

Daniel Baye  
Marianne Dufour  
Benjamin Fuks

# Mécanique quantique

Une introduction générale  
illustrée par des exercices résolus



**La côte de l'ouvrage : 2-530-278**

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1.1	La mécanique quantique . . . . .	1
1.2	Fondements microscopiques de la physique . . . . .	2
1.2.1	Principes fondamentaux . . . . .	2
1.2.2	Les quatre interactions fondamentales . . . . .	4
1.2.3	Les particules stables . . . . .	6
1.2.4	Lois de conservation . . . . .	8
1.3	Les systèmes composites . . . . .	9
1.3.1	Objet de la mécanique quantique . . . . .	9
1.3.2	Modèle standard . . . . .	9
1.3.3	Nucléons . . . . .	10
1.3.4	Noyaux atomiques . . . . .	11
1.3.5	Atomes . . . . .	12
1.3.6	Molécules . . . . .	13
1.4	Mécanique quantique non relativiste . . . . .	13
1.5	Plan de l'ouvrage . . . . .	14
	Exercice 1a : Les particules du corps humain . . . . .	16
	Exercice 1b : Unités de la physique nucléaire . . . . .	17
	Exercice 1c : Les neutrinos de la supernova SN1987a . . . . .	18
<b>2</b>	<b>Les origines de la physique quantique</b>	<b>21</b>
2.1	Introduction . . . . .	21
2.2	La physique microscopique au début du vingtième siècle . . . . .	22
2.3	Les spectres atomiques . . . . .	23
2.4	La constante de Planck . . . . .	26
2.4.1	Le corps noir . . . . .	26
2.4.2	Quantification du rayonnement électromagnétique . . . . .	29
2.4.3	Le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène . . . . .	33
2.5	Particules de lumière - Effet Compton . . . . .	36
2.6	Ondes de matière . . . . .	39
2.6.1	Longueur d'onde de de Broglie . . . . .	39
2.6.2	Deux expériences impliquant les ondes de matières . . . . .	40
2.7	Dualité onde-particule en mécanique quantique . . . . .	42
2.7.1	Particule classique - Onde classique . . . . .	42

2.7.2	Particule-onde quantique . . . . .	44
2.8	L'équation de Schrödinger . . . . .	46
2.8.1	Nécessité d'une équation d'onde . . . . .	46
2.8.2	Particule libre . . . . .	46
2.8.3	Onde plane . . . . .	47
2.8.4	Particule soumise à un potentiel . . . . .	48
	Exercice 2a : Lois de Wien et de Stefan-Boltzmann . . . . .	50
	Exercice 2b : Energie moyenne quantifiée d'un corps noir . . . . .	52
	Exercice 2c : Laser hélium-néon . . . . .	53
	Exercice 2d : Longueur d'onde de Compton d'un positron . . . . .	54
	Exercice 2e : Variante de quantification de l'atome de Bohr . . . . .	55
	Exercice 2f : Relations de dispersion . . . . .	55
<b>3</b>	<b>Outils mathématiques</b> . . . . .	<b>57</b>
3.1	Introduction . . . . .	57
3.2	Fonctions de la mécanique quantique . . . . .	58
3.3	Propriétés des fonctions de carré sommable . . . . .	59
3.4	Transformation de Fourier . . . . .	62
3.5	Opérateurs en mécanique quantique . . . . .	63
3.6	Opérations entre opérateurs et commutateur . . . . .	66
3.7	Fonctions propres et valeurs propres d'un opérateur . . . . .	70
3.8	Elément de matrice d'un opérateur . . . . .	73
3.9	Opérateurs hermitiques . . . . .	73
3.9.1	Définition . . . . .	73
3.9.2	Propriétés des valeurs propres et fonctions propres d'un opérateur hermitique . . . . .	76
3.10	Observables . . . . .	77
3.10.1	Définition . . . . .	77
3.10.2	Propriétés des observables qui commutent . . . . .	78
3.11	Fonction delta de Dirac . . . . .	79
3.11.1	Définition et propriétés . . . . .	79
3.11.2	Distribution de Dirac . . . . .	81
3.11.3	Fonctions propres de l'observable $\hat{x}$ . . . . .	83
	Exercice 3a : Fonctions de carré sommable . . . . .	84
	Exercice 3b : Fonctions propres . . . . .	87
	Exercice 3c : Transformées de Fourier . . . . .	89
	Exercice 3d : Exponentielle d'opérateur . . . . .	91
<b>4</b>	<b>Principes de la mécanique quantique</b> . . . . .	<b>93</b>
4.1	Introduction . . . . .	93
4.2	Postulats de la mécanique quantique . . . . .	94
4.2.1	Postulat sur l'état d'un système . . . . .	94
4.2.2	Postulats sur les mesures . . . . .	96
4.2.3	Postulat d'évolution . . . . .	99
4.3	Règle de correspondance . . . . .	99
4.4	Potentiel indépendant du temps . . . . .	101

4.4.1	Equation de Schrödinger stationnaire . . . . .	101
4.4.2	Solution générale pour un spectre discret de $H$ . . . . .	103
4.5	Principe de superposition . . . . .	103
4.6	Courant de probabilité . . . . .	105
4.7	Valeur moyenne et écart quadratique moyen d'une observable . . . . .	107
4.7.1	Valeur moyenne d'une observable . . . . .	107
4.7.2	Ecart quadratique moyen . . . . .	109
4.8	Relations d'incertitude de Heisenberg . . . . .	109
4.9	Théorème d'Ehrenfest . . . . .	111
	Exercice 4a : Superposition de deux fonctions d'onde . . . . .	114
	Exercice 4b : Superposition de deux fonctions d'onde avec des coefficients complexes . . . . .	120
	Exercice 4c : Fonctions d'onde stationnaires réelles . . . . .	121
<b>5</b>	<b>Application des postulats à des potentiels simples</b>	<b>123</b>
5.1	Introduction . . . . .	123
5.2	Etats stationnaires liés . . . . .	124
5.3	Etats stationnaires libres . . . . .	125
5.4	Potentiels continus par morceaux . . . . .	127
5.4.1	Discontinuités de première et deuxième espèce . . . . .	127
5.4.2	Conséquences d'une discontinuité sur la fonction d'onde . . . . .	128
5.5	Particule libre . . . . .	129
5.6	Particule dans une boîte . . . . .	132
5.6.1	Présentation . . . . .	132
5.6.2	$E < 0$ . . . . .	133
5.6.3	$E = 0$ . . . . .	133
5.6.4	$E > 0$ . . . . .	134
5.7	Marche de potentiel . . . . .	136
5.7.1	Présentation . . . . .	136
5.7.2	$E < 0$ . . . . .	137
5.7.3	$E = 0$ . . . . .	138
5.7.4	$0 < E < V_0$ . . . . .	138
5.7.5	$E = V_0$ . . . . .	140
5.7.6	$E > V_0$ . . . . .	141
5.8	Puits rectangulaire symétrique . . . . .	142
5.8.1	Présentation . . . . .	142
5.8.2	$-V_0 < E < 0$ . . . . .	143
5.8.3	$E > 0$ . . . . .	148
5.9	Barrière de potentiel rectangulaire . . . . .	152
5.9.1	Présentation . . . . .	152
5.9.2	$0 < E < V_0$ . . . . .	153
5.9.3	$E > V_0$ . . . . .	156
	Exercice 5a : Equivalence des exponentielles imaginaires et des fonctions trigonométriques . . . . .	158
	Exercice 5b : Marche descendante . . . . .	158

<b>6</b>	<b>Potentiels réalistes à une dimension</b>	<b>161</b>
6.1	Introduction . . . . .	161
6.2	Hypothèses sur les potentiels réalistes à une dimension . . . . .	162
6.3	Potentiel réaliste non confinant . . . . .	163
6.3.1	Présentation . . . . .	163
6.3.2	Solutions asymptotiques . . . . .	164
6.3.3	Discussion qualitative du spectre d'un hamiltonien . . . . .	166
6.4	Potentiel réaliste confinant . . . . .	172
6.5	Propriétés générales de l'équation de Schrödinger . . . . .	173
6.5.1	Théorème du wronskien . . . . .	173
6.5.2	Non dégénérescence des énergies des états liés . . . . .	174
6.5.3	Orthogonalité de fonctions d'onde d'énergies différentes . . . . .	175
6.5.4	Borne inférieure de l'énergie . . . . .	176
6.5.5	Existence d'un état lié - Nombre d'états liés . . . . .	177
6.5.6	Nombre de nœuds d'une fonction d'onde d'un état lié . . . . .	178
6.5.7	Parité d'un état lié pour un potentiel pair . . . . .	179
6.6	Traversée d'une barrière de potentiel quelconque et effet tunnel . . . . .	180
6.6.1	Probabilité de transmission à l'approximation WKB . . . . .	180
6.6.2	Traversée d'une barrière purement coulombienne . . . . .	184
6.6.3	Deux applications en physique nucléaire . . . . .	186
6.6.4	Le microscope à effet tunnel . . . . .	190
6.7	Résonances . . . . .	190
	Exercice 6a : Potentiel en $1/\cos^2(x)$ . . . . .	192
	Exercice 6b : Potentiel de Pöschl-Teller . . . . .	196
	Exercice 6c : Approximation WKB de la barrière rectangulaire . . . . .	200
	Exercice 6d : Potentiel $\delta(x)$ attractif . . . . .	202
<b>7</b>	<b>Paquets d'ondes</b>	<b>205</b>
7.1	Introduction . . . . .	205
7.2	Paquet d'ondes à une dimension . . . . .	205
7.3	Paquet d'ondes libre à une dimension . . . . .	209
7.4	Paquet d'ondes libre gaussien . . . . .	211
7.5	Approximation au premier ordre de la phase . . . . .	216
7.6	Marche de potentiel . . . . .	219
7.6.1	$0 < E < V_0$ . . . . .	220
7.6.2	$E > V_0$ . . . . .	225
7.7	Paquet d'ondes à trois dimensions . . . . .	229
	Exercice 7a : Superposition de trois ondes . . . . .	231
	Exercice 7b : Loi de Laplace-Gauss et grandeurs quantiques . . . . .	233
	Exercice 7c : Développement au premier ordre de la phase . . . . .	235
	Exercice 7d : Paquet d'ondes libre gaussien à trois dimensions . . . . .	237
	Exercice 7e : Ordres de grandeur de l'étalement d'un paquet d'ondes . . . . .	239

<b>8</b>	<b>Moment cinétique orbital</b>	<b>241</b>
8.1	Définition du moment cinétique orbital . . . . .	241
8.2	Relations de commutation . . . . .	243
8.3	Opérateur carré du moment cinétique orbital . . . . .	244
8.4	Coordonnées sphériques . . . . .	245
8.5	Moment cinétique orbital en coordonnées sphériques . . . . .	247
8.6	Quantification du moment cinétique orbital . . . . .	249
8.7	Harmoniques sphériques . . . . .	254
	Exercice 8a : Relations de commutation . . . . .	258
	Exercice 8b : Laplacien en coordonnées sphériques . . . . .	259
	Exercice 8c : Opérateurs $L_+$ et $L_-$ . . . . .	261
<b>9</b>	<b>Particule dans un potentiel central</b>	<b>265</b>
9.1	Potentiel central . . . . .	265
9.2	Equation de Schrödinger en coordonnées sphériques . . . . .	266
9.3	Séparation des variables angulaires . . . . .	267
9.4	Propriétés des solutions de l'équation radiale . . . . .	270
	9.4.1 Hypothèses sur le potentiel . . . . .	270
	9.4.2 Comportement des fonctions radiales à l'origine . . . . .	272
	9.4.3 Comportement des fonctions radiales à l'infini . . . . .	273
9.5	Propriétés des fonctions radiales d'un potentiel central . . . . .	275
	9.5.1 Propriétés générales des fonctions radiales . . . . .	275
	9.5.2 Nombre de nœuds radiaux . . . . .	278
	9.5.3 Spectre lié et spectre continu . . . . .	279
	9.5.4 Dégénérescence essentielle . . . . .	280
	9.5.5 Fonctions radiales . . . . .	281
9.6	Parité . . . . .	282
9.7	Potentiels particuliers . . . . .	284
	9.7.1 Particule dans une cavité sphérique impénétrable . . . . .	284
	9.7.2 Potentiel de Hulthén . . . . .	287
	Exercice 9a : Puits rectangulaire . . . . .	293
	Exercice 9b : Potentiel de Morse . . . . .	298
<b>10</b>	<b>L'atome d'hydrogène</b>	<b>305</b>
10.1	Introduction . . . . .	305
10.2	Potentiel coulombien attractif . . . . .	306
	10.2.1 Equation de Schrödinger et choix d'unités . . . . .	306
	10.2.2 Résolution des équations radiales . . . . .	308
	10.2.3 Fonctions d'onde . . . . .	311
10.3	Equation de Schrödinger d'un système de $N$ particules . . . . .	313
10.4	Interprétation de la fonction d'onde de plusieurs particules . . . . .	315
10.5	Système de deux particules . . . . .	316
10.6	Atome d'hydrogène . . . . .	320
10.7	Systèmes hydrogénoïdes . . . . .	321
10.8	Etats de Rydberg . . . . .	322

Exercice 10a : Masse de l'atome d'hydrogène . . . . .	324
Exercice 10b : La découverte du deutérium . . . . .	324
Exercice 10c : Rayons de l'état fondamental d'un atome hydrogénoïde . . .	325
Exercice 10d : Théorème du viriel et vitesse de l'électron . . . . .	327
Exercice 10e : Normalisation des fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène .	330
<b>11 Oscillateurs harmoniques</b>	<b>335</b>
11.1 Introduction . . . . .	335
11.2 Oscillateur harmonique à une dimension . . . . .	336
11.2.1 Hamiltonien et système d'unités . . . . .	336
11.2.2 Résolution de l'équation de Schrödinger . . . . .	337
11.2.3 Opérateurs de création et d'annihilation . . . . .	342
11.2.4 Quantification avec $a$ et $a^\dagger$ . . . . .	343
11.3 Oscillateur harmonique à deux dimensions . . . . .	347
11.3.1 Coordonnées cartésiennes . . . . .	347
11.3.2 Coordonnées polaires . . . . .	350
11.3.3 Comparaison des fonctions d'onde . . . . .	354
11.4 Oscillateur harmonique à $d$ dimensions . . . . .	355
Exercice 11a : Théorème du viriel . . . . .	357
Exercice 11b : Oscillateur harmonique à trois dimensions . . . . .	359
Exercice 11c : Spectre de vibration d'une molécule diatomique . . . . .	362
Exercice 11d : Paquet d'ondes lié . . . . .	365
Exercice 11e : Normalisation des fonctions d'onde à une dimension . . . . .	368
<b>12 Le spin</b>	<b>371</b>
12.1 Introduction . . . . .	371
12.2 Fonction hamiltonienne dans un champ magnétique . . . . .	372
12.3 Opérateur hamiltonien dans un champ magnétique . . . . .	374
12.4 Effet Zeeman normal et anormal . . . . .	377
12.5 Expérience de Stern et Gerlach . . . . .	379
12.6 Spin $1/2$ . . . . .	380
12.7 Définition et propriétés générales d'un moment cinétique . . . . .	384
12.8 Composition de deux spins $1/2$ . . . . .	386
12.9 Composition de deux moments cinétiques . . . . .	391
12.10 Moment cinétique total d'un système . . . . .	393
12.11 Moment cinétique total d'un électron . . . . .	394
12.12 Structure fine de l'atome d'hydrogène . . . . .	395
12.13 Structure hyperfine de l'atome d'hydrogène . . . . .	399
12.14 Bosons et fermions . . . . .	400
Exercice 12a : Interprétation naïve du spin . . . . .	402
Exercice 12b : Particule chargée dans un champ magnétique uniforme . . .	403
Exercice 12c : Spin d'orientation quelconque . . . . .	405
Exercice 12d : Spin 1 . . . . .	408
Exercice 12e : Spineurs sphériques . . . . .	410

<b>13 Difficultés d'interprétation de la mécanique quantique</b>	<b>415</b>
13.1 Introduction . . . . .	415
13.2 Que représente la fonction d'onde? . . . . .	416
13.3 Le rôle de l'observateur . . . . .	417
13.3.1 Le postulat de réduction de la fonction d'onde . . . . .	417
13.3.2 Les types de mesures . . . . .	417
13.3.3 La nature de l'observateur . . . . .	417
13.3.4 Frontière entre système observé et observateur . . . . .	418
13.4 Le chat de Schrödinger et les ordinateurs quantiques . . . . .	418
13.4.1 Expérience par la pensée de Schrödinger . . . . .	418
13.4.2 Ordinateurs quantiques . . . . .	420
13.4.3 La décohérence . . . . .	421
13.4.4 Expériences avec des "chats de Schrödinger" très simplifiés . . . . .	421
13.5 Les inégalités de Bell . . . . .	422
13.5.1 L'article EPR . . . . .	422
13.5.2 L'hypothèse des variables cachées . . . . .	422
13.5.3 Les curieuses propriétés d'une fonction d'onde de deux particules de spin 1/2 . . . . .	424
13.5.4 Une explication par des variables cachées? . . . . .	426
13.5.5 Inégalités de Wigner . . . . .	427
13.5.6 Inégalités de Bell . . . . .	429
13.5.7 Théorème de Bell . . . . .	432
13.5.8 Vérifications expérimentales . . . . .	432
13.6 L'onde pilote . . . . .	433
13.7 Que conclure? . . . . .	435
Exercice 13a : Propriétés d'un état de spin total 0 de deux particules de spin 1/2 . . . . .	436
Exercice 13b : Probabilités de mesures des orientations des spins . . . . .	437
Exercice 13c : Valeur moyenne de mesures des orientations des spins . . . . .	439
Exercice 13d : Potentiel quantique de l'onde pilote . . . . .	440
<b>14 Mécanique quantique relativiste</b>	<b>445</b>
14.1 Introduction . . . . .	445
14.2 Quelques notions de relativité restreinte . . . . .	446
14.2.1 Cinématique relativiste et transformations de Lorentz . . . . .	446
14.2.2 Dynamique classique relativiste . . . . .	448
14.3 Equation de Klein-Gordon . . . . .	450
14.3.1 Règle de correspondance dans le cas relativiste . . . . .	450
14.3.2 Equation de Klein-Gordon d'une particule libre . . . . .	450
14.3.3 Fonction d'onde libre . . . . .	451
14.3.4 Densité et courant de probabilité . . . . .	451
14.3.5 Interprétation des solutions de l'équation de Klein-Gordon . . . . .	453
14.3.6 Particule en interaction . . . . .	454
14.4 Equation de Dirac . . . . .	455
14.4.1 Equation de Dirac d'une particule libre . . . . .	455



14.4.2	Spineurs de Dirac d'une particule libre . . . . .	457
14.4.3	Densité et courant de probabilité . . . . .	459
14.4.4	Particule en interaction . . . . .	460
14.4.5	Limite non relativiste de l'équation de Dirac . . . . .	460
14.4.6	Spectre relativiste des atomes hydrogénoïdes . . . . .	462
14.4.7	Mer de Dirac et création de paires . . . . .	468
14.5	Conclusion . . . . .	469
	Exercice 14a : Particule scalaire dans un potentiel coulombien . . . . .	471
	Exercice 14b : Equation relativiste à une dimension . . . . .	474
	Exercice 14c : Marche de potentiel et paradoxe de Klein . . . . .	475
	Exercice 14d : Commutation du moment cinétique avec $H_D$ . . . . .	479
<b>Compléments mathématiques</b>		<b>481</b>
C1	Fonction d'une variable réelle . . . . .	481
	C1.1 Définitions . . . . .	481
	C1.2 Interprétation géométrique des dérivées . . . . .	482
C2	Equations et problèmes différentiels . . . . .	483
C3	Problèmes auto-adjoints . . . . .	485
C4	Points singuliers . . . . .	486
C5	Fonctions élémentaires . . . . .	487
	C5.1 Exponentielle et logarithme . . . . .	487
	C5.2 Fonctions trigonométriques . . . . .	489
	C5.3 Fonctions hyperboliques . . . . .	491
C6	Fonction gamma d'Euler . . . . .	492
C7	Polynômes orthogonaux . . . . .	493
	C7.1 Généralités . . . . .	493
	C7.2 Polynômes de Legendre . . . . .	494
	C7.3 Polynômes d'Hermite . . . . .	496
	C7.4 Polynômes de Laguerre . . . . .	497
C8	Fonctions de Bessel sphériques . . . . .	499
C9	Fonction hypergéométrique confluyente . . . . .	500
C10	Equations et problèmes aux dérivées partielles . . . . .	501
C11	Méthode de séparation des variables . . . . .	502
C12	Espace de Hilbert . . . . .	503
<b>Conseils de lecture</b>		<b>505</b>
<b>Index</b>		<b>507</b>