

# MÉCANIQUE QUANTIQUE

Resp. : david.lopes\_cardozo@ens-lyon.fr

ENS de Lyon, agrégation de physique 2017-2018

## Introduction : quelques mots sur le programme

Les objectifs de ce cours sont de préparer aux écrits et aux oraux de l'agrégation de physique-chimie option physique. Le programme officiel couvre ceux de mécanique quantique de lycée et de classes préparatoires scientifiques, plus un certain nombre de notions listées ci-dessous. Ces notions pourront apparaître dans l'épreuve A des écrits et seront nécessaires à la préparation d'une dizaine de leçons de physique (voir liste ci-dessous). L'épreuve C (et la chimie) pourrait également porter sur ces sujets mais aussi sur des notions hors-programme : vous êtes donc invités à approfondir vos connaissances de manière assez large et à consulter les annales. Ce cours a pour but avant tout de reprendre les bases de la mécanique quantique : pour pouvoir notamment

- situer la mécanique quantique et la relativité restreinte par rapport aux théories dites "classiques",
- maîtriser les notions de fonctions d'onde et mener à bien des calculs de mécanique ondulatoire (puits de potentiels, barrière de potentiel ...),
- connaître et manipuler les éléments mathématiques de la mécanique quantique (espaces de Hilbert, bracket, opérateurs ...),
- manipuler des moments cinétiques en mécanique quantique, notamment dans un champ magnétique ...

Faisons un petit point sur le programme de mécanique quantique pour la session 2016 de l'agrégation de physique. Ceci n'est pas exhaustif, seulement indicatif. D'abord, la mécanique quantique au programme dans les Lycées.

### — **Première S :**

- Transferts quantiques d'énergie, émission absorption quantiques, transitions d'énergie électroniques ou vibratoires : en somme des notions permettant d'aborder les lasers (*ne sera pas abordé ici*).
- Dualité onde-particule, photon et onde lumineuse, particule matérielle et onde de matière, interférences quantiques : approches documentaires et utilisation de  $p = h/\lambda$ .

### — **MPSI,PTSI :** Approche avant tout qualitative.

- Dualité onde-particule, relations de Planck-Einstein et de Broglie : approches documentaires et ordres de grandeur.
- Quantification de l'énergie d'une particule confinée 1D : analogie avec modes propres classiques.

### — **PCSI :** Approche avant tout qualitative, programme de MPSI, PTSI plus :

- Interprétation probabiliste associée à la fonction d'onde : interpréter une expérience d'interférences quantiques.
- Inégalité de Heisenberg spatiale, la lier à l'énergie minimale introduite par le confinement : énergie minimale de l'OH quantique.

### — **BCPST :** Radioactivité, structure électronique des atomes et chimie (voir aussi les autres sections en première année, ces notions seront peu ou pas abordées ici).

### — **MP :** Approche quantitative et exemples simples à résoudre.

- Fonction d'onde et équation de Schrödinger, cas sans spin et 1D dans un potentiel  $V(x)$ , distinguer résultats classiques et quantiques, états stationnaires de Schrödinger ...
- Particule libre, Relation de de Broglie, Inégalité d'Heisenberg spatiale et paquet d'onde, Densité de courant de probabilité associée à une particule libre.

- États stationnaires d'une particule dans des potentiels constants par morceaux, marche de potentiel (cas  $E > V$  : probabilité de transmission et de réflexion, cas  $E < V$  : évanescence), barrière de potentiel et effet tunnel, états stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel infini, énergie de confinement.
- États non stationnaires d'une particule, combinaison linéaire d'états stationnaires (approche numérique).
- **PC** : Approche quantitative, assez proche de MP.
- Introduction à la physique du laser (*ne sera pas abordé ici*)
- Amplitude de probabilité, fonction d'onde  $\psi(x, t)$  associée à une particule dans un problème unidimensionnel, densité linéique de probabilité, principe de superposition, interférences.
- Équation de Schrödinger pour une particule libre. États stationnaires. Paquet d'ondes associé à une particule libre. Relation  $\Delta k_x \Delta x \geq 1/2$ . Courant de probabilité associé à une particule libre.
- Équation de Schrödinger dans un potentiel  $V(x)$  uniforme par morceaux. Quantification de l'énergie dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie. Énergie de confinement quantique. Quantification de l'énergie des états liés dans un puits de profondeur finie.
- Élargissement effectif du puits par les ondes évanescentes.
- Effet tunnel. Notions sur l'effet tunnel. Coefficient de transmission associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel (approche documentaire sur microscopie et radioactivité).
- Approche descriptive : Double puits symétrique. Étude des deux premiers états stationnaires : symétrique et antisymétrique. Évolution temporelle d'une superposition de ces deux états (molécule d'ammoniac). Lien avec la chimie.

#### A l'agrégation, s'ajoutent aux programmes ci-dessus les aspects suivants :

- **Physique atomique et subatomique.**
  1. Quantification de l'énergie et du moment cinétique.
    - Effet photoélectrique.
    - Atome d'hydrogène ; atome hydrogénoïde ; atome à plusieurs électrons dans l'approximation du champ central ; notion de configuration électronique.
    - Expérience de Stern et Gerlach ; effet Zeeman ; couplage spin orbite ; résonance magnétique.
  2. Notions sur la structure et la stabilité des noyaux et sur les applications de l'énergie nucléaire. (*ne sera pas abordé ici*)
  3. Notions sur les grandes catégories de particules élémentaires et leurs interactions. (*ne sera pas abordé ici*)
- **Mécanique quantique à proprement parler.**
  1. Formalisme
    - Formalisme des fonctions d'ondes. Formalisme de Dirac (notation bra-ket). État d'un système, grandeurs physiques et observables, mesure des grandeurs physiques, état d'un système après la mesure.
    - Système à deux états couplés.
    - Évolution des systèmes : équation de Schrödinger.
    - Système de particules identiques, principe de Pauli.
  2. Applications
    - Potentiels carrés à une dimension.
    - Oscillateur harmonique.
    - Moment cinétique orbital et de spin. Règles de composition des moments cinétiques.
    - Particule dans un potentiel central : atome d'hydrogène.
    - Notion de probabilité de transition.
- **Éléments de physique du solide.** (*ne sera pas abordé ici*).
  - Structure de bandes des solides cristallins.
  - Notions de base de cristallographie ; réseau réciproque ; diffraction des rayons X.
  - Métaux, isolants, semi-conducteurs.
  - Mécanismes de conduction électrique et thermique.
  - Diamagnétisme, paramagnétisme, ferromagnétisme.

- Supraconductivité.
- Capacités thermiques.

**Les leçons de physique au programme nécessitant des connaissances en mécanique quantique sont principalement :**

- 4. Précession dans les domaines macroscopique et microscopique.
- 37. Absorption et émission de la lumière. (*ne sera pas abordé ici*)
- 38. Aspects corpusculaires du rayonnement. Notion de photon.
- 39. Aspects ondulatoires de la matière. Notion de fonction d'onde.
- 40. Confinement d'une particule et quantification de l'énergie.
- 41. Effet tunnel.
- 42. Fusion, fission. (*ne sera pas abordé en détail ici*)
- 43. Évolution temporelle d'un système quantique à deux niveaux.

**Pour vous entraîner et voir à quoi ressemble la mécanique quantique aux écrits de l'agrégation :**

- épreuves A 2015 (1/5 de l'épreuve : microscope à effet tunnel), 2013 (1/3 de l'épreuve : preuves de l'existence du photon),
- épreuves C 2017 (1/3 de l'épreuve : fonctionnement d'une horloge atomique), 2016 (symétrie de jauge), 2014 (optique atomique guidée), 2009 (1/3 de l'épreuve : couplage entre états quantiques), 2004 (toute l'épreuve : conducteurs quantiques, effet Hall, électronique à un électron),

disponibles sur le site [www.agregation-physique.org](http://www.agregation-physique.org), ainsi que des corrigés.

### Bibliographie :

- Basdevant et Dalibard. Mécanique quantique. (Le classique qui se rapproche le plus d'un manuel. Pédagogique et concis.)
- Aslangul. Mécanique quantique. (Très détaillé, notamment sur les expériences historiques. Peut-être plus adapté à une seconde lecture.)
- Cohen-Tannoudji, Diu et Laloë. Mécanique quantique. (Un ouvrage de référence assez formel mais clair. Complet, détaillé, va droit au but.)
- Le Bellac. Physique quantique. (Notez l'originalité dans le titre. Pédagogique mais très bien aussi comme ouvrage d'approfondissement.)
- Cagnac, Tchang-Brillet, Pebay-Péroula. Physique Atomique 1. (De nombreuses expériences sont discutées, dont la plupart de celles mentionnées dans ce cours.)

### Bibliographie complémentaire :

- Pietryk. Panorama de la Physique. (Un bel ouvrage donnant un aperçu rapide et clair de points chauds de la physique moderne.)
- EJP et arXiv : *A black body is not a black box* de Matteo Smerlak,
- Kimble et al, PRL 39, 691-695 (1977) ; Grangier et al, EPL 1 (4) (1986) ; Thorne et al, Am. J. Phys. 72 9 (2004),
- [toutestquantique.fr](http://toutestquantique.fr),
- W. Appel : Mathématiques pour la physique et les physiciens,
- *The W.K.B. Approximation as the First Term of a Geometric-Optical Series*, H. Bremmer, Comm. Pure Appl. Math. 4 (1) p. 105 (1951),
- BUP vol. 85 (mai 1991) L'effet tunnel quelques applications ; BUP n°699 Le microscope à effet tunnel ; L. Aigouy, Y. De Wilde, C. Fretigny, Les nouvelles microscopies : à la découverte du nanomonde.
- Sextant, Optique Expérimentale.
- C. Garing, Ondes électromagnétiques.
- H.Kragh, *Max Planck : the reluctant revolutionary*, in Physics World.

Je tiens à remercier chaleureusement Arnaud Le Diffon, qui donnait ce cours avant moi et m'a transmis ses notes personnelles, qui ont aidé à la composition de mon cours, surtout dans les premiers chapitres.

Remerciements chaleureux également pour des relectures attentives à Loren Jørgensen et Robin Guichardaz et pour les discussions éclairées (et éclairantes) avec Michel Fruchart et Pierre Lidon.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Quelques aspects historiques et expérimentaux à l'origine de la mécanique quantique</b>	<b>7</b>
1.1	Aspect corpusculaire du rayonnement . . . . .	8
1.1.1	Le corps noir : une catastrophe ultraviolette empêchée par la quantification . . . . .	8
1.1.2	Effet photoélectrique et preuves de l'existence du photon . . . . .	10
1.1.3	Caractéristiques d'un photon . . . . .	13
1.2	Aspect ondulatoire de la matière . . . . .	14
1.2.1	Quantification des niveaux d'énergie . . . . .	14
1.2.2	Hypothèse de de Broglie . . . . .	16
1.2.3	Diffraction de particules . . . . .	17
1.3	Des effets sans analogue classique : le spin et la mesure en mécanique quantique . . . . .	18
1.3.1	Un degré de liberté supplémentaire : le spin . . . . .	18
1.3.2	Statistiques fermioniques et bosoniques . . . . .	19
1.3.3	Le problème de la mesure en mécanique quantique . . . . .	19
<b>2</b>	<b>Approche ondulatoire de la mécanique quantique</b>	<b>21</b>
2.1	Interférences de matière et interprétation probabiliste . . . . .	21
2.1.1	Fentes d'Young éclairées par une onde plane monochromatique . . . . .	21
2.1.2	Fentes d'Young bombardées par des particules de matière . . . . .	21
2.1.3	Interprétation probabiliste . . . . .	22
2.2	Fonction d'onde et équation de Schrödinger. . . . .	23
2.2.1	Construction et évolution de la fonction d'onde . . . . .	23
2.2.2	Paquets d'ondes . . . . .	24
2.2.3	Évolution de la fonction d'onde et propagateur pour une particule libre . . . . .	26
2.2.4	Étalement du paquet d'onde et retour sur les fentes d'Young . . . . .	27
2.2.5	Courant de probabilité. . . . .	27
2.3	Exemples d'application de la mécanique ondulatoire . . . . .	29
2.3.1	Particule dans un potentiel scalaire indépendant du temps . . . . .	29
2.3.2	Exemple de la marche de potentiel . . . . .	29
2.3.3	Effet tunnel . . . . .	32
2.3.4	L'effet tunnel : un effet ondulatoire classique . . . . .	33
2.3.5	Applications de l'effet tunnel . . . . .	33
2.4	Particule confinée. . . . .	35
2.4.1	Incertitude de Heisenberg et stabilité de l'atome . . . . .	35
2.4.2	États liés et états de diffusion . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Postulats de la mécanique quantique et formalisme de Dirac</b>	<b>41</b>
3.1	Les postulats de la mécanique quantique . . . . .	41
3.1.1	Vecteurs d'état . . . . .	41
3.1.2	Grandeurs physique . . . . .	42
3.1.3	Évolution temporelle . . . . .	43

3.1.4	Observables en mécanique classique : passage à la MQ . . . . .	44
3.1.5	Principe de correspondance et commutation des observables . . . . .	45
3.1.6	Lien avec la mécanique ondulatoire . . . . .	45
3.1.7	Hamiltonien d'une particule dans un potentiel vecteur : champ électromagnétique . . . . .	46
3.2	Système à deux états couplés . . . . .	47
3.2.1	Modélisation de la molécule d'ammoniac : espace de Hilbert à deux dimensions . . . . .	47
3.2.2	Effet d'un champ électrique . . . . .	49
3.2.3	Champ oscillant et effet Maser . . . . .	50
3.3	Oscillateur harmonique et quantification du champ électromagnétique . . . . .	52
3.3.1	Oscillateur harmonique quantique et opérateurs de création/annihilation . . . . .	52
3.3.2	Quantification du champ électromagnétique . . . . .	54
3.4	Relation d'incertitude temps/énergie . . . . .	55
3.4.1	Inégalité d'Heisenberg généralisée . . . . .	55
3.4.2	Inégalité d'Heisenberg temporelle . . . . .	55
3.4.3	Largeur de raie et durée de vie d'un état excité . . . . .	56
<b>4</b>	<b>Moment cinétique et spin</b>	<b>57</b>
4.1	Moment cinétique . . . . .	57
4.1.1	Un degré de liberté supplémentaire : le spin . . . . .	57
4.1.2	Construction d'une base . . . . .	57
4.1.3	Définition du moment cinétique . . . . .	58
4.1.4	Propriétés et quantification du moment cinétique . . . . .	58
4.1.5	Cas du moment cinétique orbital . . . . .	59
4.1.6	Moment cinétique et moment magnétique . . . . .	60
4.1.7	Spin du photon . . . . .	61
4.2	Spin $1/2$ et expérience de Stern et Gerlach . . . . .	62
4.2.1	Expérience de Stern et Gerlach . . . . .	62
4.2.2	Formalisme du spin $1/2$ . . . . .	63
4.2.3	Retour sur Stern et Gerlach : conséquences des règles de commutation . . . . .	64
4.3	Précession et résonance magnétique . . . . .	65
4.3.1	Précession d'un moment magnétique dans un champ magnétique constant . . . . .	65
4.3.2	Résonance magnétique . . . . .	66
4.4	États intriqués et mélange statistique . . . . .	67
4.4.1	Intrication . . . . .	67
4.4.2	Retour sur les fentes d'Young . . . . .	68
4.4.3	Deux spins $1/2$ intriqués . . . . .	68
4.4.4	Opérateur densité . . . . .	69
4.5	Particules identiques, fermions, bosons et principe de Pauli . . . . .	70
4.5.1	Fermions et bosons . . . . .	70
4.5.2	N particules et principe de Pauli . . . . .	71
4.5.3	Spin et statistique . . . . .	72
4.5.4	Mesure et décohérence : le monde quantique mesuré par le monde classique . . . . .	72
4.6	Quelques sujets non abordés mais qui valent le coup d'oeil . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Travaux Dirigés</b>	<b>75</b>
5.1	Moment cinétique : commutation et valeurs propres . . . . .	75
5.2	Oscillateur harmonique quantique : opérateur création/annihilation . . . . .	75
5.3	Forme de la fonction d'onde d'une particule dans un double puits potentiel . . . . .	76
5.4	Principe de correspondance et commutations canoniques . . . . .	77
5.5	Solutions . . . . .	78

