
Notes de cours sur la Mécanique quantique

Université Joseph Fourier, Grenoble ;
Master Physique M1, année 2003-04
(version : 11 octobre 2003)

Frédéric Faure

<http://www.lpm2c.grenoble.cnrs.fr/People/Faure>

Frederic Faure, Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPM2C)
(Maison des Magisteres Jean Perrin, CNRS) BP 166 38042 Grenoble Cedex 9 France

email : frederic.faure@ujf-grenoble.fr

<http://lpm2c.grenoble.cnrs.fr/People/Faure/>

tel : 04 76 88 74 98

fax : 04 76 88 79 83

Table des matières

0.0.1	Introduction	11
0.0.1.1	But et objets de la mécanique quantique :	11
0.0.1.2	Différences et relations entre mécanique classique et mécanique quantique	12
0.0.1.3	Place de la théorie quantique en physique :	12
0.0.1.4	Autres remarques	13
0.0.1.5	Prérequis supposés	13
0.0.1.6	Références conseillées :	13
1	Une particule quantique sans spin, à 1 dimension (I)	15
1.1	Espace des états : les fonctions d'ondes	15
1.1.1	Espace vectoriel des fonctions d'ondes	15
1.1.2	Exemples importants	16
1.1.2.1	Les ondes planes	17
1.1.2.2	Paquet d'onde Gaussien	17
1.1.3	Le produit scalaire	19
1.1.4	Vecteur dual, espace dual	21
1.2	Opérateurs différentiels $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$	21
1.2.1	Définitions	21
1.2.2	Opérateurs linéaires	23
1.2.3	Opérateurs adjoints et autoadjoints	23
1.3	Évolution d'un état quantique	25
1.3.1	L'équation d'évolution	25
1.3.2	Exemples d'évolutions d'ondes (images et films)	26
1.3.2.1	Présentation générale	26
1.3.2.2	Définition de la représentation de Husimi dans l'espace de phase	27
1.3.2.3	L'oscillateur harmonique	27
1.3.2.4	L'oscillateur Anharmonique	30
1.3.2.5	Le double puits de potentiel	34
1.4	Bases, et changement de bases	36
1.4.1	Base orthonormée	36
1.4.1.1	Exemple d'une particule sur un cercle	38

1.4.2	Relation de fermeture	38
1.4.3	Expression d'un opérateur dans une base	39
1.4.4	Changement de base (*)	40
1.5	Spectre d'opérateurs	40
1.5.1	Définition et propriétés générales	40
1.5.2	Spectre de l'opérateur \hat{x} , "base de position"	41
1.5.2.1	Relation de fermeture en position	43
1.5.3	Spectre de l'opérateur \hat{p} , "base d'impulsion"	44
1.5.3.1	Transformée de Fourier, et relation de fermeture en impulsion	44
1.5.3.2	Applications de la relation de fermeture	45
1.5.4	Spectre de l'opérateur \hat{H} , base des états stationnaires	46
1.5.4.1	Interprétation physique : onde stationnaire	46
1.5.4.2	Exemple d'une particule libre sur l'axe x	47
1.5.4.3	Exemple d'une particule libre sur un cercle	48
1.5.4.4	Remarques	48
1.5.5	Représentation d'Heisenberg (*)	49
1.6	Spectre d'opérateur et résultat d'une mesure	49
1.6.1	Opération idéale de mesure d'un système quantique	49
1.6.1.1	Limite de validité de l'équation de Schrödinger	49
1.6.1.2	Exemple d'expérience : mesure de la position d'une particule passant par les double fentes de Young.	50
1.6.1.3	Postulat de la mesure	51
1.6.2	Sur la difficulté d'interpréter la mécanique quantique	55
1.6.2.1	Faut il interpréter ? La description orthodoxe suffit t-elle ?	55
1.6.2.2	Où est la Limite classique-quantique ?	56
1.6.2.3	Une interprétation alternative : appliquons le principe de superposition aux objets macroscopiques	56
1.6.3	Valeurs moyenne et variance de l'observable	58
1.6.4	Relation d'incertitude et relations de commutation	61
1.7	Conseils de Lecture	62
1.8	Correction des exercices	62
2	Une particule quantique sans spin à 1 dimension (II)	65
2.1	Interprétation des opérateurs $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ comme générateurs	65
2.1.1	\hat{H} génère les translations dans le temps	65
2.1.1.1	L'opérateur d'évolution : le propagateur	65
2.1.1.2	Opérateurs unitaires	66
2.1.1.3	Le groupe d'évolution des états quantiques dans le temps	67
2.1.1.4	Relation d'incertitude temps-énergie	69
2.1.2	Groupe des translations des états quantiques en espace	69
2.1.3	Groupe des translations en impulsion	71
2.1.4	Générateurs en mécanique classique	71
2.2	Le potentiel harmonique ; Spectre de \hat{H} et évolution	73

2.2.1	Importance du potentiel Harmonique en physique	73
2.2.2	Résolution algébrique du spectre	75
2.2.2.1	Changement de variable	75
2.2.2.2	Opérateurs de création et d'annihilation	76
2.2.3	Expression et schéma des fonctions d'ondes $\psi_n(Q) = \langle Q n \rangle$	80
2.2.3.1	Fonctions d'ondes $\psi_n(x)$	81
2.2.4	Application : Modèle d'Einstein (1907) sur la capacité calorifique des matériaux	82
2.2.5	Application : les modes quantiques du champ électromagnétique dans le vide.	83
2.2.5.1	Les équations de Maxwell dans le vide interprétées comme une assemblée d'oscillateurs harmoniques	83
2.2.5.2	Quantification du champ électromagnétique	85
2.2.5.3	Paquet d'onde=onde classique	86
2.2.5.4	Les photons	86
2.2.5.5	Le vide quantique du champ électromagnétique	87
2.2.6	Un effet surprenant du "vide quantique" de photons : la force de Casimir (1948)	88
2.2.7	Les états cohérents et leur évolution par l'oscillateur harmonique	90
2.2.7.1	Expression algébrique d'un paquet d'onde gaussien	91
2.2.7.2	Évolution d'un paquet d'onde gaussien	92
2.2.7.3	Algèbre et groupe de Weyl-Heisenberg (*)	94
2.2.7.4	Algèbre et groupe de l'oscillateur Harmonique (*)	96
2.3	Correspondances classique-quantique à l'aide du paquet d'onde Gaussien	99
2.3.1	Comptage semi-classique du nombre d'états	99
2.3.2	Règle de quantification semi-classique	104
2.3.3	Représentation quantique dans l'espace de phase	107
2.3.3.1	Relation de Fermeture par les états cohérents	108
2.3.3.2	Représentation de Husimi d'un état quantique	108
2.3.3.3	Exemples simples et importants	109
2.4	Conseils de Lecture	111
2.5	Solution des exercices	112
3	Une particule à 3 dimensions sans spin	119
3.1	Une Particule sans spin à 3 dimensions	119
3.1.1	Espace des états \mathcal{H}	119
3.1.2	L'espace \mathcal{H} comme produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$	120
3.1.3	L'oscillateur Harmonique à 2 dimensions (TD) (*)	123
3.2	Particule chargée dans un champ électromagnétique	123
3.2.1	Expression du Hamiltonien classique	124
3.2.1.1	Fonction Lagrangien :	124
3.2.1.2	Impulsion généralisée :	125
3.2.1.3	Fonction de Hamilton :	125

3.2.1.4	Équations de mouvement classique	125
3.2.1.5	Invariance de Jauge classique	126
3.2.2	Équation de Schrödinger et invariance de Jauge	126
3.2.2.1	Invariance de Jauge quantique	126
3.2.3	Effet Aharonov-Bohm	127
3.2.4	Interprétation géométrique de l'invariance de Jauge quantique, et autres théories de Jauges (*)	129
3.2.4.1	Nécessité d'une description géométrique	130
3.2.4.2	Autre écriture de l'équation de Schrödinger avec la dérivée covariante	130
3.2.4.3	La fonction d'onde comme une section d'un espace fibré sur l'espace-temps	131
3.2.4.4	Le champ électromagnétique comme une connexion sur ce fibré vectoriel	131
3.2.4.5	Signification géométrique de la dérivée covariante \mathcal{D} et courbure de la connexion	132
3.2.4.6	On retrouve les expressions habituelles de l'électromagnétisme et l'invariance de Jauge	134
3.2.4.7	Généralisation : Théories de Jauge de Yang-Mills	137
3.2.5	Remarque importante sur la nécessité d'une théorie quantique du champ électromagnétique	138
3.3	Conseils de Lecture	139
3.4	Correction des exercices	139
4	Particule de spin 1/2	141
4.1	L'espace des états de spin	141
4.2	Rotation de 2π et 4π d'un spin	143
4.3	Générateurs des rotations et matrices de rotation	144
4.3.1	Rotation autour de l'axe y	144
4.3.2	Rotation autour de l'axe z	145
4.3.3	Rotation autour de l'axe x	146
4.4	Représentation de l'état de spin sur la sphère de Bloch	148
4.5	Groupe $SU(2)$ de rotation du spin, et relations de commutation	150
4.5.1	Non commutativité du groupe et relations de commutation	150
4.5.2	Rotation autour d'un axe \vec{u} quelconque	153
4.5.3	Algèbre de Lie des rotations	153
4.5.4	Groupe de Lie des rotations	154
4.5.5	Représentation des opérateurs de rotation dans une base : groupe des matrices $SU(2)$	154
4.6	Espace quantique total d'une particule à 3 dimensions avec spin 1/2	155
4.6.1	Remarques	155
4.6.2	Une base de \mathcal{H}_{tot} et champ spinoriels	156
4.7	Autres degrés de liberté internes	156

4.8	Mesure de spin, application récente : la Cryptographie quantique	157
4.8.1	Cryptographie classique symétrique à clef secrète	158
4.8.2	Le protocole B.B.84 pour partager une clef secrète	158
4.9	Interaction du spin avec le champ électromagnétique	160
4.9.1	Cas de l'électron	160
4.9.2	Autres particules de spin 1/2	161
4.9.3	Évolution du spin seul, précession de Larmor	162
4.9.4	Résonance Magnétique Nucléaire (R.M.N.) et Imagerie Magnétique Résonante (M.R.I.)	164
4.10	Conseils de Lecture	167
4.11	Correction des exercices	167
5	Plusieurs particules	169
5.1	Plusieurs particules discernables	169
5.1.1	Pour deux particules	169
5.1.2	Opérateurs de \mathcal{H}_{total}	170
5.1.3	Pour N particules	170
5.2	Non localité de la mécanique quantique, le paradoxe E.P.R.	171
5.2.1	États enchevêtrés : états surprenants de l'espace total	171
5.2.2	Description quantique orthodoxe	171
5.2.3	Objection de Einstein-Podolsky-Rosen (E.P.R.) sur la non localité (1935)	174
5.2.4	Théories locales à variable cachées et inégalités de Bell (1964) . . .	175
5.2.5	Violation de l'inégalité par la mécanique quantique (1976)	176
5.2.5.1	Modèle quantique	176
5.2.5.2	Non localité de la mécanique quantique, confirmation ex- périmentale	177
5.3	Plusieurs particules identiques	177
5.3.1	Deux particules identiques	178
5.3.1.1	Particules de spins demi-entier, les Fermions	178
5.3.1.2	Particules de spins entier, les Bosons	180
5.3.2	Plusieurs particules identiques	181
5.4	Aperçu sur les particules élémentaires et forces élémentaires (*)	183
5.4.1	Liste des particules élémentaires	183
5.4.1.1	La matière	183
5.4.1.2	L'antimatière	184
5.4.1.3	Les bosons de Jauge	185
5.4.1.4	Particules élémentaires stables	185
5.4.2	Les particules composées	185
5.4.2.1	Les mésons :	185
5.4.2.2	Les baryons :	186
5.4.2.3	Noyau nucléaire	186
5.4.2.4	Composés plus élaborés : atomes, molécules, matériaux,...	186

5.4.2.5	Particules composées stables	186
6	Méthodes d'approximation ; résolution approchée	187
6.1	Théorie des perturbations stationnaires	187
6.1.1	Cas de niveaux non dégénérés	188
6.1.2	Exemple : vibration anharmonique d'un atome	190
6.1.3	Cas de niveaux dégénérés	193
6.2	Théorie des perturbations dépendant du temps	194
6.2.1	Rappels sur l'approximation dipolaire électrique	194
6.2.1.1	Onde plane	194
6.2.1.2	Forces électriques et magnétiques	196
6.2.1.3	Approximation dipolaire électrique	196
6.2.2	Effet d'une onde cohérente ; transitions dans le spectre discret . . .	197
6.2.2.1	Question :	197
6.2.2.2	Solution :	198
6.2.2.3	Interprétation des résonances :	200
6.2.2.4	Expression de $ W_{ba} ^2$	202
6.2.3	Effet d'une onde incohérente	203
6.2.3.1	Question :	204
6.2.3.2	Solution	204
6.2.3.3	Loi de décroissance	204
6.2.4	Transition vers les continuum ; La photo-ionisation ; Effet photoélec- trique	205
6.2.4.1	Remarques	206
6.3	Méthodes variationnelles	208
6.3.1	Méthode variationnelle pour problèmes stationnaires	208
6.3.1.1	Propriété	208
6.3.1.2	Méthode variationnelle	209
6.3.1.3	Exemple : vibration anharmonique d'un atome (TD) . . .	210
7	Symétries et règles de conservation	213
7.1	Propriétés et méthodes de base	213
7.1.1	Spectre commun de deux opérateurs qui commutent	213
7.1.2	Application : recherche du spectre de \hat{H}	214
7.1.3	Loi de conservation et groupe de symétrie dynamique	215
7.1.3.1	Loi de conservation :	215
7.1.3.2	Groupe de symétrie dynamique	216
7.1.4	Impulsion totale et conservation	217
7.2	Groupe de symétrie dynamique commutatif : électron dans un potentiel périodique cristallin, spectre en bandes.	218
7.2.1	Explication qualitative de la formation de bandes	219
7.2.2	Ondes de Bloch	222
7.2.2.1	Spectre en bandes	223

7.3	Groupe non commutatif : les rotations et le moment angulaire	227
7.3.1	Générateurs du groupe de rotation dans $\mathcal{H}_{espace} = L^2(\mathbb{R}^3)$	227
7.3.1.1	Écriture vectorielle indépendante des coordonnées	229
7.3.1.2	Relations de commutations	230
7.3.2	Moment angulaire total et conservation	230
7.3.2.1	Exemples de termes d'interaction invariants par une rotation globale	231
7.3.2.2	Moment angulaire total	231
7.3.3	Espace de représentation réductible et irréductible d'un groupe . . .	232
7.3.4	Espaces de représentation irréductibles des groupes de rotation SU(2) et SO(3)	233
7.3.5	Espace de représentation irréductible d'un groupe commutatif . . .	239
7.3.6	Application : calcul du spectre du rotateur rigide	239
7.3.6.1	L'espace de Hilbert des états quantiques	239
7.3.6.2	L'opérateur Hamiltonien	240
7.3.6.3	Spectre de \hat{H}	240
7.3.6.4	Les Harmoniques sphériques	241
7.3.6.5	Parité des harmoniques sphériques	242
7.4	Importance des représentations irréductibles en physique	244
7.4.1	Propriété fondamentale : le théorème de Wigner	244
7.4.2	Exemple : Spectre de l'atome d'hydrogène	245
7.4.2.1	Rappels du spectre :	245
7.4.2.2	Symétrie supplémentaire de Pauli, et dégénérescence en l .	246
7.4.2.3	Exemple de la correction relativiste, brisant cette symétrie.	247
7.4.2.4	Atome à plusieurs électrons	247
7.4.2.5	Effet d'un champ magnétique extérieur	248
7.4.2.6	Structure fine et hyperfine de l'atome hydrogène	249
7.5	Composition des moments angulaires	250
7.5.1	Particule composée de deux particules de spin 1/2	250
7.5.1.1	La raie de 21 cm de l'hydrogène	254
7.5.1.2	Horloges atomiques et mesure du temps	254
7.5.2	Résultat général sur la composition de deux moments cinétiques . .	255
7.5.3	Application : symétrie d'isospin, et sections efficaces de réactions hadroniques	257
7.5.3.1	La symétrie d'isospin	257
7.5.3.2	Réaction nucléaires nucléon-pion	258
7.5.4	Règles de sélection et théorème de Wigner-Eckardt	260
7.5.4.1	Règle de sélection	260
7.5.4.2	Théorème de Wigner Eckardt	261
7.6	Symétries fondamentales en physique	262
7.6.0.3	Le groupe de Poincaré	262
7.6.0.4	Autres symétries fondamentales :	262
7.7	Topologie des groupes de rotation SO(3) et SU(2) (*)	263

7.8	Solution des exercices	263
A	Formules	265
A.1	Intégrales Gaussiennes	265
A.2	Relations de commutation	265
A.3	Algèbre des matrices de Pauli	266

Avertissement

Ces notes sont encore provisoires. Certains passages n'ont pas encore été relus correctement.

Les marques @@ signifie qu'il faut compléter ou revoir le passage.

Les barres grises dans la marge, ainsi que le signe (*), signifie que le passage peut être sauté en première lecture, et sera probablement sauté lors de l'exposé.

Merci de me communiquer toute remarque ou correction (d'orthographe, d'expression, ou sur le contenu physique ou mathématique). Les remarques d'ordre pédagogique seront particulièrement les bienvenues : commentaires sur la progression pédagogique, sur les passages plus ou moins faciles à assimiler, et plus ou moins appréciés.

Ces notes ont été rédigées en utilisant le logiciel libre et gratuit **LyX** (voir <http://www.lyx.org>) sous Linux. Pour les graphiques, nous avons utilisé **xfig**. Pour les calculs numériques, nous avons utilisé entre autres la librairie graphique C++ : **root** (voir <http://root.cern.ch>). Pour certains calculs symboliques, nous avons utilisé **xcas** (logiciel libre et gratuit :

<http://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~parisse/giac.html>).

0.0.1 Introduction

0.0.1.1 But et objets de la mécanique quantique :

Le rôle de la théorie quantique est de décrire le comportement et donner les lois d'évolution des constituants microscopiques de la matière. Plus précisément, les phénomènes quantiques (que sont essentiellement des "phénomènes d'interférences" présentés plus loin) se manifestent pour des objets de petite taille Δx et/ou de petites impulsions Δp telles que

$$\Delta x \Delta p \simeq h$$

avec la **constante de Planck** :¹

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

on utilise aussi la constante appelée "h barre" :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

La théorie quantique est donc essentielle en physique des particules, nucléaire, physique atomique, moléculaire et physique du solide. Par ailleurs, comme les phénomènes macroscopiques résultent du comportement collectifs des objets microscopiques, la théorie quantique a des conséquences indirectes à l'échelle macroscopique.

Ordres de grandeurs (tiré du cours de l'X sur le Web) :

¹Remarque sur les dimensions : d'après les relations, $p = m \frac{dx}{dt}$ et $E = \frac{p^2}{2m}$, on a $p dx = \dots = 2E dt$ et on déduit que $[x] [p]$ et $[E] [t]$ ont les mêmes dimensions.

Système	Masse (kg)	Vitesse (m/s)	Ouverture a (m)	$p.a/h$
Homme passant une porte	70	1	1	10^{34}
Globule rouge dans capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{11}
Electron à travers une fente	$9 \cdot 10^{-31}$	700	10^{-6}	1

0.0.1.2 Différences et relations entre mécanique classique et mécanique quantique

- Le changement radical entre la mécanique quantique et la mécanique classique est essentiellement que en mécanique classique une particule est un **objet ponctuel** décrit par un point (\vec{x}, \vec{p}) dans l'espace des phases (position - vitesse), alors que en mécanique quantique, une particule est un **objet étendu**, décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{x})$. Une conséquence est la possibilité d'interférences. Le rôle de la mécanique est de donner les lois qui gouvernent l'évolution de ces objets. Ce sont les **équations de Hamilton** (ou Newton) dans le cas classique et de **équation de Schrödinger** dans le cas quantique.
- La théorie quantique est valable pour des constituants élémentaires ou pour une assemblée de quelques constituants (atomes molécules) tant qu'il sont "isolés" de leur environnement. On ne peut pas parler de la fonction d'onde d'une balle ou même d'une poussière qui sont des objets "macroscopiques" et non isolés. En principe une théorie complète devrait pouvoir décrire toutes les échelles de la nature. A l'heure actuelle on ne sait pas rendre compatible de façon totalement satisfaisante, la théorie quantique avec l'aspect "classique" de la nature à l'échelle macroscopique. Cela est discuté depuis longtemps, voir le paradoxe du chat de Schrödinger. Voir par exemple [Cla88],[Aro02] pour les développements récents à ce sujet.

0.0.1.3 Place de la théorie quantique en physique :

On oppose :

théorie Classique et théorie Quantique.

Théorie non relativiste et relativiste et relativité générale ;

Cela donne le tableau suivant :

(A droite et en dessous, se trouve chaque fois une théorie supposée plus générale que la précédente.)

Mécanique :	Classique	Quantique
Non relativiste	Mécanique de Newton (1687)	Mécanique quantique(1925)
Relativiste	Relativité restreinte (1905) Equations de Maxwell (1865)	Théorie Quantique des champs (≥ 1930)
Relativité Générale	Relativité générale (1916)	... ?théorie des cordes ?...

0.0.1.4 Autres remarques

- Esprit du cours : introduction à la mécanique quantique ; présentation à travers des exemples physiques autant que possible. Les notions mathématiques ne sont introduites que lorsque elles sont jugées nécessaires.

0.0.1.5 Prérequis supposés

- En mathématiques : notion d'espace vectoriel, de Transformée de Fourier.
- En physique : mécanique analytique, Hamiltonienne.
- En mécanique quantique : problèmes 1D stationnaire,..., le cours et TD de Licence.

0.0.1.6 Références conseillées :

on insiste sur l'importance de travailler le cours avec des Livres.

Livres en français : Cohen [CBF], Feynmann[Fey63], Messiah [Mes64], Basvedant [Bas86].

Livres en anglais :

- Bransden[BC89], et plus difficiles : Sakurai[J.J85], Ballentine[L.E90].

