

MÉCANIQUE QUANTIQUE

Christophe Texier

2ème édition



5 novembre 2014

Gauche : Diffraction d'électrons passant par un trou. La figure est obtenue en déplaçant une pointe SPM (scanning probe microscope) chargée négativement au-dessus d'un gaz d'électrons bidimensionnel (des électrons contraints à se déplacer à l'interface de deux semi-conducteurs GaAs/GaAlAs). La conductance du trou est mesurée en fonction de la position de la pointe et révèle la densité électronique (ici en présence d'un flot de courant). Image gracieusement fournie par Arthur Gossard & Mark Topinka, tirée de : M. A. Topinka, *Imaging coherent electron wave flow through 2-D electron gas nanostructures*, Ph.D. Thesis, Harvard University (2002).

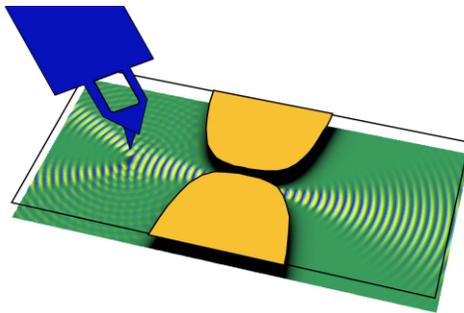


FIGURE 1 – *Principe du dispositif expérimental.*

Droite : Image par microscopie électronique d'un réseau de fils d'argent déposé sur un substrat isolant (le pas du réseau est $0.64\mu\text{m}$). À très basse température, la mesure de la résistance électrique en fonction du champ magnétique (courbe superposée à l'image) donne un accès direct au rapport de la constante de Planck et de la charge de l'électron (le quantum de flux magnétique $\phi_0 = h/|q_e|$). Ces petites oscillations de la résistance électrique sont appelées « oscillations Aharonov-Bohm » et sont la manifestation d'un phénomène d'interférences quantiques (cf. chapitre 16). La courbe est caractéristique de l'échantillon et parfaitement reproductible. La température était $T = 0.4$ Kelvin, le champ magnétique varie entre 1.1 et 1.3 Tesla et l'amplitude des oscillations est $\delta R \sim 2 \text{ m}\Omega$ pour une résistance $R \simeq 100 \Omega$ (figure 16.1).

L'échantillon et les mesures ont été réalisés pendant la thèse de Félicien Schopfer, dans l'équipe de Christopher Bäuerle et Laurent Saminadayar (Institut Néel, Grenoble). Données publiées dans : F. Schopfer, F. Mallet, D. Mailly, C. Texier, G. Montambaux, C. Bäuerle & L. Saminadayar, *Dimensional crossover in quantum networks : from mesoscopic to macroscopic physics*, Physical Review Letters **98**, 026807 (2007).



À Marie-Flore

Table des matières

Avant-propos – Mode d’emploi	xi
Structure de l’ouvrage	xiv
Notations	xv
1 Introduction	1
1.1 Qu’est-ce que la mécanique quantique ?	1
1.2 Brèves considérations historiques	2
1.2.1 La mécanique newtonienne	2
1.2.2 L’électromagnétisme	3
1.2.3 La physique statistique	3
1.2.4 Les impasses de la théorie classique	4
1.2.5 Une nouvelle constante fondamentale : la constante de Planck \hbar	10
1.3 La structure des théories physiques	11
1.4 Aperçu des postulats de la mécanique quantique	13
1.4.1 Les concepts	13
1.4.2 Les postulats	14
1.4.3 Difficultés de l’interprétation	15
1.4.4 Différentes formulations	15
1.5 Premières conséquences importantes	16
1.5.1 La dualité onde-corpuscule	16
1.5.2 Le principe de superposition	17
1.5.3 Particule libre dans une boîte : quantification	20
1.5.4 Spectre quantifié <i>vs</i> continuum	21
Annexe 1.A : La physique quantique en quelques dates	22
Annexe 1.B : Rappels de mécanique analytique	31
2 Équation d’onde de Schrödinger	35
2.1 Équation d’onde – premières applications	35
2.1.1 Construction de l’équation d’onde	35
2.1.2 Densité et courant de probabilité	37
2.1.3 $V(\vec{r}, t) \rightarrow V(\vec{r})$ – Équation de Schrödinger stationnaire	37

2.1.4	Potentiels constants par morceaux ($d = 1$)	39
2.2	Fonction d'onde dans l'espace des impulsions	47
2.3	Inégalités de Heisenberg	47
2.3.1	Moyennes des grandeurs physiques	47
2.3.2	Inégalité de Heisenberg	48
Annexe 2.A : Transformation de Fourier		51
2.A.1	Séries de Fourier (transformation de Fourier discrète)	51
2.A.2	Transformation de Fourier	52
Annexe 2.B : Distributions		54
2.B.1	Distribution $\delta(x)$ de Dirac	54
2.B.2	Valeur principale	57
Exercices		58
3	Formalisme de Dirac – Postulats (1)	61
3.1	Introduction	61
3.2	Prélude : espace des fonctions d'onde	62
3.2.1	Produit scalaire et orthonormalisation	62
3.2.2	Opérateurs linéaires	64
3.3	Formalisme de Dirac	65
3.3.1	Espace de Hilbert et vecteurs d'état	65
3.3.2	Opérateurs linéaires et observables	66
3.3.3	Produits tensoriels	73
3.3.4	Problèmes séparables	74
Annexe 3.A : Rappels d'algèbre linéaire		76
Exercices		77
4	La mesure – Postulats (2)	79
4.1	Motivations	79
4.2	Les postulats de mesure	80
4.3	Valeur moyenne d'une observable	83
4.4	Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC)	84
Exercices		85
5	Évolution temporelle – Postulats (3)	87
5.1	Résolution de l'équation de Schrödinger	87
5.1.1	Méthode générale	87
5.1.2	Opérateur d'évolution temporelle	88
5.1.3	Application 1 : Évolution libre	89
5.1.4	Application 2 : Système à deux niveaux	89
5.2	Théorème d'Ehrenfest	92
5.3	Point de vue de Heisenberg	93
Annexe 5.A : Matrice de diffusion (matrice S) d'une lame séparatrice		94

Exercices	97
6 Symétries et lois de conservation	101
6.1 Symétries	101
6.2 Transformations en mécanique quantique	103
6.2.1 Considérations générales	103
6.2.2 Parité et autres symétries discrètes	105
6.3 Groupes continus – Générateur infinitésimal	108
6.3.1 Quelques groupes continus	109
6.3.2 Loi de conservation – Théorème de Noether	111
6.4 Potentiel périodique et théorème de Bloch	111
6.4.1 Théorème de Bloch	112
6.4.2 Illustration : un cristal unidimensionnel	112
Exercices	114
Problème 6.1 : Groupe de Galilée	116
7 Oscillateur harmonique	119
7.1 L'oscillateur harmonique classique	119
7.2 Le spectre de l'oscillateur harmonique	120
Exercices	127
Problème 7.1 : États cohérents	128
8 Moment cinétique – Spin	131
8.1 Moment cinétique	131
8.1.1 Relations de commutation - Générateur des rotations	131
8.1.2 Quelques considérations sur le groupe des rotations	134
8.1.3 Le moment cinétique en mécanique quantique	137
8.1.4 Moment orbital et harmoniques sphériques	143
8.1.5 Opérateurs scalaires, vectoriels	146
8.2 Le spin	148
8.2.1 Effet Zeeman	148
8.2.2 Spin 1/2	152
8.2.3 Le modèle non relativiste de l'électron : équation de Pauli	154
Annexe 8.A : Rotation de 2π du spin d'un neutron	163
Exercices	166
9 Addition des moments cinétiques	167
9.1 Inégalité triangulaire	168
9.2 Construction des vecteurs $ j_1, j_2; j, m\rangle$	170
9.3 Composition de deux spins 1/2	171
Exercices	172

10 Introduction à la théorie des collisions	175
10.1 Ce que le chapitre discute... et ce dont il ne parle pas	175
10.2 Collisions en une dimension	178
10.2.1 Un problème de diffusion sur une ligne semi-infinie – déphasage	178
10.2.2 Diffusion unidimensionnelle – matrice S	182
10.2.3 Conclusion provisoire	187
10.3 Formulation générale – Équation de Lippmann-Schwinger	187
10.4 Diffusion dans la situation bidimensionnelle	189
10.4.1 Deux bases d'états libres	189
10.4.2 Amplitude de diffusion et section efficace	190
10.4.3 Diffusion par un potentiel radial – ondes partielles et déphasages	193
10.5 Diffusion dans la situation tridimensionnelle	195
Annexe 10.A : Fonctions de Green	198
10.A.1 Opérateur d'évolution	198
10.A.2 Fonction de Green de l'équation de Schrödinger stationnaire . .	199
Exercices	201
Problème 10.1 : Résistance électrique d'un fil quantique unidimensionnel . .	203
Problème 10.2 : Temps de Wigner et capacité quantique	205
Problème 10.3 : Interaction ponctuelle en dimension $d \geq 2$	207
11 Particules identiques et permutations – Postulats (4)	211
11.1 Postulat de symétrisation	212
11.1.1 Opérateur de permutation (d'échange)	212
11.1.2 Bosons/fermions	213
11.1.3 Particules élémentaires/particules composites	213
11.1.4 Postulat de symétrisation pour 2 particules identiques	214
11.1.5 Généralisation pour N particules identiques	215
11.2 Corrélations induites par le postulat de symétrisation	216
11.2.1 Problème à 1 particule : notations	216
11.2.2 Construction des états à N particules identiques	216
11.2.3 Fermions identiques : principe de Pauli	217
11.2.4 Facteurs d'occupation	217
11.2.5 Corrélations spatiales	218
11.2.6 État fondamental de N particules identiques sans interaction .	219
11.2.7 Deux fermions identiques : symétriser séparément les parties orbite et spin	221
Annexe 11.A : Collision entre deux particules identiques	223
Exercices	224
Problème 11.1 : Corrélations quantiques de la lumière	224
Problème 11.2 : Collisions entre noyaux de carbone	227

12 Atome d'hydrogène	231
12.1 Atome d'hydrogène	231
12.1.1 Séparation des variables	231
12.1.2 Les échelles atomiques	232
12.1.3 Résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel coulombien	234
12.2 Atomes et classification de Mendeleïev	238
Exercices	244
13 Méthodes d'approximation	245
13.1 Méthode des perturbations – cas stationnaire	245
13.1.1 Principe de la méthode	245
13.1.2 Position du problème	246
13.1.3 Valeur propre de H_0 non dégénérée	247
13.1.4 Valeur propre de H_0 dégénérée	248
13.2 La méthode variationnelle	250
13.3 La méthode JWKB et l'approximation semiclassique	251
13.3.1 Applications	254
Exercices	256
Problème 13.1 : Théorème de projection et facteurs de Landé atomiques	256
Problème 13.2 : Mécanisme d'échange – Interaction coulombienne dans l'atome d'hélium	259
Problème 13.3 : Mécanisme de super-échange – Isolant de Mott et antiferromagnétisme	260
14 Structures fine et hyperfine du spectre de l'hydrogène	263
14.1 Structure fine	264
14.1.1 Termes de correction de masse et de Darwin	266
14.1.2 Couplage spin-orbite	267
14.1.3 Conclusion	267
14.2 Corrections radiatives	268
14.3 Structure hyperfine du niveau $1s_{1/2}$	268
15 Problèmes dépendant du temps	271
15.1 Méthode des perturbations	271
15.1.1 Cas d'une perturbation constante	273
15.1.2 Cas d'une perturbation sinusoïdale	273
15.1.3 Couplage de $ \varphi_i\rangle$ à un continuum d'états $ \varphi_f\rangle$: règle d'or de Fermi	275
15.2 Interaction atome-rayonnement	277
15.2.1 Approximation dipolaire électrique	278
15.2.2 Absorption et émission stimulée	279

15.2.3 Émission spontanée	279
Exercices	282
Problème 15.1 : Résonance magnétique dans un jet moléculaire	283
16 Particule chargée dans un champ magnétique	287
16.1 Introduction	287
16.2 Champ magnétique homogène	288
16.2.1 Problème de Landau bidimensionnel	288
16.2.2 Pourquoi la dimension $d = 2$ est-elle intéressante?	290
16.3 Vortex magnétique	291
16.3.1 Effet Aharonov-Bohm	292
16.3.2 Diffusion d'un électron par le vortex	293
Exercices	295
Problème 16.1 : Conductivité Hall d'un gaz d'électrons 2D	296
A Annexe : Formulaire	299
A.1 Compléments mathématiques	299
A.1.1 Quelques intégrales	299
A.1.2 Fonction Γ , Digamma ψ et fonction β d'Euler	299
A.1.3 Polynômes orthogonaux	300
A.1.4 Fonctions cylindriques	303
A.2 Constantes fondamentales	306
B Solutions des exercices et problèmes	307
Bibliographie	354
Index	358

Avant-propos – Mode d’emploi

Cet ouvrage propose un cours d’introduction à la mécanique quantique. Le cœur du texte a été écrit pour servir de support à un cours dispensé aux étudiants d’écoles d’ingénieurs (École Centrale, Supélec et SupOptique), inscrits au magistère de physique fondamentale de l’Université Paris-Sud, et qui avaient le courage d’étudier des sujets de physique fondamentale plusieurs soirs par semaine. Le cours, dont la structure a été pour l’essentiel imposée afin de respecter le programme suivi par les étudiants du magistère, a été rédigé en ayant le souci de produire un texte compact mais suffisamment complet pour pouvoir être utilisé de manière autonome (quelques notions mathématiques essentielles sont rappelées dans plusieurs annexes). De nombreuses références sont données afin de donner des pistes pour un lecteur désireux d’approfondir les sujets présentés : vers des ouvrages de référence comme les livres d’A. Messiah [38], de L. Landau & E. Lifchitz [30] ou de C. Cohen-Tannoudji, B. Diu & F. Laloë [8]. Des références plus récentes sont les excellents ouvrages de M. Le Bellac [33], J.-L. Basdevant & J. Dalibard [5] ou encore le monumental livre de C. Aslan-gul [3, 4] ; d’autres références spécialisées sont occasionnellement mentionnées.

Le cours s’ouvre sur un chapitre introductif rappelant quelques motivations historiques ayant conduit à la révolution quantique du début du XX^e siècle. L’exposé se poursuit avec une présentation de l’équation d’onde de Schrödinger, approche assez traditionnelle ayant l’avantage de jeter des ponts avec les acquis de physique classique des ondes. Les premiers postulats sont ensuite présentés : formalisme de Dirac, postulats de mesure et d’évolution temporelle. Le cadre ainsi dressé (cf. figure ci-dessous), un chapitre court discute succinctement le rôle des symétries et permet d’introduire des notions qui seront très utiles pour la suite de l’exposé. Nous étudions ensuite l’oscillateur harmonique et le moment cinétique. Le postulat de symétrisation est présenté. La théorie quantique (non relativiste) de l’atome d’hydrogène est exposée, puis nous discutons des méthodes d’approximation, mises en pratique pour l’étude des corrections relativistes dans l’atome d’hydrogène, et finalement les problèmes dépendant du temps (interaction atome-lumière). Ces sujets correspondent au programme du magistère d’Orsay. S’il est courant de tirer de la physique atomique les illustrations d’un premier cours de physique quantique, j’ai également choisi plusieurs applications inspirées par la matière condensée (résistance quantique, capacité quantique, effet Hall, effet Aharonov-Bohm, courant permanent, antiferromagnétisme). Un très court

chapitre consacré à l'étude de la dynamique d'une particule soumise à un champ magnétique (dans les deux situations extrêmes d'un champ uniforme ou concentré en un point) s'inscrit dans cette logique et clôt l'ouvrage. J'ai également jugé opportun d'insérer un chapitre (le 10) sur la théorie des collisions : si cette dernière a des applications évidentes et bien connues pour la physique des gaz ou la physique des particules, elle fournit aussi des outils puissants et assez intuitifs pour l'étude des phénomènes mésoscopiques.¹ J'ai opté pour une présentation commençant par considérer le cas des basses dimensions (1 et 2) ; le cas tridimensionnel usuellement discuté dans les ouvrages n'est que brièvement abordé. Outre que cette approche présente des simplifications d'un point de vue didactique, une telle présentation systématique n'est à ma connaissance pas disponible dans les ouvrages, alors que la question de la mécanique quantique en basse dimension est tout à fait pertinente pour de nombreux développements modernes en physique atomique avec les progrès spectaculaires dans le domaine des atomes froids, ou pour la matière condensée. Ce chapitre est d'un niveau plus avancé que le reste du livre, cependant il présente le cadre dans lequel s'inscrit le concept de matrice S qui sera utilisé de manière intuitive dans plusieurs exercices/problèmes dans le corps de l'ouvrage.

J'ai bénéficié des conseils, remarques et encouragements de nombreuses personnes que je remercie chaleureusement : Hélène Bouchiat, Alain Comtet, Marie-Thérèse Commault, Richard Deblock, Julien Gabelli, Sophie Guéron, Thierry Jolicœur, Mathieu Langer, Alexandre Malamant, Gilles Montambaux, Nicolas Pavloff, Paolo Pedri, Hugues Pothier, Guillaume Roux, Emmanuel Trizac et Denis Ullmo. Je remercie Alain Cordier pour la confiance qu'il m'a témoignée en m'ayant proposé d'assurer ce cours, Alain Abergel pour ses conseils initiaux, Sandra Bouneau pour les vigoureuses discussions autour de la rédaction de l'exercice 2.18.

Arthur Gossard (professeur à l'Université de Californie, Santa Barbara) et Mark Topinka ont eu la très grande gentillesse de m'autoriser à reproduire leur magnifique figure de diffraction obtenue dans un gaz d'électrons bidimensionnel (couverture).

Je suis reconnaissant à Christophe Bäuerle et Laurent Saminadayar pour m'avoir fourni la superbe image de microscopie électronique reproduite sur la couverture : elle montre un réseau de fils d'argent de dimensions microscopiques déposé sur un substrat, dont ils ont étudié les propriétés de transport électronique il y a quelques années (cf. légende page ii et figure 16.1).

Je remercie également Julien Gabelli pour m'avoir fourni l'image de la capacité quantique, étudiée au cours de sa thèse (figure 10.11).

J'adresse de profonds remerciements à Amaury Mouchet, pour ses nombreuses suggestions et conseils, et Jean-Noël Fuchs avec qui j'ai eu l'immense plaisir de travailler dans l'équipe de mécanique quantique d'Orsay, ainsi que pour ses innombrables et toujours si pertinentes observations qui ont profondément marqué le texte ; plusieurs

¹La physique mésoscopique s'intéresse aux phénomènes quantiques (interférences quantiques et/ou effets de la quantification) en matière condensée.

exercices du livre ont été rédigés avec lui.

Mon éducation de mécanicien quantique doit beaucoup aux enseignants dont les cours lumineux m'ont permis d'entrer dans l'univers quantique : Françoise Balibar, Alain Laverne, Cécile Malegrange & Bernard Roulet.

Je remercie Caroline qui a stimulé le processus d'édition, et sans laquelle mon manuscrit dormirait peut-être encore dans mon bureau. Je suis reconnaissant à Dominique Decobecq pour tous ses conseils éditoriaux et Marie Leclerc pour son efficacité.

Je dédie ce travail à Marie-Flore, Michel, Barbara et Andrea.

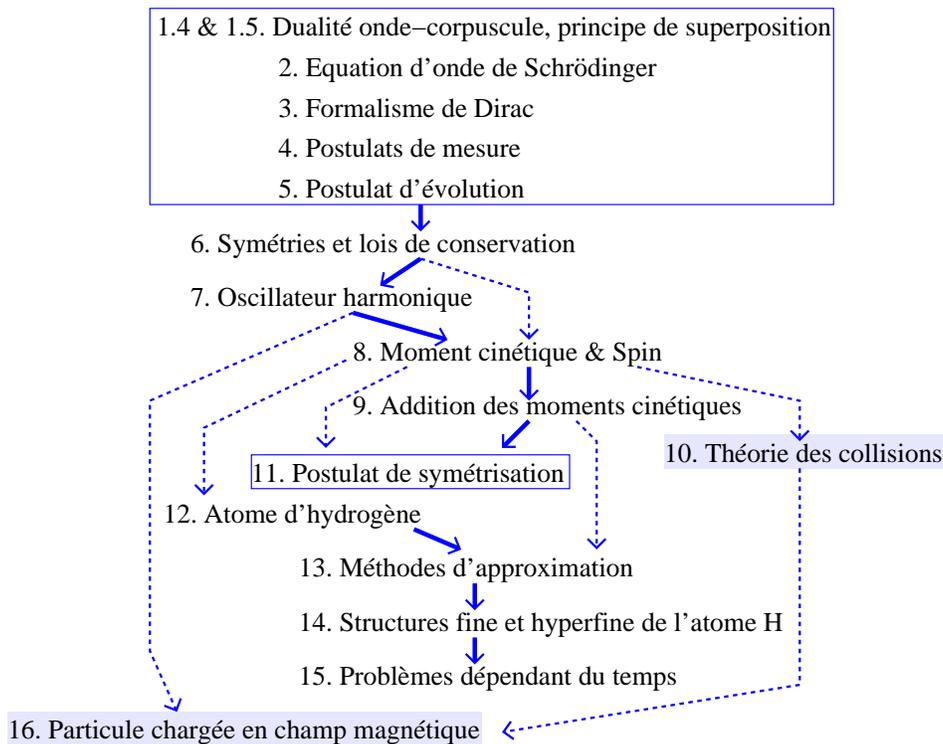
Orsay, 22 Avril 2011.

Cette seconde édition, impulsée par Lætitia Herin et mise en œuvre par Coline Laquêche, que je remercie chaleureusement, m'a donné l'occasion de corriger les coquilles de la première édition. J'en ai profité pour clarifier, restructurer ou même compléter certaines parties (chapitres 1 et 2, annexe 11.A). Un certain nombre d'exercices (5.2, 5.8, 5.9, 11.3, 12.4, 13.2, 15.3, 15.4, 16.4) et problèmes (7.1, 11.2, 15.1) ont été complétés ou simplement ajoutés.

Paris, 28 Août 2013.

Structure de l'ouvrage

Le schéma suivant montre la structure de l'ouvrage. Les flèches indiquent les relations logiques entre les chapitres. Les flèches épaisses définissent un cheminement « naturel » (le programme du cours de mécanique quantique du magistère d'Orsay).



Les deux branches qui ne s'inscrivent pas dans le chemin principal correspondent à deux chapitres ajoutés à la version initiale des notes de cours. Le chapitre 10, qui pourra être sauté sans nuire à la compréhension globale, est d'un niveau plus ardu.

Structure des chapitres

Chaque chapitre est organisé selon le schéma suivant :

1. Le cours, au sein duquel sont insérés de petits exercices d'illustration.
2. À la fin du chapitre, sont énoncées les idées importantes qui ont été introduites.
3. Annexes.
4. Exercices, dont le degré de difficulté est précisé : F, MF, D ou TD.
5. Problèmes.

Notations

$\stackrel{\text{def}}{=}$	égal par définition	$\Gamma(z)$	fonction Gamma d'Euler
\simeq	approximativement égal à	$\psi(z)$	fonction digamma
\sim	de l'ordre de	$C = \psi(1)$	constante d'Euler-Mascheroni
\propto	proportionnel à	$B(\mu, \nu)$	fonction Beta d'Euler
\mathbb{N}	ensemble des entiers naturels	$H_n(z)$	polynôme d'Hermite
\mathbb{Z}	ensemble des entiers relatifs	$P_n(z), P_n^m(z)$	polynômes de Legendre
\mathbb{R}	ensemble des nombres réels	$L_n^\alpha(z)$	polynôme de Laguerre
\mathbb{C}	ensemble des nombres complexes	$J_\nu(z)$	fonction de Bessel
$\text{Re}(\dots)$	partie réelle	$N_\nu(z)$	fonction de Neumann (Bessel de 2ème espèce)
$\text{Im}(\dots)$	partie imaginaire	$H_\nu^{(1)}(z)$	fonction de Hankel (Bessel de 3ème espèce)
\bar{z} ou z^*	complexe conjugué de z	$K_\nu(z)$	fonction de MacDonald (Bessel modifiée de 3ème espèce)
$\text{Tr} \{ \}$	trace		
$\langle \dots \rangle$	moyenne		
$\text{Var}(\dots)$	variance		
ΔX	écart-type ($= \sqrt{\text{Var}(X)}$)	$\hbar = h/(2\pi)$	constante de Planck
$\theta_H(x)$	fonction de Heaviside	c	célérité de la lumière
$\delta(x)$	distribution de Dirac	ϵ_0	permittivité diélectrique du vide
$\delta_{i,j}$	symbole de Kronecker	μ_0	permittivité du vide
$\tilde{\psi}(k)$	transformée de Fourier $\psi(x)$	m_e	masse de l'électron
$f * g$	produit de convolution	q_e	charge de l'électron
$\vec{\nabla}$	gradient	$e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$	couplage électromagnétique
$\Delta = \vec{\nabla}^2$	Laplacien	m_*	masse effective
$\psi(\vec{r}; t)$	fonction d'onde		
$\rho_\psi(\vec{r}; t)$	densité de probabilité		
$\vec{J}_\psi(\vec{r}; t)$	densité de courant de probabilité		
\mathcal{H}	espace de Hilbert		
$ \psi\rangle$	vecteur d'état (ket)		
$\langle\psi $	dual du vecteur d'état (bra)		
$\langle\psi \chi\rangle$	produit scalaire		
\otimes	produit tensoriel		
$[,]$	commutateur		
$\mathbf{1}_N$	matrice identité de taille N		
H	hamiltonien		
\vec{J}	moment cinétique (générique)		
$\vec{\ell}$	moment cinétique orbital		
\vec{S}	moment cinétique de spin		
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	matrices de Pauli		
$Y_\ell^m(\theta, \varphi)$	harmonique sphérique		

Principales unités (système MKSA)

m	mètre
kg	kilogramme
s	seconde
J	Joule
K	Kelvin
A	Ampère
C	Coulomb
V	Volt
Ω	Ohm
T	Tesla
F	Farad

Chapitre 1

Introduction

1.1 Qu'est-ce que la mécanique quantique ?

Ses fondateurs considéraient la mécanique quantique comme le cadre théorique permettant de décrire le comportement de la matière et de la lumière aux échelles atomiques et subatomiques. Plus tard, avec la découverte de phénomènes quantiques macroscopiques, cette définition est néanmoins apparue trop restrictive. Cependant la définition du domaine quantique est déjà une question très délicate, aussi nous en resterons à ce premier point de vue, qui permet de toucher du doigt assez aisément la nécessité d'un abandon des concepts de la physique dite classique (nous entendons par là, la mécanique newtonienne et l'électromagnétisme) lorsque l'on s'intéresse aux échelles atomiques et subatomiques. Les notions qui constituent le socle de la physique classique ont été forgées à partir de notre expérience immédiate, or, si nous pouvons espérer deviner les lois fondamentales qui régissent le mouvement des corps matériels en analysant le mouvement d'une boule de billard, ou celui des planètes à l'aide d'un télescope, il n'y a *a priori* pas de raison évidente pour que ces lois s'appliquent encore dans le monde atomique et subatomique.¹ Il n'est donc pas surprenant, rétrospectivement, que la description du comportement des atomes requière d'autres concepts que ceux utilisés pour analyser la dynamique des corps macroscopiques.

Commençons par quelques considérations historiques afin de dresser un rapide tableau de l'état de la physique à la fin du XIX^e siècle, à la veille de plusieurs grands

¹Aujourd'hui les progrès de la physique quantique nous permettent de « voir » les atomes à l'aide des microscopes à force atomique ou à effet tunnel (figure 2.2). C'était loin d'être le cas à la fin du XIX^e siècle et les propriétés du monde atomique ne pouvaient qu'être déduites indirectement d'observations aux échelles macroscopiques. La réalité des atomes était contestée par quelques grands noms de la physique (par exemple Ernst Mach), tenants d'une approche « continue » opposée à la description « atomiste ». On peut considérer que la question de l'existence des atomes fut tranchée définitivement par la validation expérimentale, en 1908, par Jean Perrin (1870-1942, prix Nobel 1926), de la description du mouvement brownien proposée par Einstein en 1905. Le mouvement erratique d'une petite particule déposée à la surface de l'eau révèle les chocs incessants avec les molécules du liquide.

bouleversements. Elles nous aideront à mieux saisir les paragraphes suivants qui seront consacrés à une description succincte de la structure des théories physiques et de la mécanique quantique en particulier.

1.2 Brèves considérations historiques

Faisons un état des lieux en cette fin de XIX^e siècle. Il va de soi qu'une présentation de quelques pages ne peut être que très schématique. Nous évoquons ici les grandes théories cadres que sont : *la mécanique newtonienne, l'électromagnétisme et la thermodynamique/physique statistique.*

1.2.1 La mécanique newtonienne

On peut faire remonter les premiers balbutiements de la mécanique newtonienne au début du XVII^e siècle avec la formulation du principe d'inertie par Galileo Galilei (1564-1642). Les principes de la mécanique, dont la formulation fut rendue possible par l'invention du calcul différentiel attribuée à Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716) et Isaac Newton (1642-1727), furent établis par ce dernier (I. Newton, *Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*, 1687).

La mécanique newtonienne, en s'appuyant sur les notions de la cinématique (position, vitesse, accélération,...) et celle de force, permet de prédire le mouvement des corps solides à l'aide d'un certain nombre de lois universelles :

- Le principe d'inertie : les lois de la mécanique sont les mêmes dans tous les référentiels inertiels.
- Le principe d'action-réaction.
- La relation fondamentale de la dynamique (RFD) reliant l'accélération \vec{a} , i.e. une quantité cinématique, d'une particule de masse m , à la force \vec{F} exercée sur celle-ci, i.e. une quantité dynamique : $m \vec{a} = \vec{F}$.
- On doit ajouter à ces trois principes une quatrième loi fondant la théorie newtonienne de la gravitation : la force d'attraction, $\vec{F}_G = -\frac{GMm}{r^2}\vec{u}_r$, exercée par une masse M à l'origine, sur une masse en $\vec{r} = r\vec{u}_r$, où $G \simeq 6.67 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ est la constante universelle de gravitation (il semble exister une controverse entre Newton et Robert Hooke (1635-1703) quant à la paternité de la loi en $1/r^2$).

La théorie newtonienne a connu des succès éclatants, principalement pour la description du mouvement des corps célestes, culminant avec la découverte de Neptune par Urbain Le Verrier (1811-1877) grâce à l'analyse des aberrations de la trajectoire d'Uranus. Communiquée le 31 août 1846 devant l'académie des sciences de Paris, sa

²Nous sommes tellement habitués à la RFD que nous en oublions à quel point celle-ci ne va pas de soi ! C'est si vrai que des propositions antérieures reliaient la force à la vitesse, ce qui est contredit par une analyse expérimentale précise.

prédiction de l'existence d'une nouvelle planète fut confirmée le 23 septembre par une observation de Johann Galle.

1.2.2 L'électromagnétisme

Parallèlement à la théorie du mouvement des corps matériels, les phénomènes de natures électrique et magnétique étaient décrits par un certain nombre de lois finalement unifiées dans ce qui est aujourd'hui appelé l'électromagnétisme.

La théorie des phénomènes électriques s'est développée principalement dans la seconde moitié du XVIII^e siècle. On peut citer les noms de Charles Augustin Coulomb (1736-1806), d'Alessandro Volta (1745-1827) et de Denis Poisson (1781-1840).

Les phénomènes magnétiques étaient décrits depuis longtemps (les aimants furent découverts par les grecs dès l'antiquité), mais ce n'est qu'en 1820 que la relation entre les phénomènes magnétiques et électriques fut démontrée par une expérience réalisée par Hans Christian (Ersted (1777-1851) montrant que l'aiguille d'une boussole est influencée par le courant électrique traversant un fil disposé à proximité. Les contributions importantes furent apportées par André Marie Ampère (1775-1836), Jean-Baptiste Biot (1774-1862) et Michael Faraday (1791-1867). La construction du bel édifice fut parachevée par James Clerk Maxwell (1831-1879) qui donna une vision unifiée de l'ensemble des phénomènes à travers les fameuses quatre équations qui portent aujourd'hui son nom, présentées devant la Royal Society en 1864. Il est aujourd'hui considéré comme un des précurseurs de la vision moderne de la physique, pour avoir donné une place centrale à la notion de symétrie dans une théorie physique. C'est apparemment des considérations purement esthétiques (on dirait aujourd'hui « de symétrie ») qui le conduisirent à ajouter un dernier terme dans la dernière des quatre équations. Ces quatre équations aux dérivées partielles décrivent la dynamique des champs électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t)$: un premier couple d'équations fixe des contraintes sur les champs $\text{div}\vec{B} = 0$ et $\text{rot}\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}$ (les deux champs dérivent des potentiels scalaire et vecteur) ; un second couple d'équations $\text{div}\vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0}\rho$ et $\text{rot}\vec{B} = \mu_0\vec{j} + \epsilon_0\mu_0\frac{\partial}{\partial t}\vec{E}$ couplent les champs à des sources les générant, densité de charge ρ et densité de courant \vec{j} . C'est à Oliver Heaviside (1850-1925) qu'on doit cette forme élégante des équations de Maxwell, que ce dernier avait présentées sous la forme de 20 équations.

Mentionnons également le rôle déterminant de Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894) qui mit en évidence expérimentalement l'existence des ondes électromagnétiques, prédites par les équations de Maxwell, et montra que la lumière est une forme de rayonnement électromagnétique.

1.2.3 La physique statistique

La dernière des théories cadres est la physique statistique, à laquelle on peut attacher les noms de Rudolf J. E. Clausius (1822-1888) et James C. Maxwell (1831-1879)

pour le développement de la théorie cinétique des gaz, Ludwig Boltzmann (1844-1906) et Josiah W. Gibbs (1839-1903). La physique statistique s'attache à l'étude des systèmes à très grand nombre de degrés de liberté (par exemple les gaz, les solides, etc) et permet de déduire leurs propriétés aux échelles *macroscopiques* à partir de lois gouvernant les constituants élémentaires aux échelles *microscopiques* (par exemple l'échelle atomique pour les gaz). Basée sur un langage probabiliste, la masse d'information décrivant les détails de l'échelle microscopique est éliminée au profit d'un petit nombre de grandeurs : entropie statistique, température, pression, etc. Contrairement à la mécanique newtonienne et à l'électrodynamique, elle ne vise pas à décrire la dynamique des objets *élémentaires*, mais cherche au contraire à dégager des lois *fondamentales* contrôlant les phénomènes *collectifs*.³ La relation entre la physique statistique et les autres théories cadres est subtile puisque le choix de la dynamique microscopique (classique ou quantique) est indépendant de l'idée centrale du *passage de l'élémentaire au collectif*.

1.2.4 Les impasses de la théorie classique

Si on résume la situation en cette fin de XIX^e siècle, il y a donc d'une part une théorie de la dynamique de la matière (la mécanique newtonienne), on pourrait parler de physique *corpusculaire*, d'autre part la théorie électromagnétique, qui est clairement de nature *ondulatoire* puisqu'elle décrit la dynamique des champs électrique et magnétique, ébranlements d'un milieu -le mystérieux éther?- pas très bien défini. Comme Hertz l'a démontré expérimentalement, cette théorie décrit les phénomènes lumineux : c'est une théorie du rayonnement. L'interaction entre matière et rayonnement est assurée d'une part par l'introduction de la force de Lorentz $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ dans la relation fondamentale de la dynamique, et d'autre part par les termes de sources donnant naissance aux champs, densité de charge ρ et densité de courant \vec{j} , dans les équations de Maxwell (figure 1.1). En dépit des succès remarquables de ces deux théories, le bel édifice était remis en question à la fin du XIX^e siècle par un certain nombre de problèmes, loin d'être secondaires comme nous le verrons, qui ne trouvaient pas de solution dans ce cadre.

Mentionnons une première difficulté : équations de Newton et équations de Maxwell ne sont pas invariantes sous le même groupe de transformations d'espace-temps : le groupe de Galilée laisse les premières invariantes tandis que le groupe de symétrie des secondes est le groupe de Poincaré. Autrement dit les deux théories ne sont pas affectées de la même manière par les transformations spatio-temporelles, ce qui contredit l'idée fondamentale de l'invariance des lois de la physique lors des changements de référentiels inertiels. L'incompatibilité entre groupes de symétrie des équations de Newton et de Maxwell fut résolue par l'élaboration, en 1905, d'une nouvelle mécanique

³Notons que la physique statistique s'oppose en cela à la thermodynamique : cette dernière se fonde directement sur l'échelle macroscopique et permet de construire des *théories phénoménologiques*, par contraste avec la physique statistique qui vise à construire des *théories microscopiques*.

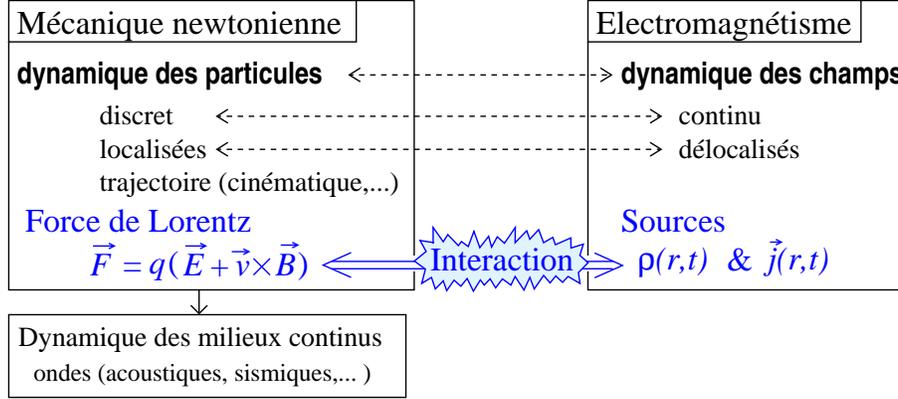


FIGURE 1.1 – La dichotomie (classique) corpuscule-onde.

(non quantique) permettant de décrire les corps aux très grandes vitesses (comparables à la vitesse de la lumière) : la théorie de la relativité restreinte d'Einstein qui remet en cause les conceptions sur la structure de notre espace-temps. Le cœur de la théorie de la relativité restreinte, *le principe de relativité*, i.e. l'universalité des lois de la physique (mécanique *et* électromagnétisme) dans tous les référentiels inertiels, apparaît comme une réponse aux expériences d'Albert Michelson et Edward Morley (entre 1881 et 1885) démontrant le caractère absolu de la vitesse de la lumière.

Les problèmes profonds de la physique classique portent sur les mécanismes d'*interaction matière-rayonnement*. La discussion de ces questions est inextricablement liée à l'exploration de la structure de la matière aux échelles atomiques et subatomiques.

a) La recherche des constituants élémentaires

• Les atomes

Bien que l'hypothèse atomique (de « *ατομος* », indivisible) remonte à l'antiquité grecque, ce n'est qu'au tout début du XX^e siècle que l'existence des atomes fut mise en évidence en 1908 de manière indubitable par Jean Perrin, par son analyse du mouvement brownien et sa mesure du nombre d'Avogadro ($\mathcal{N}_A \simeq 6.023 \times 10^{23}$ atomes par mole). Les *fluctuations*, le mouvement erratique d'un grain de pollen à la surface de l'eau trouvant son origine dans les chocs incessants avec les molécules d'eau, révèlent la nature *discrète* de la matière.

• Les électrons

Les expériences d'ionisation des gaz raréfiés jouèrent un rôle important jusqu'à la démonstration, en 1897, de l'existence de l'électron par Joseph John Thomson (1856-1940, prix Nobel 1906), qui observa la déviation de rayons cathodiques (faisceaux

d'électrons) d'une lampe à vide par un champ magnétique. L'expérience fournit une mesure du rapport de la charge par la masse q_e/m_e . La mesure de la charge de l'électron $q_e \simeq -1.6 \times 10^{-19}$ C, sera réalisée en 1910 par Robert Andrews Millikan (1868-1953, prix Nobel 1923).

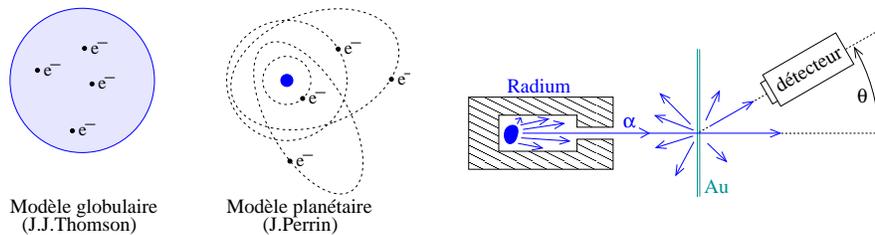


FIGURE 1.2 – **La structure de l'atome.** À gauche : *Deux modèles d'atomes.* À droite : *Principe des expériences de Geiger, Marsden et Rutherford : bombardement d'une feuille d'or (épaisseur $\sim 100 \mu\text{m}$) par des particules α émises par une source radioactive de radium.*

• La structure de l'atome

Au début du XX^e siècle, deux modèles d'atome sont proposés. D'une part un modèle *planétaire*, proposé par Perrin en 1901, d'électrons interagissant avec un noyau chargé positivement via l'interaction coulombienne, d'autre part un modèle *globulaire*, proposé par Thomson en 1903, d'électrons se mouvant sur un fond continu chargé positivement assurant la neutralité électrique de l'atome (figure 1.2) [24]. La question sera tranchée par une série d'expériences dues à deux étudiants d'Ernest Rutherford (1871-1937, prix Nobel 1908), Hans Geiger (1882-1945) et Ernest Marsden (1889-1970) en 1909, et leur interprétation par Rutherford en 1911. Un faisceau de particules α (des noyaux d'hélium) est envoyé sur une mince ($\sim 100 \mu\text{m}$) feuille d'or. Si la plupart des particules α ne sont pas déviées, certaines sont diffusées avec de grands angles. L'observation de *rétrodiffusion* avait particulièrement frappé Rutherford et invalide le modèle de J. J. Thomson : la rétrodiffusion des particules α fortement énergétiques ($v \approx 1.8 \times 10^7$ m/s, i.e. $E_c \approx 7$ MeV) ne peut s'expliquer que parce qu'elles rencontrent une concentration extrêmement forte de charges, le noyau atomique. Rutherford va plus loin et explique les données expérimentales à l'aide de son modèle théorique de diffusion d'une charge *ponctuelle* dans un champ coulombien (la particule α dans le champ du noyau d'or).

• Les ions et les isotopes

Francis William Aston (1877-1945, prix Nobel 1922) met au point en 1919 la technique de *spectroscopie de masse* consistant à dévier un faisceau d'atomes ionisés (des ions) par un champ magnétique et à les trier en fonction de leur masse (d'où le nom

de la technique). Il montre d'une part que les masses des noyaux sont (approximativement) *quantifiées* en multiples entiers de la masse du proton (le noyau de l'atome d'hydrogène), et d'autre part que la masse du noyau d'un même élément chimique peut fluctuer de quelques unités. L'existence de différents *isotopes* est derrière cette observation.⁴

• La radioactivité

Une découverte importante, en 1896, est le phénomène de *radioactivité* par Henri Becquerel (1852-1908, prix Nobel 1903). Trois types de radioactivité furent observés : l'émission α (un noyau d'hélium), l'émission β (un électron) et l'émission γ (un photon). Le phénomène de radioactivité est une *transition* entre deux états du noyau atomique (émission γ) ou la *transmutation* d'un noyau (émission α et β). La découverte de la radioactivité était donc annonciatrice de la découverte du noyau atomique et son occurrence stochastique de la nature probabiliste de la théorie quantique (cf. chapitre 2 de l'ouvrage [3])

b) Impasse n°1 : L'instabilité classique des atomes

Le problème qui paraît le plus grave est relatif à la question de la stabilité de la matière. L'expérience de Geiger-Marsden-Rutherford fournit donc une image claire pour la structure de l'atome : des électrons tournant autour d'un noyau chargé positivement. Or l'électron accéléré dans le champ électrique du noyau devrait émettre un rayonnement électromagnétique et voir son énergie (mécanique) diminuer. Le rayon de l'orbite de l'électron devrait alors diminuer et l'atome s'effondrer sur lui-même. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, on trouve une durée de vie de 10^{-11} s (cf. exercice 15.5)! *La physique classique prédit donc que les atomes ont une durée de vie finie*, extrêmement courte, ce qui est (heureusement pour nous) contredit par l'expérience.

c) Impasse n°2 : Absorption et émission de lumière

L'absorption et l'émission de lumière par la matière révèlent un caractère discontinu qui ne s'explique pas dans le cadre classique.

⁴Le nombre de neutrons dans le noyau varie d'un isotope à l'autre, par exemple dans le carbone 12 (6 protons et 6 neutrons) et le carbone 14 (6 protons et 8 neutrons). Les propriétés chimiques des isotopes sont identiques, puisqu'elles dépendent de la structure électronique, i.e. du nombre de protons, seule la masse varie. Pour éviter tout anachronisme, notons que le neutron, dont l'existence a été conjecturée par Rutherford en 1920, ne sera découvert qu'en 1932 par Chadwick.

• Spectroscopie atomique

Les expériences d'absorption ou d'émission de la lumière par un gaz atomique montrent que la lumière n'est absorbée/émise qu'à certaines fréquences *discrètes*.⁵ Cet ensemble de fréquences constitue le *spectre* de l'atome et joue le rôle de sa « carte d'identité ».

Cette observation sera à l'origine du modèle de l'atome de Bohr : essentiellement le modèle d'atome planétaire auquel on ajoute une règle de quantification.

• Effet photoélectrique

Découvert par Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894) en 1887, l'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par un métal soumis à un rayonnement ultraviolet.

Décrivons l'expérience : un morceau de métal est placé dans le vide et éclairé par un rayonnement ultraviolet monochromatique de pulsation ω . Une différence de potentiel V est appliquée entre le métal et une cathode. Le courant I d'électrons arrachés de l'anode est mesuré en fonction de la tension V (figure 1.3). Lorsque la tension est inférieure à la *contre-tension* V_0 les électrons sont repoussés par la cathode et le courant électrique ne passe pas. V_0 fournit donc une mesure de l'énergie cinétique maximale des électrons arrachés : $\max[E_c^{\text{el.}}] = -V_0$.

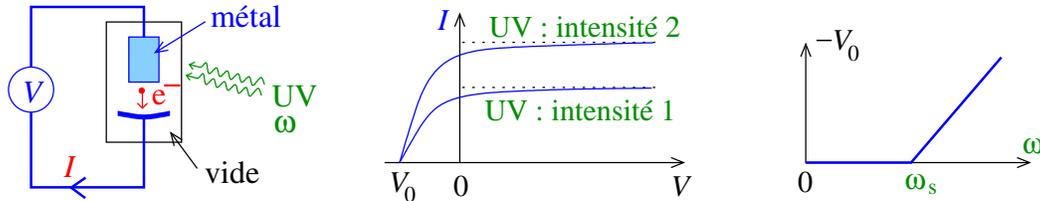


FIGURE 1.3 – **Effet photoélectrique.** À gauche : *émission d'électrons par un métal soumis à un rayonnement ultraviolet monochromatique de pulsation ω* . Au milieu : *courant d'électrons arrachés en fonction de la tension*. À droite : *contre-tension en fonction de la pulsation*.

En augmentant l'intensité lumineuse du rayonnement monochromatique on augmente l'énergie déposée dans le métal. On pourrait penser qu'on augmente ainsi l'énergie cinétique des électrons arrachés, cependant il n'en est rien comme l'illustre la figure, puisque *la contre-tension V_0 est indépendante de l'intensité lumineuse*. Seul le flux d'électrons arrachés varie.

La contre-tension est tracée en fonction de la fréquence du rayonnement (figure 1.3). On observe l'existence d'une *fréquence de seuil ω_s en-deçà de laquelle la*

⁵Il est intéressant de noter que dès 1905, Henri Poincaré (1854-1912) suggérait l'analogie entre l'existence des raies spectrales atomiques et les harmoniques de certaines équations différentielles apparaissant dans d'autres domaines de la physique (acoustique, théorie de l'élasticité, électromagnétisme) [12].

lumière n'est pas absorbée. Au-delà de cette fréquence, la relation entre contre-tension (i.e. énergie cinétique des électrons) et fréquence est linéaire

$$E_c^{\text{el.}} = \hbar (\omega - \omega_s) \quad (1.1)$$

où \hbar est une constante universelle (alors que ω_s dépend du métal, \hbar en est indépendante). L'existence du seuil, incompréhensible classiquement, suggère à Albert Einstein (1879-1955, prix Nobel 1921) en 1905 que **l'énergie du rayonnement monochromatique ne peut être absorbée que par quanta** $E_{\text{quantum}} = \hbar\omega$. L'équation (1.1) s'interprète comme un bilan d'énergie : l'énergie déposée par le rayonnement monochromatique (un multiple *entier* de « paquets » $E_{\text{quantum}} = \hbar\omega$) se distribue pour partie en énergie cinétique de l'électron, et pour partie en énergie potentielle nécessaire pour l'arracher au métal, au minimum $\hbar\omega_s$, expliquant le seuil.

• Équilibre thermique lumière/matière

Dans une étoile, les photons émis lors de la nucléosynthèse diffusent depuis le cœur vers les couches externes. Les multiples processus d'émission/absorption conduisent à l'existence d'un équilibre thermique entre matière et lumière. En supposant le système isolé et à l'équilibre (« corps noir »), ce qui suppose que les pertes d'énergie sont faibles relativement, la thermodynamique prédit que la distribution des fréquences du rayonnement est une loi *universelle*, uniquement fonction de la température T (remarquons que la température correspondant au rayonnement émis par l'étoile est celle des couches externes, quelques milliers de K, et non du cœur beaucoup plus chaud, quelques millions de K).

Notons $u(\omega, T)d\omega$ la densité (volumique) d'énergie des fréquences de l'intervalle $[\omega, \omega + d\omega]$. La physique classique prédit une densité présentant le comportement $u_{\text{RJ}}(\omega, T) \propto T\omega^2$ (la loi de Rayleigh-Jeans, obtenue par Lord Rayleigh en 1900 puis corrigée en 1905 par James Jeans, est déduite du théorème d'équipartition de l'énergie de la physique statistique). Elle conduit à une densité d'énergie *infinie* après intégration sur les fréquences : Ehrenfest évoquera en 1911 une « catastrophe ultraviolette » pour désigner cette divergence $\int_0^\infty d\omega u_{\text{RJ}}(\omega, T) = \infty$. D'autre part, Wilhelm Wien (1864-1928, prix Nobel 1911) avait obtenu en 1894 la loi portant son nom $u_{\text{Wien}}(\omega, T) = \omega^3 f(\omega/T)$; pour rendre compte des expériences, il propose en 1896 une forme exponentielle *décroissante*, $f(x \rightarrow \infty) \simeq A e^{-Bx}$ où A et B sont des constantes *universelles*.

En 1900, Max Planck (1858-1947, prix Nobel 1918) démontre la loi qui portera son nom, interpolant entre les lois de Rayleigh-Jeans et de Wien et en bon accord avec l'expérience :

$$u_{\text{Planck}}(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \hbar \omega \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}, \quad (1.2)$$

où k_B est une autre constante universelle appelée la constante de Boltzmann (cf. cours de physique statistique). Il identifie l'existence d'une nouvelle constante fondamentale, \hbar . Dans sa démonstration, afin de reprendre une méthode combinatoire due à Boltzmann, Planck supposait l'énergie quantifiée. Alors qu'il ne voyait qu'un artifice technique dans cette idée, celle-ci jouera un rôle central dans les travaux ultérieurs d'Einstein [16].

1.2.5 Une nouvelle constante fondamentale : la constante de Planck \hbar

Il est remarquable de constater que l'étude de deux problèmes à première vue aussi différents que la thermodynamique du rayonnement dans une étoile et l'irradiation d'un morceau de métal font apparaître la même constante **universelle** \hbar . Analysons sa dimension : l'expression (1.2) montre que $\hbar\omega$ est une énergie, autrement dit \hbar permet de convertir une pulsation en énergie

$$[\hbar] = [\text{Energie}] [\text{Temps}] \quad (1.3)$$

$$= [\text{Longueur}] [\text{Impulsion}] \quad (1.4)$$

$$= [\text{Moment cinétique}] \quad (1.5)$$

C'est aussi la dimension d'une *action*, une grandeur physique introduite dans le cadre de la formulation lagrangienne de la mécanique classique (cf. annexe 1.B), ce qui explique pourquoi la constante de Planck est dénommée le *quantum d'action*. Sa valeur,

$$\boxed{\hbar = 1.054\,571\,68(18) \times 10^{-34} \text{ J.s}} \quad (1.6)$$

extrêmement petite comparée aux échelles physiques caractérisant le monde qui nous entoure ($\sim 1 \text{ kg}$, $\sim 1 \text{ m}$, $\sim 1 \text{ s} \Rightarrow \text{action} \sim 1 \text{ J.s}$), suggère que les phénomènes quantiques n'émergent qu'à de très petites échelles (dans les deux exemples, les processus microscopiques d'interaction entre matière et rayonnement sont en jeu).

✎ **Exercice 1.1 (F)**: a) Donner l'expression de l'action de la terre pendant une révolution autour du soleil, l'orbite étant supposée circulaire. Calculer S_{t} en unité de \hbar .

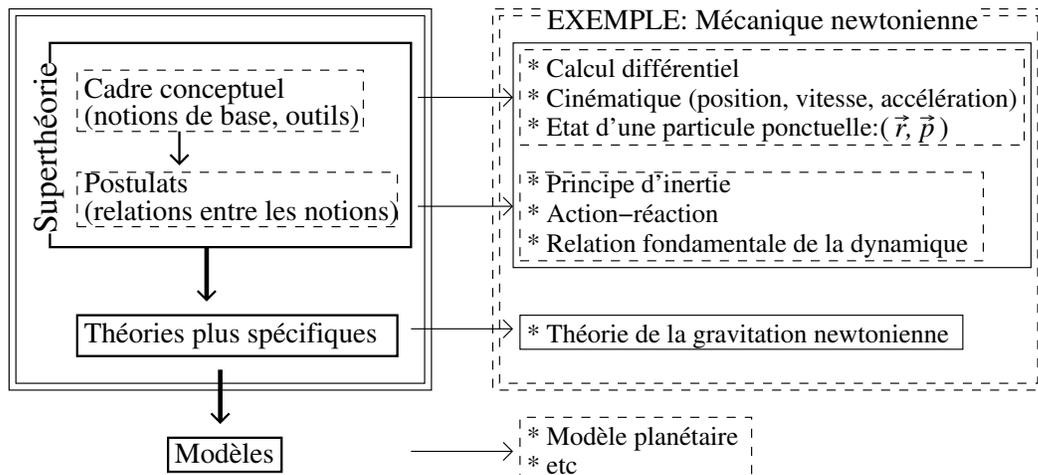
$G \simeq 6.67 \times 10^{-11} \text{ kg}^{-1}\text{m}^3\text{s}^{-2}$, $M_{\odot} \simeq 2 \times 10^{30} \text{ kg}$, $M_{\text{t}} \simeq 6 \times 10^{24} \text{ kg}$ et $R_{\text{t-s}} = 1 \text{ u.a.} \simeq 150 \times 10^6 \text{ km}$.

b) Calculer l'action d'un électron décrivant une orbite circulaire autour d'un proton (un atome d'hydrogène) pendant une période. On rappelle que le potentiel coulombien est $V(r) = -\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv -\frac{e^2}{r}$. On considèrera une orbite circulaire de rayon $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \text{ \AA}$.

1.3 La structure des théories physiques

On peut véritablement parler de « révolution quantique » puisque les fondateurs de la mécanique quantique ont été progressivement amenés à remplacer le cadre conceptuel et à abandonner les notions servant de socle à la mécanique classique. C'est une des difficultés principales de l'enseignement de la mécanique quantique : il faut laisser de côté un certain nombre de notions devenues intuitives à l'usage.

De quelle remise à plat des concepts parle-t-on ? Pour apprécier cela il est bon de revenir sur la structure des grandes théories physiques. Nous considérons les théories cadres évoquées plus haut, que nous pourrions appeler les « superthéories », dans lesquelles s'imbriquent des théories plus spécifiques, au sein desquelles on construit des modèles.



Toute théorie est basée sur un certain nombre de postulats (axiomes) qui doivent obéir à quelques règles transcendantes, telles que la causalité, la conservation de l'énergie-impulsion d'un système isolé. D'autres choix axiomatiques conduiraient à des conclusions différentes. C'est donc la confrontation à l'expérience qui permet de valider la pertinence du choix des axiomes. *La justesse d'une théorie physique n'est donc pas seulement dans sa construction mais aussi dans la validité de son application.* Par exemple, reconsidérons la proposition aristotélicienne de décrire la dynamique des corps en mouvement en postulant la proportionnalité entre *vitesse* et force : $\lambda \vec{v} = \vec{F}$. On sait que cette relation est démentie par l'expérience de la chute des corps (elle a aussi la désagréable propriété de ne pas respecter le principe de relativité). Cela ne la rend pas pour autant absurde et il est possible de trouver des situations décrites par cette relation : le cas d'une particule en milieu fortement visqueux.

Notons enfin que le statut d'une théorie peut varier comme le montre l'exemple de la théorie de la gravitation. Alors que dans le cadre newtonien la théorie de la gravitation apparaît comme une théorie spécifique décrivant l'interaction entre masses,

la théorie de la relativité générale einsteinienne intègre la gravitation au cadre général.

• **La polymorphie des théories physiques**

Il est intéressant de noter qu'une même théorie peut apparaître sous plusieurs formes, basées sur des concepts et des postulats différents. Les variantes de la théorie sont toutefois strictement équivalentes. Un exemple est fourni par la mécanique classique, qui peut être formulée dans le cadre newtonien basé sur les postulats rappelés ci-dessus. Elle peut également être formulée dans le cadre lagrangien ou encore hamiltonien ; le postulat permettant de déduire les équations du mouvement est alors le principe de moindre action de Pierre Louis Moreau de Maupertuis (1698-1759). L'existence de plusieurs formulations équivalentes et complémentaires est une des richesses de la physique théorique. Elles fournissent différents angles pour attaquer les problèmes.

• **Les limites des théories - Le rôle des constantes fondamentales**

Comme nous l'avons déjà illustré, le cadre délimite une zone hors de laquelle l'application de la théorie n'a pas de sens. Par exemple, personne ne remet en cause les succès de la théorie newtonienne qui est une excellente approximation, dans le domaine classique, de théories plus générales. Elle nous apparaît aujourd'hui cernée de plusieurs côtés. En allant vers les hautes énergies, on doit lui substituer la théorie de la relativité restreinte einsteinienne (1905). Du côté des champs de gravitation intenses, on doit lui substituer la théorie de la relativité générale (gravitation einsteinienne, 1916). Enfin, du côté des échelles microscopiques elle cède bien sûr la place à la mécanique quantique (1927).

Dans la tentative de définition d'un domaine d'application des théories, les constantes fondamentales jouent un rôle très important. Rappelons que les constantes fondamentales associées aux quatre théories fondamentales sont : la vitesse de la lumière c (relativité restreinte et électromagnétisme), la constante de gravitation universelle G , la constante de Boltzmann k_B (quantum d'entropie) pour la physique statistique et enfin la constante de Planck (quantum d'action) \hbar pour la mécanique quantique.

Les constantes fondamentales permettent de définir des échelles de longueur, d'énergie, etc, qui définissent les frontières entre les théories. Par exemple, la vitesse de la lumière c permet de discriminer le domaine non relativiste (faible énergie cinétique $E_c \ll mc^2$) et le domaine relativiste ($E_c \gtrsim mc^2$). Puisque la constante fondamentale quantique a la dimension d'une *action* on peut proposer le critère suivant (cf. exercice 1.1) :

$$\text{Action} \gg \hbar : \text{classique} \tag{1.7}$$

$$\text{Action} \sim \hbar : \text{quantique} . \tag{1.8}$$

Cependant la définition du domaine quantique n'est malheureusement pas aussi simple (cf. par exemple la discussion clôturant la section 4.2, page 82). Une distinction

très importante entre mécanique classique et mécanique quantique est l'existence de phénomènes d'interférences quantiques. Or ces derniers sont extrêmement fragiles et une limitation pratique rendant leur observation difficile, i.e. limitant la *cohérence*, est l'interaction d'un système quantique avec le monde extérieur, extrêmement difficile à contrôler.

1.4 Aperçu des postulats de la mécanique quantique

Cette section donne un aperçu de la structure de la mécanique quantique : les postulats sont rapidement énoncés, regroupés en « concepts » et « postulats ». La pédagogie est ici sacrifiée afin de donner une vue d'ensemble. Les postulats seront introduits plus « en douceur » dans les chapitres 3, 4, 5 et 11.

1.4.1 Les concepts

Dans la mécanique newtonienne, l'état d'une particule ponctuelle est défini à un instant t par des données cinématiques, une position $\vec{r}(t)$ et une impulsion $\vec{p}(t)$, ce qui détermine l'évolution ultérieure, i.e. la trajectoire. En revanche, la notion de trajectoire disparaît dans le cadre quantique et les notions de position et d'impulsion, qui ne peuvent plus être déterminées simultanément, prennent un statut assez différent comme nous le verrons. Comment décrire alors l'état d'une particule quantique (un quanton, pour employer une terminologie chère aux auteurs de [35]) telle qu'un électron ?

- L'état d'une particule est décrit par une **fonction d'onde** $\psi(\vec{r}, t)$ (chapitre 2), une fonction complexe. De manière plus abstraite, l'état est spécifié par la donnée d'un « vecteur d'état », noté $|\psi\rangle$, élément d'un espace de Hilbert \mathcal{H} . L'espace des états \mathcal{H} est un espace vectoriel, en général de dimension infinie, construit sur le corps des complexes \mathbb{C} et muni du produit hermitien (produit scalaire), noté $\langle \varphi | \psi \rangle$, satisfaisant la propriété : $\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$. Il s'exprime en terme des fonctions d'onde correspondantes comme :

$$\langle \varphi | \psi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int d\vec{r} \varphi(\vec{r})^* \psi(\vec{r}) \quad (1.9)$$

- **Interprétation probabiliste.**— La fonction d'onde représente une *amplitude de densité de probabilité*. $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$ mesure la probabilité de trouver la particule à l'instant t dans le volume $d\vec{r}$ autour de \vec{r} . Une conséquence immédiate est la contrainte de **normalisation**

$$\int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1 \quad (1.10)$$

qui exprime que « la probabilité d'être quelque part vaut 1 » .

• Les quantités physiques, les **observables**, sont représentées par des opérateurs linéaires ⁶ (chapitre 3) agissant dans l'espace des états \mathcal{H} (i.e. sur les fonctions d'onde). Par exemple, l'opérateur de position agit comme la multiplication de la fonction d'onde par \vec{r} , tandis que l'opérateur d'impulsion agit comme l'action du gradient sur la fonction d'onde : $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$ (une justification sera proposée au début du chapitre 3).

1.4.2 Les postulats

• **Le postulat de symétrisation.**— Le premier des postulats, qui sera le dernier discuté dans le cours (chapitre 11), concerne les propriétés de permutabilité de la fonction d'onde à N particules **identiques**. Des *particules identiques* sont *indiscernables*. La fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ doit donc être symétrisée par rapport aux permutations de particules.

Si les particules sont des *bosons* (photons, mésons,...), la fonction d'onde doit être *invariante* sous l'action de la permutation de deux particules :

$$\psi_{\text{bosons}}(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = +\psi_{\text{bosons}}(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots). \quad (1.11)$$

Si les particules sont des *fermions* (électrons, protons, neutrons,...), la fonction d'onde est *antisymétrique* :

$$\psi_{\text{fermions}}(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\psi_{\text{fermions}}(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots). \quad (1.12)$$

La nature bosonique ou fermionique est déterminée par le moment cinétique intrinsèque de la particule (son spin).

Les deux autres postulats expriment qu'il y a deux types d'évolution :

• Une **évolution stochastique** et irréversible : **le processus de mesure** (chapitre 4). Lorsque l'état d'une particule (microscopique) est sondé par un appareil de mesure (macroscopique), on conçoit que l'état de la particule n'en ressort en général pas indemne. ⁷ Le postulat s'énonce comme suit : considérons une particule dans un état $|\psi\rangle$ et une observable \mathcal{A} (par exemple l'impulsion), représentée par un opérateur A agissant dans l'espace des états ($-i\hbar\vec{\nabla}$ dans le cas de l'impulsion) et dont les valeurs propres et les vecteurs propres sont notés $\{a_n, |\varphi_n\rangle\}$. Le résultat de la mesure de \mathcal{A} est aléatoire mais ne peut être que l'une des valeurs propres de l'opérateur A :

⁶ Cette règle paraît à première vue très abstraite. Cependant on peut essayer d'en donner une justification heuristique en se souvenant que les expériences mettent en évidence une quantification des grandeurs physiques : par exemple l'existence des raies spectrales d'absorption/émission d'un gaz atomique s'interprète comme une quantification de l'énergie, ou l'expérience de Stern et Gerlach démontre la quantification du moment cinétique intrinsèque des atomes d'argent (§ de la section 8.2.3). Or un opérateur linéaire est précisément caractérisé par un spectre de valeurs (ses valeurs propres).

⁷Des « mesures non destructives » ont pu être réalisées récemment (cf. fin du § sur les repères historiques).

la mesure donne la valeur propre a_n avec probabilité $\text{Proba}[\mathcal{A} \rightsquigarrow a_n] = |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2$. Après la mesure l'état du système est $|\psi_{\text{final}}\rangle = |\varphi_n\rangle$. Pour évoquer cette altération stochastique de la fonction d'onde, on parle de **réduction du paquet d'ondes**.

• Une **évolution déterministe** et réversible (d'un objet de nature probabiliste) : **l'évolution temporelle** (chapitre 5). L'évolution de la fonction d'onde est gouvernée par l'équation de Schrödinger :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)} \quad (1.13)$$

où $\Delta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ est l'opérateur de Laplace. L'équation de Schrödinger joue en mécanique quantique le rôle de la relation fondamentale de la dynamique en mécanique newtonienne.

1.4.3 Difficultés de l'interprétation

« We have made a number of assumptions about the way in which states and dynamical variables are to be represented mathematically in the theory. These assumptions are not, by themselves, laws of nature, but become laws of nature when we make some further assumptions that provide a physical interpretation of the theory. Such further assumptions must take the form of establishing connexions between the results of observations, on one hand, and the equations of the mathematical formalism on the other. »

The principles of quantum mechanics, Paul Dirac.

Les quelques règles que nous venons d'énoncer suivent « l'interprétation de Copenhague », en référence à la synthèse opérée par Bohr en 1927 [16]. Si elles définissent un mode opératoire qui a démontré sa puissance et n'a jusque là pas été mis en défaut, la question de leur *interprétation* continue à susciter des débats, plus de 80 ans après l'émergence de la mécanique quantique. La difficulté vient de la juxtaposition des deux types d'évolution. Considérée isolément, l'équation de Schrödinger (1.13) pourrait suggérer que la mécanique quantique est une physique ondulatoire au même titre que l'optique ou l'acoustique développées au XIX^e siècle, mais pour des ondes de matière. Le point délicat vient de l'interprétation probabiliste, qui implique que l'équation de Schrödinger ne sélectionne pas une « réalité » unique, mais décrit *l'évolution cohérente de plusieurs éventualités* (la superposition de plusieurs « réalités »). C'est la réduction du paquet d'ondes, au moment de la mesure, qui sélectionne de manière stochastique un résultat unique (une des « réalités » possibles) [28, 40]. Nous reviendrons sur ce point au § 4.2.b.

1.4.4 Différentes formulations

Distinguons plusieurs présentations du formalisme quantique :

- Dans celle que nous donnerons, nous analyserons l'évolution temporelle de l'état quantique. L'analyse spectrale des opérateurs sera centrale (en particulier celui représentant l'énergie, qui joue un rôle particulier dans l'évolution). On peut voir cette présentation comme la quantification de la formulation hamiltonienne de la mécanique analytique.
- La formulation *d'intégrale de chemin*, développée par R. Feynman [18]. Basée sur la formulation lagrangienne de la mécanique classique. Elle s'attache plutôt à l'analyse des amplitudes de probabilité de transition.
- Enfin, *la théorie quantique des champs* (le formalisme de « seconde quantification ») permet de traiter les problèmes dans lesquels le nombre de particules n'est pas conservé, ou lorsqu'elles se transforment, ce qui est important dans certains domaines comme la physique des particules ou la matière condensée.

1.5 Premières conséquences importantes

Il ne s'agit pas d'énumérer dans ce paragraphe toutes les conséquences des règles apparemment simples que nous venons d'énoncer, ce qui suffirait à nous occuper pendant tout un cycle universitaire, mais plutôt de mentionner quelques points particuliers.

1.5.1 La dualité onde-corpuscule

La mécanique quantique ne permet pas seulement de développer une « mécanique » des particules de matière (électron, proton, neutron,...) mais également une théorie de la lumière. Elle abandonne complètement la dichotomie matière=corpuscule/rayonnement=onde : les deux notions corpusculaire et ondulatoire se fondent dans la dualité éponyme décrivant *aussi bien* matière que lumière.

Comment cette dualité se manifeste-t-elle dans le formalisme ? Rappelons que deux notions à la base des théories ondulatoires sont celles de fréquence et de longueur d'onde. Une onde plane monochromatique $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-i\omega t}$ est caractérisée par sa pulsation ω et un vecteur d'onde \vec{k} . Or la formulation schrödingerienne montre que la mécanique quantique est une physique ondulatoire... mais pas seulement. Une particule libre est caractérisée par son énergie E et son impulsion \vec{p} . La correspondance entre les concepts corpusculaires et ondulatoires est assurée par les deux **importantes relations** suivantes :

- La relation de Planck-Einstein

$$\boxed{E = \hbar\omega} \quad (1.14)$$

ayant permis d'expliquer l'effet photoélectrique, l'existence de raies spectrales dans les spectres atomiques, etc.

- La relation de L. de Broglie

$$\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}} \quad (1.15)$$

rendant compte de l'effet Compton, des expériences de Davisson et Germer de diffraction d'électrons, etc.

• Onde plane

Une **onde plane** $\phi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} - i\omega t}$ décrit donc l'état quantique pour une particule libre d'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ et d'énergie $E = \hbar\omega$.

✎ **Exercice 1.2** (F) : Écrire la relation de dispersion (relation entre ω et \vec{k}) pour une particule non relativiste de masse m , puis pour une particule relativiste.

1.5.2 Le principe de superposition

Une conséquence immédiate du premier des postulats (l'état quantique est décrit par une fonction d'onde, i.e. un élément d'un espace vectoriel) : il est possible de construire des *combinaisons linéaires* de tels états. Soient deux états normalisés $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$, il est légitime de considérer

$$\psi(x) = \alpha \psi_1(x) + \beta \psi_2(x) \quad \text{où } \alpha, \beta \in \mathbb{C}. \quad (1.16)$$

Discutons maintenant l'utilité de ce concept.

a) Expérience d'interférences d'Young

Le dispositif des fentes d'Young est une des expériences les plus simples permettant de mettre en évidence les phénomènes d'interférences. Réalisée au tout début du XIX^e siècle par Thomas Young (1773-1829) pour démontrer le caractère ondulatoire de la lumière, l'expérience peut être répétée pour tous types d'ondes. Avec des particules de matière dans le domaine quantique, l'expérience permet de mettre en lumière plusieurs questions fondamentales : le caractère ondulatoire, l'interprétation probabiliste et la dualité onde-corpuscule.

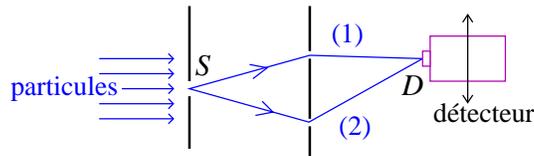


FIGURE 1.4 – **Expérience d'interférences d'Young.**

Le principe de superposition nous permet d'analyser l'expérience, schématisée sur la figure 1.4. Un faisceau de particules, collimaté par un trou jouant le rôle de source (« S »), est envoyé sur un écran percé de deux trous. Un détecteur de particules (« D ») pouvant être déplacé verticalement compte les particules à la sortie du

dispositif. Les particules suivent soit le chemin (1), associé à l'amplitude de probabilité $\psi_1(S \rightarrow D)$, soit le chemin (2) associé à l'amplitude $\psi_2(S \rightarrow D)$. Si les particules, d'impulsion $p = \hbar k = 2\pi\hbar/\lambda$, se déplacent librement (entre les fentes) les amplitudes sont données par $\psi_1(S \rightarrow D) \propto e^{ik\ell_1}$ et $\psi_2(S \rightarrow D) \propto e^{ik\ell_2}$ (ondes planes), où ℓ_1 et ℓ_2 sont les longueurs des chemins. Si aucun mécanisme ne sélectionne une des deux trajectoires (comme sur la partie gauche de la figure 1.5), l'amplitude de probabilité au niveau du détecteur est une *superposition* des deux amplitudes. La probabilité correspondante,

$$\text{Proba}[S \rightarrow D] = \frac{1}{2} |\psi_1(S \rightarrow D) + \psi_2(S \rightarrow D)|^2 \propto \cos^2[\pi(\ell_1 - \ell_2)/\lambda], \quad (1.17)$$

présente des franges d'interférences lorsque le détecteur est déplacé et que $\ell_1 - \ell_2$ varie. L'existence d'une figure d'interférences repose donc crucialement sur le fait que *le principe de superposition s'applique aux amplitudes de probabilité et non aux probabilités* (figure 1.5).

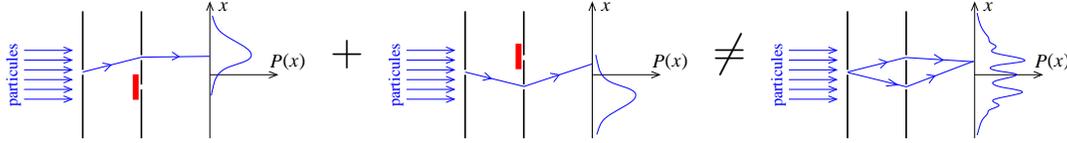


FIGURE 1.5 – **Principe de superposition.** Probabilité $P(x)$ d'observer des particules sur l'écran dans trois situations. Le principe de superposition ne s'applique pas aux probabilités (ce qu'on aurait pu attendre classiquement) mais aux **amplitudes de probabilités**.

Jusque là, l'analyse ressemble banalement à l'expérience d'Young pour une onde classique. L'expérience devient intéressante lorsque le flux de particules est suffisamment faible pour détecter les particules une à une (aspect corpusculaire). Si on attend qu'un grand nombre de particules soient passées, les impacts apparaissant aléatoirement en différents endroits s'accumulent préférentiellement dans certaines régions, faisant ainsi apparaître la figure d'interférences (aspect ondulatoire). De telles expériences d'interférences ont été réalisées pour de nombreux types de particules : photons, électrons, neutrons (figure 1.6), atomes, molécules. La figure 1.6 montre le résultat récent de la très spectaculaire expérience d'interférences réalisée avec un faible flux (au plus 4 molécules détectées par seconde) de molécules de fullerène.⁸

b) Double puits de potentiel

Une autre conséquence surprenante du principe de superposition est fournie par l'exemple d'une particule dans un double puits de potentiel. Donnons nous une fonc-

⁸Articles de revue : O. Nairz, M. Arndt & A. Zeilinger, *Quantum interference experiments with large molecules*, Am. J. Phys. **71**, 319 (2003). A. Cronin, J. Schmiedmayer & D. E. Pritchard, *Optics and interferometry with atoms and molecules*, Rev. Mod. Phys. **81**, 1051 (2009).

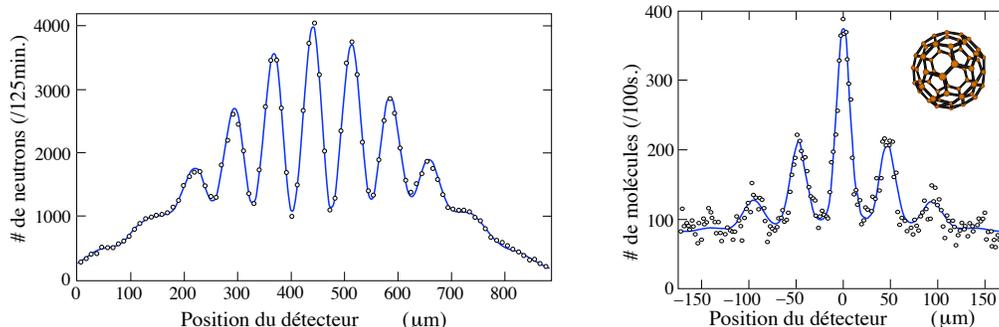


FIGURE 1.6 – **Interférences de particules.** À gauche : *Expérience d'Young réalisée avec des neutrons de longueur d'onde $\lambda \simeq 2$ nm (i.e. vitesse $v \simeq 200$ m.s $^{-1}$). Données tirées de : A. Zeilinger, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).* À droite : *Diffraction de molécules de fullerène (C $_{60}$) par un réseau de fentes. Longueur d'onde : $\lambda \simeq 4$ pm (i.e. $v \simeq 130$ m.s $^{-1}$). Données tirées de O. Nairz, M. Arndt & A. Zeilinger, *Am. J. Phys.* **71**, 319 (2003).*

tion d'onde $\psi_G(x)$, respectivement $\psi_D(x)$, décrivant la particule dans le puits de gauche, respectivement de droite (figure 1.7). Nous pouvons concevoir une combinaison linéaire de ces deux états, qui décrit donc une situation où la particule est à la fois dans le puits droit et dans le puits gauche. Nous verrons au chapitre 5 que lorsque les deux puits sont symétriques, l'état de plus basse énergie (état fondamental) est donné par $\psi_0(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_G(x) + \psi_D(x)]$ (une telle situation se produit par exemple dans la molécule d'ammoniac NH $_3$, cf. exercice 6.2 page 106).

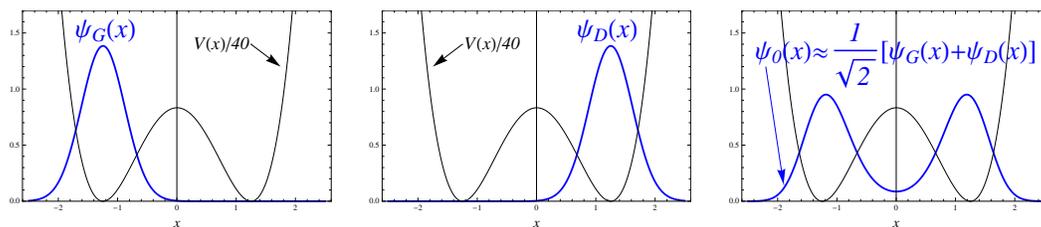


FIGURE 1.7 – **Principe de superposition.** *Une particule piégée dans un double puits de potentiel. On a tracé une fonction d'onde $\psi_G(x)$ [resp. $\psi_D(x)$] décrivant l'état « particule dans le puits gauche » (resp. droit). La fonction d'onde $\psi_0(x)$ de l'état de plus basse énergie, représentée à droite, est très proche de la combinaison linéaire $\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_G(x) + \psi_D(x)]$ et décrit un état « particule à la fois dans le puits gauche et le puits droit ».*

1.5.3 Particule libre dans une boîte : quantification

L'étude d'une particule confinée dans une région finie de l'espace est ce qu'on appelle un problème « d'états liés » (par exemple l'étude du mouvement d'une planète autour du soleil ou d'un électron autour du proton). Quelles sont les conséquences d'un traitement quantique ? Pour répondre à cette question nous étudierons une situation unidimensionnelle. Nous considérons une particule *libre* astreinte à se déplacer dans l'intervalle $[0, a]$ de \mathbb{R} . Cette situation est réalisée pour un potentiel nul dans $[0, a]$ et infini hors de l'intervalle. Classiquement la particule (de masse m) d'énergie E effectue des aller-retours dans le puits, à vitesse constante $v = \pm\sqrt{2E/m}$. Sa fonction d'onde est donc soit une onde plane e^{ikx} décrivant une particule libre se déplaçant dans le sens des $x > 0$, d'impulsion $p = mv = +\hbar k = \sqrt{2mE}$, soit une onde plane e^{-ikx} décrivant une particule allant dans le sens opposé, d'impulsion $p = -\hbar k$. Écrivons (principe de superposition)

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (1.18)$$

L'énergie de la particule est $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Hors de l'intervalle $[0, a]$, le potentiel $V = \infty$ impose à la fonction d'onde de s'annuler $\varphi(x) = 0$ (probabilité nulle de trouver la particule hors de l'intervalle $[0, a]$).

• *Raccordement et équation de quantification.* – Admettant la continuité de la fonction d'onde, nous raccordons $\varphi(x) = 0$ pour $x \in]-\infty, 0] \cup [a, +\infty[$ avec (1.18). Il faut donc imposer

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0 \quad (1.19)$$

Nous obtenons deux relations :

$$A + B = 0 \quad \& \quad A e^{ika} + B e^{-ika} = 0. \quad (1.20)$$

Ce système n'admet de solution non triviale que lorsque le déterminant est nul :

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ e^{ika} & e^{-ika} \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sin(ka) = 0} \quad (1.21)$$

Cette condition nous montre que les fonctions de la forme (1.18) ne sont solutions du problème que si k est solution de (1.21). Cette équation est appelée « *équation de quantification* » : seules certaines valeurs discrètes de k (et donc de E) correspondent à des solutions physiques :

$$k_n = n \frac{\pi}{a}, \quad n \in \mathbb{N}^* \quad \text{et donc} \quad \boxed{E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}} \quad (1.22)$$

alors que classiquement, répétons-le, toutes les valeurs de $E \in \mathbb{R}^+$ sont permises.

Ce phénomène n'est pas fondamentalement nouveau : le lecteur aura probablement déjà rencontré le phénomène analogue dans l'étude des modes propres de vibrations de la corde vibrante pincée à ses deux extrémités.

• *Les fonctions d'onde.* – En revenant au système (1.20) pour $k = k_n$ on obtient les coefficients de la fonction d'onde (comme l'équation de Schrödinger est linéaire, il reste toujours au moins un coefficient arbitraire, ce qui correspond au choix de la constante multiplicative globale). Dernière étape importante : **nous normalisons la fonction d'onde**, afin qu'elle satisfasse (1.10) :

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (1.23)$$

Quelles idées générales peut-on retirer ? Premièrement : un problème d'états liés est caractérisé par un spectre *discret* de valeurs de l'énergie : chaque valeur discrète de l'énergie correspond à un *état stationnaire*. Cela explique l'existence des raies spectrales atomiques, correspondant à des transitions entre différents états quantiques. Deuxièmement : l'énergie ne peut pas être inférieure à une valeur minimale, l'énergie de l'état de plus basse énergie, appelé *état fondamental*. Autrement dit, la particule confinée dans une région de dimension a acquiert au moins une énergie (cinétique, puisque $V = 0$) de l'ordre de

$$E_c \gtrsim \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (1.24)$$

Donnons des ordres de grandeur : (i) pour une masse $m = 1$ kg confinée dans $a = 1$ m, on trouve $\frac{\hbar^2}{ma^2} \simeq 6 \times 10^{-50}$ eV. (ii) Pour un électron confiné dans $a = 1$ Å, $\frac{\hbar^2}{ma^2} \simeq 6$ eV.

1.5.4 Spectre quantifié vs continuum

• **États liés - quantification.** – Nous venons de voir que l'étude des états liés conduit à une quantification des différentes quantités physiques : l'impulsion, l'énergie...

• **États de diffusion - continuum.** – Une autre situation physique courante est celle où la particule n'est pas confinée dans une région finie de l'espace par le potentiel : les états quantiques décrivant cette situation sont délocalisés dans tout l'espace. Ils sont appelés « états de diffusion ». Nous verrons que dans ce cas l'énergie n'est pas quantifiée : de tels états existent pour des énergies variant continûment dans certains intervalles de \mathbb{R} . Un exemple est le problème libre : les solutions de l'équation de Schrödinger libre (éq. (1.13) pour $V = 0$) sur \mathbb{R} sont les ondes planes $\varphi_k(x) = A e^{ikx}$ d'énergie $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. L'onde plane est indicée par un paramètre continu $k \in \mathbb{R}$. Le spectre des énergies est bien un spectre continu : $E \in \mathbb{R}^+$.

☺ Les idées importantes

- Interprétation probabiliste (sens physique de la fonction d'onde).
- Dualité onde-corpuscule : les relations de Planck-Einstein (1.14) et de Broglie (1.15).
- Principe de superposition.
- Le problème du puits infini.

📖 Pour en savoir plus

- Un petit texte très agréable présentant les concepts quantiques (sans formule ni calcul) : [40].
- Un excellent ouvrage introductif est [35].

Annexe 1.A : La physique quantique en quelques dates

« Il fallait de toute évidence en arriver à fonder une nouvelle mécanique où les idées quantiques viendraient se placer à la base même de la doctrine et non pas se surajouter après coup comme dans l'ancienne théorie des quanta. Chose curieuse ! la réalisation de ce programme eut lieu presque simultanément par deux voies très différentes (...). Ainsi se constituèrent la mécanique ondulatoire d'une part, la mécanique quantique d'autre part, doctrines dont l'aspect et le formalisme paraissaient d'abord tout à fait opposés. »
La physique nouvelle et les quanta, Louis de Broglie.

La mécanique quantique est née entre 1925 et 1927 de la synthèse, dans laquelle Bohr joua un rôle important, de la mécanique des matrices (Born, Heisenberg, Jordan), de la mécanique ondulatoire (Schrödinger) et de la théorie des transformations (Dirac, Jordan, von Neumann) [7, 24]. C'est l'aboutissement d'un quart de siècle d'efforts de la part de nombreux scientifiques parmi lesquels (par ordre chronologique de naissance) : Max Planck, David Hilbert, Arnold Sommerfeld, Albert Einstein, Paul Ehrenfest, Max Born, Niels Bohr, Erwin Schrödinger, Louis de Broglie, Wolfgang Pauli, Werner Heisenberg, Enrico Fermi, Pascual Jordan, Paul Dirac, Eugène Wigner, John von Neumann. Pour avoir une idée de la genèse de la théorie quantique, mentionnons un certain nombre d'étapes importantes, regroupées en deux groupes (avec un certain arbitraire).

a) Fondation : de la physique des quanta à la mécanique quantique

- 1897 : Les expériences de J. J. Thomson démontrent l'existence de charges quantifiées, i.e. de *l'électron*. Mesure du rapport q_e/m_e .