Cours de mathématiques

TOME XII

# MÉCANIQUE

Physique théorique

France ∼ 2025

*Écrit et réalisé par* Louis Lascaud

# Table des matières

# Chapitre 1

# Mécanique quantique

**Résumé**

Ce cours est une introduction à la mécanique quantique. Après une introduction pédagogique et un certain nombre de mises en garde, les éléments de base de la mécanique quantique seront abordés, puis utilisés pour la description de systèmes élémentaires. Pour motiver cette introduction, on présentera en premier lieu l'expérience de Stern et Gerlach, puis les postulats de la mécanique quantique : états d'un système, mesure, évolution temporelle. Nous étudierons ensuite le système à deux niveaux et le spin $\frac{1}{2}$. Ensuite, nous étudierons les représentations $r$ et $p$, puis la fonction d'onde et son interprétation. Enfin, nous passerons en revue un certain nombre de problèmes unidimensionnels classiques : marches, puits, barrières de potentiel dont l'effet tunnel.

## 1.1 Raisons d'être de la physique quantique

## 1.2 Fonction d'onde et équation de Schrödinger

**Fait**

$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$.

**Interprétation.** ***(La fonction d'onde complexe)***

$|\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}P$ est la densité de probabilité de trouver la particule en $x$ au temps $t$. ⊠

*Remarque.* $|\tilde{\psi}_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$.

### 1.2.1 Applications de la théorie de Fourier

On considère par défaut une onde progressive.

**Fait.** ***(Lien quantité de mouvement-vecteur d'onde)***

$p = \hbar k$.

**Propriété.** ***(Inversion des fonctions d'onde en positions et impulsions)***

On fixe le temps $t$. Alors on peut exprimer la fonction d'onde de la représentation des positions :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{i\frac{px}{\hbar}} \mathrm{d}p$$

(la transformée de Fourier en $p$ de $\psi(x)$) et la fonction d'onde de la représentation des quantités de mouvement :

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i\frac{px}{\hbar}} \mathrm{d}p$$

(la transformée de Fourier en $x$ de $\tilde{\psi}(p)$). En particulier, ces deux transformations sont linéaires.

$\tilde{\psi}(p)$ est une fonction a priori complexe, quoique d'argument réel.

**Théorème.** ***(Théorème de Parseval)***

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\varphi(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p)^* \tilde{\psi}(p)\mathrm{d}p.$$

A priori $\tilde{\psi}(p)^* \neq \tilde{\psi}\overline{p}$ !

**Corollaire**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 \mathrm{d}p = 1$$

où $|\tilde{\psi}(p)|^2\mathrm{d}p$ est la probabilité élementaire de mesurer la quantité de mouvement dans l'intervalle $[p,p+\mathrm{d}p]$.

$\triangleright$ C'est le théorème de Parseval pour $\varphi = \psi$ en remarquant que $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x$ est la probabilité totale de mesurer la position de la particule entre $-\infty$ et $+\infty$ (car $|\psi(x)|^2\mathrm{d}x$ est la probabilité élémentaire de mesure la position de la particule dans $[x, x+\mathrm{d}x]$), autrement dit, elle est égale 1. $\blacksquare$

**Heuristique**

Distributions de la probabilité de mesure des positions et des quantités de mouvement sont liées.

### 1.2.2 Valeurs moyennes en physique quantique

**Heuristique**

On souhaite mesurer la position $x$ ou la quantité de mouvement $p$ d'une particulier et en calculer la valeur moyenne. Ainsi, $x$ et $p$ sont représentées par des variables aléatoires dont on souhaite calculer l'espérance.
Commençons par la position. On découpe la droite réelle en sections infinitésimales d$x$ pour obtenir une discrétisation des positions indexées sous la forme $x_i$. Supposons que l'on mesure $n_i$ fois la position $x_i$. Soit $N$ le nombre total de mesures, *i.e.* $N = \sum_i x_i$. Alors on sait que la valeur moyenne des positions dans cette expérience vaut $\langle x \rangle_{\text{exp.}} = \frac{\sum_i n_i x_i}{N}$ qui, lorsque $N$ tend vers $+\infty$ et $dx$ tend vers 0, tend vers la valeur $\int_{-\infty}^{+\infty} x \mathrm{d}P = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)|\psi(x)|^2 \mathrm{d}x$ soit $\boxed{\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) \mathrm{d}x}$. On peut, sans problème, transposer ce raisonnement à d'autres moments : $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) \mathrm{d}x$ puis $\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^n \psi(x) \mathrm{d}x$ et plus généralement, quitte à l'exprimer sous forme d'une série de Taylor, $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) f(x) \psi(x) \mathrm{d}x$.
Ces calculs peuvent se généraliser à la mesure d'une quantité de mouvement. En effet, $\tilde{\varphi}(p) = p\tilde{\psi}(p)$, d'où $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\varphi}(p) \mathrm{d}p$ puis $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) \mathrm{d}p$ et l'on peut généraliser à $\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^* f(p) \tilde{\psi}(p) \mathrm{d}p$. Les considérations suivantes visent à exhiber une symétrie plus forte entre les deux formules pour la position et la quantité de mouvement.

**Exercice 1**

Trouver l'expression de $\varphi(x)$ ayant pour transformée $p\tilde{\psi}(p)$.

▷ **Éléments de réponse.**

C'est facile, si l'on connaît un peu la transformée de Fourier. Pour trouver la réponse, dérivons $\psi$ : $\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ip}{\hbar} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}p$ d'où $-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = \mathcal{F}^{-1}(p\tilde{\psi}(p)$ d'où $\mathcal{F}(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}) = p\tilde{\psi}(p) = p\mathcal{F}(\psi(x))$.

**Heuristique**

En introduisant l'opérateur $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, on peut donc énoncer

$\boxed{\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}]\psi(x)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}]\mathrm{d}x}$, formule tout à fait symétrique avec la première modulo l'opérateur $p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. De même que précédemment, on peut énoncer facilement $\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[(-i\hbar)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}]\psi(x)\mathrm{d}x$, car $p^2 \to (i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$. De même, $\langle p^n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[(-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x^n}]\psi(x)\mathrm{d}x$ et pour calculer $\langle f(p)\rangle$, décomposer d'abord en série de Taylor.

*Remarque.* On obtient donc une équation aux valeurs propres $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}) = p(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{p}{\hbar}x}$, autrement dit, en notant $\mathcal{O}$ l'opérateur $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $p \in \mathrm{Sp}(\psi_p(x))$.

Interprétons cela en termes d'énergie totale. Puisque, par hypothèse, nous ne considérons que des forces conservatives, $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, d'où $\langle E\rangle = \frac{1}{2m}\langle p^2\rangle + \langle V(x)\rangle$ et l'on sait calculer donc $\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)]\psi(x)\mathrm{d}x$. Dans un état stationnaire d'énergie $E$ représenté par $\psi$, *i.e.* proportionnel à $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$, $\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$, on a $\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)E\psi(x)\mathrm{d}x = E$. Vraisemblablement, $\langle E^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 +}{\partial x^2}V(x)]^2\psi(x)\mathrm{d}x = E^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = E^2$ après calcul. (Attention ! $[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 +}{\partial x^2}V(x)]^2$ se développe comme une somme de quatre termes, car les deux opérateurs ne commutent pas a priori.) Ainsi, $\sigma_E^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = 0$, d'où $E = \langle E\rangle$ presque sûrement. Plus précisément :

**Théorème.** ***(Théorème d'Ehrenfest)***

La physique classique est la moyenne de la physique quantique.

En effet, en physique classique, $\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{p}{m}$ et $\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}$, et en physique quantique, $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle p\rangle}{m}$ et $\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle -\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}\right\rangle$.

▷ On a $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x$, $\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)[-i\hbar\frac{\partial psi(x,t)}{\partial x}]\mathrm{d}x$ et $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$ où $V(x)$ est réel. On va largement utiliser le théorème d'intégration par parties.

On calcule $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\psi^*(x,t)x\psi(x,t)]\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}[x\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi + x\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi]\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{i\hbar}{2m}[x\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - x\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}]\mathrm{d}x$. Or $\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V(x)\psi$ qui est la somme des deux termes $x\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}x\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}xV(x)\psi\psi^*$ et $x\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}x\psi\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}xV(x)\psi\psi^*$. D'autre part, $\int_{-\infty}^{+\infty}x\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\mathrm{d}x = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}[x\psi\frac{\partial\psi}{\partial x}]\mathrm{d}x}_{[x\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}]_{x=-\infty}^{+\infty} = 0} - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\mathrm{d}x = -\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}[\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\psi^*]\mathrm{d}x}_{=0} + \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\mathrm{d}x$, d'où $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\underbrace{[x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi)]}_{= x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - 2\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*[-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial x}]\psi\mathrm{d}x = \frac{\langle p\rangle}{m}$, car $\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} = \psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}$ qui donne $\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) = \frac{\partial}{\partial x}[\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}] = 2\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$.

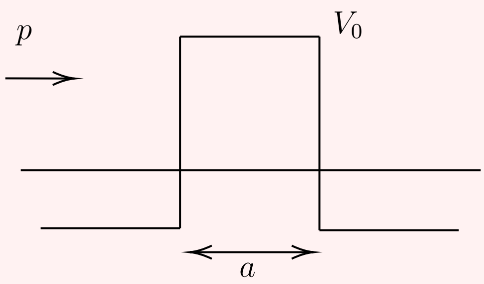
D'autre part, $\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\psi^*[-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}]]\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(-\frac{\partial\psi}{\partial x})\psi\mathrm{d}x = \left\langle -\frac{\partial t}{\partial x}\right\rangle$. ■

## 1.3 Puits et barrières de potentiel

### 1.3.1 Barrières de potentiel

**Définition.** ***(Barrière de potentiel)***

On appelle barrière de potentiel une configuration du type




où $0 < E < V_0$.
On définit le *coefficient de transmission* associé à cette barrière $\mathfrak{T} = [1 + \frac{V_0^2 \sin^2(\frac{a}{\lambda})}{4E(V_0 - E)}]^{-1} \approx 1$ si $E \to V_0$, $T \in [0{,}1]$. On pose aussi le coefficient de réflexion $\mathfrak{R} = 1 - \mathfrak{T}$. On définit également la *longueur de pénétration* $\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$.

**Définition.** ***(Barrière épaisse)***

On parle de *barrière épaisse* lorsque $\frac{a}{\lambda} \gg 1$.

**VOC** C'est cohérent, car dans ce cas, la particule a peu de chances de franchir la barrière de potentiel. En effet, on a alors $\sinh(\frac{a}{\lambda}) \approx \frac{1}{2}e^{\frac{a}{\lambda}}$ d'où $\mathfrak{T} \approx e^{\frac{-2a}{\lambda}} \ll 1$.

**Curiosité.** ***(Effet tunnel optique)***

Cet effet tunnel admet un parallèle très clair en optique géométrique donné par le phénomène de réflexion totale.

## 1.4 Formalisme générale de la physique quantique

LES propriétés vérifiées par la fonction d'onde et sa transformée de Fourier nous poussent à définir :

**Définition.** ***(Espace des kets)***

On note $|\psi\rangle$ un *vecteur abstrait* d'*étiquette* $\psi$ représentant l'état d'un certain système. On suppose que l'ensemble des *kets* $\{|\psi\rangle, \psi\}$ est un espace vectoriel complexe, nommément, muni d'une addition :

$$\forall \psi_1, \psi_2 \ \exists \psi \quad |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi\rangle$$

qui soit commutative, associative, qu'il existe un neutre, dit *ket*, noté $|\emptyset\rangle$, ou 0 s'il n'y a pas ambiguïté, de sorte que tout ket possède un inverse pour l'addition des kets ; muni également d'une multiplication scalaire :

$$\forall \psi \ \forall \alpha \in \mathbb{C} \ \exists \varphi \quad \alpha |\psi\rangle = |\varphi\rangle$$

qui soit une action compatible : $\alpha(\beta |\psi\rangle) = (\alpha\beta) |\psi\rangle$, telle que $1 |\psi\rangle = |\psi\rangle$ et que l'on ait les deux pseudo-distributivité entre addition et multiplication scalaire.
Sur cet espace, on définit un produit hermitien $\langle\psi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\varphi(x)\mathrm{d}x$. On appelle parfois *bras* les $\langle\psi|$. On voit alors qu'ils forment un espace vectoriel complexe d'opérateurs, car on applique un bra à un ket, l'espace des bras, qui n'est autre que le dual de l'espace des kets.

*Remarque.* L'opérateur bra vérifie $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$.

# 1.5 Spin

## 1.5.1 Oscillations de Rabi

### 1.5.1.1 Solution classique des oscillations de Rabi

### 1.5.1.2 Considérations quantiques sur l'oscillation de Rabi

**Formule.** ***(Renversement du spin)***

$$\mathbb{P}(|+z\rangle \to |-z\rangle) = \frac{1}{2}(1 - \cos(\omega_R t)) \left(\frac{\omega_1}{\omega_R}\right)^2$$

où $\omega_R = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2}$ où $\delta = \omega - \omega_0$.

# Appendice