Valeurs propres non dégénérées : perturbation du deuxième ordre.....	186

4. Valeurs propres dégénérées.....	187
II. <i>Méthode des variations</i>	188
1. Principe de la méthode.....	188
2. Méthode de calcul.....	190
III. <i>Exercices résolus</i>	191
Chapitre IX — Spineurs	197
I. <i>Groupe SU(2)</i>	197
1. Définition du groupe SU(2).....	197
2. Rotation dans l'espace tridimensionnel.....	199
II. <i>Matrices de rotation</i>	200
1. Représentation binaire du groupe SO(3).....	200
2. Matrices de rotation.....	200
III. <i>Les spineurs de l'espace tridimensionnel</i>	202
1. Définition des spineurs d'ordre un.....	202
2. Espace vectoriel des spineurs d'ordre un.....	203
3. Représentations de SU(2).....	204
IV. <i>Représentation spinorielle de SO(3)</i>	205
1. Représentation de dimension deux.....	206
2. Représentation de dimension trois.....	206
3. Représentation de dimension quelconque.....	207
4. Tenseurs formés à partir des spineurs.....	208
V. <i>Exercices résolus</i>	209
Chapitre X — Spin	215
I. <i>Mise en évidence expérimentale</i>	215
1. Effet Zeeman « anormal ».....	215
2. Expérience de Stern et Gerlach.....	216
II. <i>Spin de l'électron</i>	219
1. Moment cinétique intrinsèque.....	219
2. Fonction d'onde de l'électron.....	220
3. Opérateur de spin.....	220
4. Spineur.....	221
5. Vecteurs d'état.....	224
6. Vérifications expérimentales.....	225
III. <i>Spin des particules quantiques</i>	227
1. Valeurs expérimentales du spin des particules.....	227
2. Espace des états de spin.....	228
3. Moment cinétique total.....	230
4. Composition de deux spins.....	230
IV. <i>Équation de Pauli</i>	233
1. Équation de Schrödinger dans un champ magnétique.....	233
2. Particule douée de spin.....	234
3. Linéarisation de l'équation de Schrödinger.....	235
V. <i>Exercices résolus</i>	238
Chapitre XI — Structure fine de l'atome d'hydrogène	247
I. <i>Équation de Dirac</i>	247
1. Hamiltonien relativiste.....	247
2. Équation d'onde de Dirac.....	249
3. Approximation pour les faibles vitesses.....	250
4. Interprétation physique des termes de structure fine.....	252

II. Structure fine du niveau $n = 2$	253
1. Dégénérescence du niveau $n = 2$	253
2. Calcul de perturbation	254
3. Déterminant $2s$	255
4. Déterminant $2p$	255
5. Structure fine du niveau $n = 2$	257
III. Structure fine des niveaux d'énergie	257
1. Levée de la dégénérescence	258
2. Correction relativiste des niveaux d'énergie	259
IV. Structure des transitions	259
1. Règles de sélection	259
2. Structure de la raie H_α	260
V. Effet Stark	261
1. L'atome d'hydrogène en coordonnées paraboliques	261
2. Effet Stark linéaire	262
VI. Compléments	262
1. Calcul des termes de structure fine	264
VII. Exercices résolus	271
Chapitre XII — Identité des particules	271
I. Particules indiscernables	271
1. Principe d'indiscernabilité	271
2. Fonctions d'onde symétrique et antisymétrique	273
3. Vecteurs d'état complètement symétriques ou antisymétriques	274
4. Propriétés des opérateurs de permutation	276
5. Postulat de symétrisation	277
II. Construction des vecteurs d'états physiques	277
1. Unicité d'un vecteur d'état physique	277
2. Construction des vecteurs d'états physiques	279
3. Niveaux d'énergie d'un système de particules indépendantes	280
III. Atome d'hélium	280
1. Espace des vecteurs d'états physiques	282
2. Spectre de H_0	283
3. Niveaux d'énergie de l'atome d'hélium	284
IV. Exercices résolus	289
Chapitre XIII — Atomes	289
I. Approximation du champ central	289
1. Hamiltonien avec champ central	290
2. Niveaux individuels des électrons	292
3. État fondamental des éléments chimiques	293
4. Dégénérescence d'une configuration	294
II. Structure fine des niveaux d'énergie. Couplage $L-S$	294
1. Principe du calcul des niveaux d'énergie	294
2. Notation des moments cinétiques d'un atome	295
3. Structure des niveaux d'énergie à l'approximation W_1	297
4. Structure fine des niveaux d'énergie L, S	298
5. Détermination des termes spectraux	300
III. Structure fine des niveaux d'énergie. Couplage $j-j$	300
1. Couplage $j-j$	302
2. Couplage intermédiaire	302
IV. Exercices résolus	302

Chapitre XIV — Molécules	307
I. <i>Généralités</i>	307
1. Séparation des mouvements des électrons et des noyaux	307
2. Approximation des valeurs et vecteurs propres de H_0	308
II. <i>L'ion moléculaire H_2^+</i>	309
1. Méthode des variations.....	309
2. Interprétation des solutions symétriques et antisymétriques.....	311
III. <i>Molécules diatomiques</i>	312
1. Classification des états moléculaires monoélectroniques.....	312
2. Configurations électroniques	313
3. Classification des états d'une molécule diatomique	315
4. États de la molécule d'hydrogène	316
IV. <i>Symétrie des molécules</i>	317
1. Transformation de symétrie	317
2. Les transformations fondamentales de symétrie	318
3. Groupes ponctuels de symétrie.....	319
4. Classes d'un groupe	322
5. Table de caractères.....	322
6. Décomposition d'une représentation réductible	323
V. <i>Applications de la théorie de la symétrie</i>	324
1. Bases des représentations irréductibles.....	324
2. Subdivision des niveaux d'énergie d'un atome.....	326
3. Orbitales atomiques hybrides	327
VI. <i>Exercices résolus</i>	330
Chapitre XV — Transition sous l'action d'une perturbation	335
I. <i>Perturbation dépendant du temps</i>	335
1. Équation de Schrödinger dépendant du temps.....	335
2. Probabilité de transition	336
3. Système d'équations de perturbation	337
4. Développement en série des coefficients $c_n(t)$	338
5. Probabilité de transition à l'approximation d'ordre un	339
II. <i>Perturbation sinusoïdale</i>	340
1. Probabilité de transition	340
2. Caractère résonant d'une probabilité de transition	340
3. Probabilité de transition par unité de temps.....	342
III. <i>Transitions dipolaires électriques d'un atome</i>	344
1. Interaction d'un atome avec un champ électromagnétique	344
2. Hamiltonien dipolaire électrique.....	345
3. Règles de sélection	346
IV. <i>Exercices résolus</i>	349
Chapitre XVI — Noyau atomique et structure hyperfine des niveaux électroniques	351
I. <i>Caractéristiques du noyau atomique</i>	351
1. Proton et neutron	351
2. Spin et moment magnétique d'un noyau	353
3. Énergie de liaison des nucléons.....	354
II. <i>Modèle en couches</i>	356
1. Hamiltonien à particules séparées.....	356
2. Approximation harmonique avec couplage spin-orbite.....	357
3. Couches et sous-couches donnant les nombres magiques	358

III. <i>Structure hyperfine des niveaux atomiques</i>	360
1. Séparation hyperfine	360
2. Hamiltonien hyperfin magnétique de l'atome d'hydrogène	362
3. Structure hyperfine du niveau 1s de l'atome d'hydrogène	365
4. Hamiltonien hyperfin d'un atome	367
IV. <i>Exercices résolus</i>	368
Chapitre XVII — Action d'un champ magnétique	375
I. <i>Énergie de couplage</i>	375
1. Équation de Pauli	375
2. Champ uniforme	376
3. Termes paramagnétique et diamagnétique	377
II. <i>Effet Zeeman de structure fine de l'atome d'hydrogène</i>	378
1. Étude expérimentale	378
2. Types d'effets Zeeman	379
3. Effet Zeeman anormal	380
4. Effet Paschen-Bach	382
III. <i>Effet Zeeman de structure hyperfine de l'atome d'hydrogène</i>	384
1. Effet Zeeman de structure hyperfine	384
2. Champ faible	385
3. Champ fort	386
4. Champ moyen	387
IV. <i>Résonance magnétique</i>	388
1. Principe	388
2. Applications de la résonance magnétique	391
V. <i>Exercices résolus</i>	393
Chapitre XVIII — Diffusion élastique	399
I. <i>Collisions élastiques</i>	399
1. Phénomènes de collision	399
2. Section efficace différentielle de diffusion	400
II. <i>États stationnaires de diffusion élastique</i>	401
1. Équation de Schrödinger	401
2. Expression théorique de la section efficace	403
3. Approximation de Born	404
III. <i>Diffusion par un potentiel central</i>	407
1. Décomposition en ondes partielles	407
2. Méthode des déphasages	408
3. Champ coulombien	410
IV. <i>Exercices résolus</i>	412
Bibliographie	417
Index alphabétique	419

JEAN HLADIK

Mécanique quantique

Atomes et molécules

Enseignement
de la
Physique

L'ouvrage

- C'est un cours de mécanique quantique développant les modèles atomiques et moléculaires de la théorie quantique. Il donne l'essentiel du formalisme de la mécanique quantique (opérateurs, fonctions d'onde, groupes et représentations, spineurs...) et conduit l'étude de l'atome d'hydrogène, des atomes et des molécules simples, de l'action d'un champ magnétique et de la diffusion élastique.
- L'auteur aplanit les difficultés en donnant, au fur et à mesure des besoins, le bagage mathématique nécessaire.
- Des exercices corrigés complètent le cours.

Le public

- Étudiants en licence ou maîtrise de physique et de sciences physiques.
- Candidats au CAPES ou à l'agrégation de physique.
- Étudiants des écoles supérieures de physique et de chimie.

L'auteur

Jean Hladik est professeur à l'université d'Angers. Il y enseigne la physique statistique et la mécanique quantique.



9 782225 828508

MECANIQUE QUANTIQUE

98042

97600 .141098

0001

1
4
X
3

ISBN 2-225-82850-4



9 782225 828508

