



Faculté de sciences appliquées

MAPR1491 Compléments de physique

[30h+22.5h exercices] 4 crédits

Cette activité se déroule pendant le 1er semestre

Enseignant(s): Jean-Christophe Charlier (coord.), Xavier Gonze, Luc Piraux, Gian-Marco Rignanese

Langue d'enseignement : français

Niveau : Premier cycle

Objectifs (en termes de compétences)

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.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

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.

Résumé : Contenu et Méthodes

Contenu :

Partie 1 :

1.1. Rappels de mécanique quantique : postulats, systèmes simples, moment cinétique

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)

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)

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)

1.5. Oscillateur harmonique

(Méthode de Dirac : opérateurs de création et d'annihilation)

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 s et p , transfert de charge et orbitales non-liantes, liaison sp^3 , liaison $sp^2+?p$ applications aux molécules diatomiques, eau, éthane, éthène)

1.7. Théorie des perturbation indépendantes du temps

Partie 2 :

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)

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 ...)

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)

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)

2.5. Ensemble Grand-Canonique

(Principe d'indiscernabilité, formalisme "grand-canonique", ex: adsorption de molécules sur une surface)

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)

Méthodes :

Cours magistraux et apprentissage par exercices.

Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)

Pré-requis

FSAB 1104 Probabilité et statistiques

Autres crédits de l'activité dans les programmes

FSA12BA	Deuxième année de bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation ingénieur civil	(4 crédits)
FSA13BA	Troisième année de bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation ingénieur civil	(4 crédits)