

4.0 crédits	30.0 h + 22.5 h	1q
-------------	-----------------	----

Enseignants:	Rignanese Gian-Marco ; Charlier Jean-Christophe (coordinateur) ; Gonze Xavier ; Piraux Luc ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	Le cours est divisé en 2 parties. La première partie, centrée sur la mécanique quantique, s'attache d'abord à rappeler quelques concepts de base ainsi qu'à compléter l'exposé de ceux-ci. Ensuite, l'oscillateur harmonique (méthode de Dirac), des bases de physique moléculaire et de théorie de perturbations sont examinés. La seconde partie, centrée sur la physique statistique, présente les notions de base, la théorie cinétique des gaz, les différents ensembles statistiques, et les fluides quantiques.
Acquis d'apprentissage	Ce module a pour but de compléter la formation en physique des étudiants, en vue de la compréhension des propriétés des molécules, solides et nanostructures. A l'issue de cet enseignement, les étudiants seront en mesure d'utiliser la mécanique quantique pour comprendre la cohésion de ces systèmes, et leur réponses à des perturbations, ainsi que d'utiliser la physique statistique pour prévoir leur comportement énergétique en fonction de la température. <i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i>
Contenu :	<p>Contenu :</p> <p>Partie 1 :</p> <p>1.1. Rappels de mécanique quantique : postulats, systèmes simples, moment cinétique</p> <p>1.2. Théorèmes fondamentaux et propriétés générales (Opérateurs hermitiques, normalisation des fonctions d'ondes, base de fonctions propres associée à un opérateur hermitique ; orthogonalité des fonctions de base, approximation classique de l'équation de Schrödinger)</p> <p>1.3. Théorie de la mesure (Distribution statistique des résultats de la mesure d'une observable, mesure idéale, observables compatibles et incompatibles, relations d'incertitude de Heisenberg ; application au moment cinétique)</p> <p>1.4. Mécanique matricielle et théorie des représentations (Combinaison linéaire de fonctions de base ; changements de base de fonctions ; espace réel, et espace des vitesses ; fonctions d'ondes comme vecteurs ; opérateurs comme matrices ; lois de transformation ; relation de fermeture, projecteurs)</p> <p>1.5. Oscillateur harmonique (Méthode de Dirac : opérateurs de création et d'annihilation)</p> <p>1.6. Structure électronique des molécules (Principe variationnel, atome à plusieurs électrons, combinaison linéaire d'orbitales atomiques (liaisons fortes), orbitales de coeur/valence, orbitales liantes et anti-liantes, orbitales ? et ?, transfert de charge et orbitales non-liantes, liaison sp³, liaison sp²+p applications aux molécules diatomiques, eau, éthane, éthène)</p> <p>1.7. Théorie des perturbation indépendantes du temps</p> <p>Partie 2 :</p> <p>2.1. Introduction: Eléments de Physique Statistique (Fondements, espace des phases et points représentatifs, principe d'équiprobabilité, valeur moyenne d'une observable, notion d'ensemble)</p> <p>2.2. Théorie Cinétique des Gaz (Définition du gaz parfait, fonction de distribution des vitesses, statistique de Maxwell -Boltzmann, propriétés d'un gaz parfait - pression, énergie cinétique ...)</p> <p>2.3. Ensemble Microcanonique (Formalisme: la représentation entropique, ex: le modèle d'Einstein pour la chaleur spécifique de réseau, techniques de comptage et haute dimensionnalité)</p> <p>2.4. Ensemble Canonique (Formalisme: la représentation de Helmholtz, notion de fonction de partition, notion de densité d'états, ex: le modèle de Debye pour la chaleur spécifique de réseau)</p> <p>2.5. Ensemble Grand-Canonique (Principe d'indiscernabilité, formalisme "grand-canonique", ex: adsorption de molécules sur une surface)</p> <p>2.6 Fluides Quantiques (Notions de fermions, bosons, le fluide idéal de Fermi, statistique de Fermi-Dirac, chaleur spécifique électronique, fluide idéal de Bose, statistique de Bose-Einstein, notion de condensation de BE, ex: la superfluidité et la supraconductivité)</p> <p>Méthodes : Cours magistraux et apprentissage par exercices.</p>

Autres infos :	Pré-requis FSAB 1104 Probabilité et statistiques
Cycle et année d'étude: :	> Bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation ingénieur civil > Master [120] : ingénieur civil biomédical
Faculté ou entité en charge:	FYKI