

Tome I

I	ONDES ET PARTICULES. INTRODUCTION AUX IDÉES FONDAMENTALES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE	1
A	Ondes électromagnétiques et photons	3
B	Corpuscules matériels et ondes de matière	10
C	Description quantique d'une particule. Paquets d'ondes	14
D	Particule dans un potentiel scalaire indépendant du temps	24
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	35
A_I	Ordre de grandeur des longueurs d'onde	37
B_I	Contraintes imposées par la relation de Heisenberg	41
1	Système macroscopique	41
2	Système microscopique	41
C_I	Relation de Heisenberg et paramètres atomiques	43
D_I	Une expérience illustrant la relation de Heisenberg	47
E_I	Paquet d'ondes à deux dimensions	51
1	Introduction	51
2	Dispersion angulaire et dimensions latérales	51
3	Discussion physique	53
F_I	Lien entre les problèmes à une et à trois dimensions	55
1	Paquet d'ondes à trois dimensions	55
2	Justification des modèles à une dimension	58
G_I	Paquet d'ondes gaussien	59
1	Définition d'un paquet d'ondes gaussien	59
2	Calcul de Δx et Δp ; relation de Heisenberg	61
3	Evolution du paquet d'ondes	61
H_I	Potentiels carrés à une dimension	65
1	Comportement d'une fonction d'onde stationnaire $\varphi(x)$	65
2	Étude de certains cas simples	67
J_I	Paquet d'ondes dans une marche de potentiel	77
1	Réflexion totale : $E < V_0$	77
2	Réflexion partielle : $E > V_0$	81
K_I	Exercices	85

II LES OUTILS MATHÉMATIQUES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE	89
A Espace des fonctions d'onde d'une particule	90
B Espace des états. Notations de Dirac	104
C Représentations dans l'espace des états	118
D Equation aux valeurs propres. Observables	128
E Deux exemples importants de représentations et d'observables	141
F Produit tensoriel d'espaces d'états	150
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	161
A_{II} Inégalité de Schwarz	163
B_{II} Rappel de quelques propriétés utiles des opérateurs linéaires	165
1 Trace d'un opérateur	165
2 Algèbre des commutateurs	167
3 Restriction d'un opérateur à un sous-espace	167
4 Fonctions d'opérateurs	168
5 Dérivation d'un opérateur	171
C_{II} Opérateurs unitaires	175
1 Propriétés générales des opérateurs unitaires	175
2 Transformation unitaire sur les opérateurs	179
3 Opérateur unitaire infinitésimal	180
D_{II} Etude plus détaillée des représentations $\{ r\rangle\}$ et $\{ p\rangle\}$	183
1 Représentation $\{ r\rangle\}$	183
2 Représentation $\{ p\rangle\}$	186
E_{II} Quelques propriétés générales de deux observables Q et P dont le commutateur est égal à $i\hbar$	189
1 Opérateur $S(\lambda)$: définition, propriétés	189
2 Valeurs propres et vecteurs propres de Q	190
3 Représentation $\{ q\rangle\}$	191
4 Représentation $\{ p\rangle\}$. Symétrie entre les observables P et Q	192
F_{II} Opérateur parité	195
1 Etude de l'opérateur parité	195
2 Opérateurs pairs et impairs	198
3 Etats propres d'une observable B_+ paire	201
4 Application à un cas particulier important	201
G_{II} Application des propriétés du produit tensoriel; puits infini à deux dimensions	203
1 Définition; états propres	203
2 Etude des niveaux d'énergie	204
H_{II} Exercices	207

III	LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE	215
A	Introduction	215
B	Enoncé des postulats	217
C	Interprétation physique des postulats sur les observables et leur mesure	229
D	Contenu physique de l'équation de Schrödinger	239
E	Principe de superposition et prévisions physiques	256
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	271
A_{III}	Particule dans un puits de potentiel infini : étude physique	275
1	Répartition des valeurs de l'impulsion dans un état stationnaire	275
2	Evolution de la fonction d'onde de la particule	279
3	Perturbation apportée par une mesure de la position	283
B_{III}	Etude du courant de probabilité dans quelques cas particuliers	287
1	Expression du courant dans des régions où le potentiel est constant . . .	287
2	Application aux problèmes de marches de potentiel	288
3	Courant de probabilité des ondes incidente et évanescence, dans le cas d'une réflexion sur une marche de potentiel à deux dimensions . . .	289
C_{III}	Ecarts quadratiques moyens de deux observables conjuguées	293
1	Relation de Heisenberg pour P et Q	293
2	Paquet d'ondes "minimum"	294
D_{III}	Mesures portant sur une partie d'un système physique	297
1	Calcul des prévisions physiques	297
2	Signification physique d'un état produit tensoriel	299
3	Signification physique d'un état qui n'est pas un produit tensoriel . . .	300
E_{III}	L'opérateur densité	303
1	Position du problème	303
2	Notion de mélange statistique d'états	303
3	Cas pur. Introduction de l'opérateur densité	305
4	Mélange statistique d'états (cas non pur)	308
5	Exemples d'utilisation de l'opérateur densité	312
F_{III}	Opérateur d'évolution	317
1	Propriétés générales	317
2	Cas des systèmes conservatifs	319
G_{III}	Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg	321
H_{III}	Invariance de jauge	325
1	Position du problème : potentiels scalaire et vecteur associés à un champ électromagnétique ; notion de jauge	325
2	Invariance de jauge en mécanique classique	326
3	Invariance de jauge en mécanique quantique	331

J_{III}	Propagateur de l'équation de Schrödinger	339
1	Introduction. Idée physique	339
2	Existence et propriétés d'un propagateur $K(2,1)$	340
3	Formulation lagrangienne de la mécanique quantique	343
K_{III}	Niveaux instables. Durée de vie	347
1	Introduction	347
2	Définition de la durée de vie	348
3	Description phénoménologique de l'instabilité d'un niveau	349
L_{III}	Exercices	351
M_{III}	Etats liés dans un "puits de potentiel" de forme quelconque	363
1	Quantification de l'énergie des états liés	363
2	Valeur minimale de l'énergie du niveau fondamental	367
N_{III}	Etats non liés d'une particule en présence d'un puits ou d'une barrière de potentiel de forme quelconque	371
1	Matrice de transmission $M(k)$	372
2	Coefficients de transmission et de réflexion	376
3	Exemple	377
O_{III}	Propriétés quantiques d'une particule dans une structure périodique à une dimension	379
1	Traversée successive de plusieurs barrières de potentiel identiques	380
2	Discussion physique : notion de bande d'énergie permise ou interdite . .	386
3	Quantification des niveaux d'énergie dans un potentiel de structure pé- riodique ; effet des conditions aux limites	388

IV	APPLICATION DES POSTULATS À DES CAS SIMPLES :	
	SPIN 1/2 ET SYSTÈMES À DEUX NIVEAUX	397
A	Particule de spin 1/2 : quantification du moment cinétique	398
B	Illustration des postulats sur le cas d'un spin 1/2	405
C	Etude générale des systèmes à deux niveaux	416
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	427
A_{IV}	Les matrices de Pauli	429
1	Définition ; valeurs propres et vecteurs propres	429
2	Propriétés simples	430
3	Une base commode de l'espace des matrices 2×2	431
B_{IV}	Diagonalisation d'une matrice hermitique 2×2	433
1	Introduction	433
2	Changement d'origine pour le repérage des valeurs propres	433
3	Calcul des valeurs propres et vecteurs propres	435

C_{IV}	Spin fictif 1/2 associé à un système à deux niveaux	439
1	Introduction	439
2	Interprétation de l'hamiltonien en termes de spin fictif	439
3	Interprétation géométrique	441
D_{IV}	Système de deux spins 1/2	445
1	Description quantique	445
2	Prédiction des résultats de mesure	448
E_{IV}	Matrice densité d'un spin 1/2	453
1	Introduction	453
2	Matrice densité d'un spin parfaitement polarisé (cas pur)	453
3	Exemple de mélange statistique : spin non polarisé	454
4	Spin 1/2 à l'équilibre thermodynamique dans un champ statique	456
5	Décomposition de la matrice densité sur les matrices de Pauli	457
F_{IV}	Résonance magnétique	459
1	Traitement classique ; référentiel tournant	459
2	Traitement quantique	462
3	Lien entre le traitement classique et le traitement quantique : évolution de $\langle \mathbf{M} \rangle$	467
4	Equations de Bloch	467
G_{IV}	Modèle simple pour la molécule d'ammoniac	473
1	Description du modèle	473
2	Fonctions propres et valeurs propres de l'hamiltonien	475
3	La molécule d'ammoniac considérée comme un système à deux niveaux	482
H_{IV}	Effets d'un couplage entre un état stable et un état instable	489
1	Introduction. Notations	489
2	Influence d'un couplage faible sur des niveaux d'énergies différentes	490
3	Influence d'un couplage quelconque sur des niveaux de même énergie	491
J_{IV}	Exercices	495

V	L'OSCILLATEUR HARMONIQUE À UNE DIMENSION	501
A	Introduction	501
B	Valeurs propres de l'hamiltonien	507
C	Etats propres de l'hamiltonien	514
D	Discussion physique	521
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS		529
A_V	Etude de quelques exemples physiques d'oscillateurs harmoniques	531
1	Vibration des noyaux d'une molécule diatomique	531
2	Vibration des noyaux dans un cristal	538
3	Oscillations de torsion d'une molécule : exemple de l'éthylène	540
4	Atomes muoniques lourds	546

B_V	Etude des états stationnaires en représentation $\{ x\rangle\}$. Polynômes d’Hermite	551
1	Les polynômes d’Hermite	551
2	Les fonctions propres de l’hamiltonien de l’oscillateur harmonique . . .	554
C_V	Résolution de l’équation aux valeurs propres de l’oscillateur harmonique par la méthode polynomiale	559
1	Changement de fonction et de variable	559
2	Méthode polynomiale	561
D_V	Etude des états stationnaires en représentation $\{ p\rangle\}$	567
1	Fonctions d’onde dans l’espace des impulsions	567
2	Discussion physique	570
E_V	L’oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	573
1	L’opérateur hamiltonien	573
2	Séparation des variables en coordonnées cartésiennes	574
3	Dégénérescence des niveaux d’énergie	576
F_V	Oscillateur harmonique chargé placé dans un champ électrique uniforme	579
1	Equation aux valeurs propres de $H'(\mathcal{E})$ en représentation $\{ x\rangle\}$	580
2	Discussion physique	581
3	Utilisation de l’opérateur translation	583
G_V	Etats cohérents “quasi classiques” de l’oscillateur harmonique	587
1	Recherche des états quasi classiques	588
2	Propriétés des états $ \alpha\rangle$	592
3	Evolution d’un état quasi classique au cours du temps	599
4	Exemple d’application : étude quantique d’un oscillateur macroscopique	601
H_V	Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques couplés	603
1	Vibrations des deux particules en mécanique classique	603
2	Etats de vibration du système en mécanique quantique	609
J_V	Modes de vibration d’une chaîne linéaire indéfinie d’oscillateurs harmoniques couplés ; phonons	615
1	Etude classique	616
2	Etude quantique	626
3	Application à l’étude des vibrations dans un cristal : les phonons	630
K_V	Modes de vibration d’un système physique continu. Application au rayonnement ; photons	635
1	Position du problème	635
2	Modes de vibration d’un système mécanique continu : exemple de la corde vibrante	636
3	Modes de vibration du rayonnement : les photons	643

L_V	Oscillateur harmonique à une dimension en équilibre thermodynamique à la température T	651
1	Energie moyenne	652
2	Discussion physique	654
3	Applications	655
4	Distribution de probabilité de l'observable X	659
M_V	Exercices	667

VI	MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE	673
A	Introduction : importance du moment cinétique	673
B	Relations de commutation caractéristiques des moments cinétiques . . .	675
C	Théorie générale du moment cinétique	678
D	Application au moment cinétique orbital	691
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	709
A_{VI}	Les harmoniques sphériques	711
1	Calcul des harmoniques sphériques	711
2	Propriétés des harmoniques sphériques	716
B_{VI}	Moment cinétique et rotations	723
1	Introduction	723
2	Etude succincte des rotations géométriques \mathcal{R}	724
3	Opérateurs de rotation dans l'espace des états. Exemple d'une particule sans spin	726
4	Opérateurs de rotation dans l'espace des états d'un système quelconque	733
5	Rotation des observables	736
6	L'invariance par rotation	740
C_{VI}	Rotation des molécules diatomiques	745
1	Introduction	745
2	Rotateur rigide. Etude classique	746
3	Quantification du rotateur rigide	747
4	Manifestations expérimentales de la rotation des molécules	752
D_{VI}	Moment cinétique des états stationnaires d'un oscillateur harmonique à deux dimensions	761
1	Introduction	761
2	Classification des états stationnaires au moyen des nombres quantiques n_x et n_y	765
3	Classification des états stationnaires en fonction de leur moment cinétique	767
4	Etats quasi classiques	771

E_{VI} Particule chargée dans un champ magnétique. Niveaux de Landau	777
1 Rappels classiques	777
2 Propriétés quantiques générales d'une particule dans un champ magnétique	782
3 Cas où le champ magnétique est uniforme	785
F_{VI} Exercices	801

VII PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL. ATOME D'HYDROGÈNE	809
A Etats stationnaires d'une particule dans un potentiel central	810
B Mouvement du centre de masse et mouvement relatif pour un système de deux particules en interaction	819
C L'atome d'hydrogène	824
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	839
A_{VII} Systèmes hydrogénéoïdes	841
1 Systèmes hydrogénéoïdes comprenant un électron	842
2 Systèmes hydrogénéoïdes sans électron	847
B_{VII} Exemple soluble de potentiel central : l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	851
1 Résolution de l'équation radiale	852
2 Niveaux d'énergie et fonctions d'onde stationnaires	854
C_{VII} Courants de probabilité associés aux états stationnaires de l'atome d'hydrogène	861
1 Expression générale du courant de probabilité	861
2 Application aux états stationnaires de l'atome d'hydrogène	862
D_{VII} Atome d'hydrogène plongé dans un champ magnétique uniforme. Paramagnétisme et diamagnétisme. Effet Zeeman	865
1 Hamiltonien du problème. Terme paramagnétique et terme diamagnétique	866
2 Effet Zeeman	872
E_{VII} Etude de quelques orbitales atomiques. Orbitales hybrides	879
1 Introduction	879
2 Orbitales atomiques associées à des fonctions d'onde réelles	880
3 Hybridation sp	886
4 Hybridation sp^2	888
5 Hybridation sp^3	892
F_{VII} Niveaux de vibration-rotation des molécules diatomiques	895
1 Introduction	895
2 Résolution approchée de l'équation radiale	896
3 Evaluation de quelques corrections	902

G_{VII} Exercices	909
1 Particule dans un potentiel à symétrie cylindrique	909
2 Oscillateur harmonique à trois dimensions dans un champ magnétique uniforme	909

INDEX	911
--------------	------------