
Introduction à la Physique Quantique

Notes de Cours L3

Colin Bossu Réaubourg

Université Paris Cité

troisième année de licence de Physique
13 décembre 2025

Table des matières

1	Introduction : L'aube d'une nouvelle physique	3
1.1	Le spectre du corps noir et la quantification de l'énergie	3
1.2	L'effet photoélectrique et la nature corpusculaire de la lumière	3
1.3	Le modèle atomique de Bohr et la quantification du moment cinétique	4
1.4	Les ondes de matière de de Broglie	4
2	L'équation de Schrödinger et la mécanique ondulatoire	5
2.1	Dérivation de l'équation pour une particule libre	5
2.2	Généralisation à une particule dans un potentiel	5
2.3	Interprétation probabiliste et normalisation	6
2.4	Courant de probabilité et conservation	6
2.5	États stationnaires et équation de Schrödinger indépendante du temps	6
3	Le formalisme général de la mécanique quantique	7
3.1	Espace des états et principe de superposition	7
3.2	Espace dual, bras et produit hermitien	7
3.3	Observables et opérateurs hermitiens	8
3.4	La mesure en mécanique quantique	8
3.5	Évolution temporelle et théorème d'Ehrenfest	8
4	Le moment cinétique de spin	9
4.1	L'expérience de Stern et Gerlach	9
4.2	Formalisme général et algèbre des moments cinétiques	9
4.3	Exemple 1 : Le spin $1/2$	10
4.4	Exemple 2 : Le spin 1	10
4.5	Interaction avec un champ magnétique et effet Zeeman	11
5	Commutation, Incertitude et Évolution	11
5.1	Observables compatibles et incompatibles	11
5.2	Relations d'incertitude d'Heisenberg-Robertson	12
5.3	Constantes du mouvement	12
6	L'oscillateur harmonique quantique	13
6.1	Méthode algébrique : opérateurs de création et d'annihilation	13
6.2	Spectre d'énergie et états propres (états de Fock)	13
6.3	Fonctions d'onde	14
6.4	États cohérents : le pont vers le classique	14

1 Introduction : L'aube d'une nouvelle physique

Au tournant du XX^e siècle, la physique classique, forte des succès de la mécanique newtonienne et de l'électromagnétisme de Maxwell, semblait presque achevée. Cependant, une série d'expériences et d'incohérences théoriques commencèrent à ébranler cet édifice. Des phénomènes tels que le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique ou encore la stabilité des atomes ne trouvaient aucune explication satisfaisante dans le cadre classique. Ces difficultés ont marqué le début d'une révolution conceptuelle, menant à l'élaboration de la physique quantique. Ce cours se propose de retracer les étapes fondatrices de cette théorie et d'en développer le formalisme mathématique rigoureux.

1.1 Le spectre du corps noir et la quantification de l'énergie

Un corps noir est un objet idéalisé qui absorbe toute radiation électromagnétique incidente, quelle que soit la fréquence. Une bonne approximation expérimentale est une cavité isotherme percée d'un petit trou. La physique classique, via la loi de Rayleigh-Jeans, prédisait que la densité d'énergie émise par un corps noir devrait croître indéfiniment avec la fréquence, menant à une énergie totale infinie — un résultat manifestement absurde connu sous le nom de "catastrophe ultraviolette".

En 1900, Max Planck résolut ce paradoxe en formulant une hypothèse radicale : l'énergie des oscillateurs électromagnétiques au sein de la cavité ne peut prendre que des valeurs discrètes, multiples d'un quantum d'énergie.

Propriété 1.1 (Quantification de Planck). L'énergie d'un mode d'oscillation du champ électromagnétique de fréquence ν ne peut prendre que des valeurs discrètes données par :

$$E_n = n\hbar\nu \quad (1)$$

où n est un entier positif ($n = 0, 1, 2, \dots$) et \hbar est une nouvelle constante fondamentale, la constante de Planck ($\hbar \approx 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$).

Sur la base de cette quantification, l'énergie moyenne d'un mode de fréquence ν à la température T n'est plus $k_B T$ comme en physique classique, mais devient :

$$\bar{E}_\nu = \frac{\hbar\nu}{e^{\beta\hbar\nu} - 1} \quad (2)$$

où $\beta = 1/(k_B T)$ et k_B est la constante de Boltzmann. Cette expression, multipliée par la densité de modes, conduit à la loi de Planck pour la densité spectrale d'énergie, qui est en parfait accord avec les résultats expérimentaux.

1.2 L'effet photoélectrique et la nature corpusculaire de la lumière

L'effet photoélectrique, l'émission d'électrons par un matériau lorsqu'il est éclairé par de la lumière, présentait également des caractéristiques inexplicables par la théorie ondulatoire classique. On observait notamment l'existence d'une fréquence seuil en dessous de laquelle aucun électron n'était émis, quelle que soit l'intensité lumineuse.

En 1905, Albert Einstein proposa une explication en étendant l'idée de Planck. Il postula que la lumière elle-même est composée de "grains" d'énergie, les photons, chacun transportant une énergie $E = h\nu$.

Propriété 1.2 (Énergie du photon). L'énergie d'un photon est directement proportionnelle à sa fréquence :

$$E = h\nu \quad (3)$$

Lorsqu'un photon frappe un électron dans le métal, il lui transfère son énergie. Pour être éjecté, l'électron doit surmonter une barrière de potentiel appelée travail d'extraction, W . L'énergie cinétique maximale des électrons expulsés est donc :

$$E_{c,\max} = h\nu - W \quad (4)$$

Cette équation explique immédiatement l'existence d'une fréquence seuil $\nu_0 = W/h$ (car $E_{c,\max}$ doit être positive) et la dépendance linéaire de l'énergie des électrons avec la fréquence de la lumière, en accord avec les expériences.

1.3 Le modèle atomique de Bohr et la quantification du moment cinétique

Le modèle planétaire de l'atome de Rutherford, avec des électrons orbitant autour d'un noyau, était instable selon l'électromagnétisme classique : une charge accélérée devrait rayonner de l'énergie en continu et donc spiraler vers le noyau.

En 1913, Niels Bohr proposa un modèle pour l'atome d'hydrogène qui, bien qu'empirique, introduisait une nouvelle règle de quantification.

Propriété 1.3 (Quantification de Bohr). Seules certaines orbites circulaires sont stables pour l'électron. Ces orbites sont celles pour lesquelles le moment cinétique orbital L est un multiple entier de la constante de Planck réduite $\hbar = h/(2\pi)$.

$$L = n\hbar, \quad \text{avec } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

Cette condition implique la quantification des rayons des orbites et, par conséquent, des niveaux d'énergie de l'électron :

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \quad (6)$$

Le modèle de Bohr expliquait brillamment les raies spectrales de l'atome d'hydrogène, mais restait arbitraire et ne pouvait être généralisé à des atomes plus complexes.

1.4 Les ondes de matière de de Broglie

En 1924, Louis de Broglie, dans sa thèse de doctorat, généralisa la dualité onde-corpuscule de la lumière à toutes les particules matérielles. Il postula que toute particule de quantité de mouvement p est associée à une onde de longueur d'onde λ .

Propriété 1.4 (Hypothèse de de Broglie). À toute particule d'énergie E et de quantité de mouvement \vec{p} , on associe une onde de pulsation ω et de vecteur d'onde \vec{k} telles que :

$$E = \hbar\omega \tag{7}$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \tag{8}$$

Cette hypothèse offre une interprétation élégante de la condition de quantification de Bohr : les orbites stables sont celles dont la circonférence est un multiple entier de la longueur d'onde de l'électron, formant ainsi une onde stationnaire. Cette idée fut confirmée expérimentalement en 1927 par la diffraction d'électrons par Davisson et Germer.

2 L'équation de Schrödinger et la mécanique ondulatoire

S'inspirant de l'hypothèse de de Broglie, Erwin Schrödinger développa en 1926 une équation différentielle pour décrire l'évolution de l'onde de matière associée à une particule. Cette "fonction d'onde", notée $\Psi(x, t)$, devait contenir toute l'information sur l'état de la particule.

2.1 Dérivation de l'équation pour une particule libre

Pour une particule libre non relativiste de masse m , l'énergie est purement cinétique : $E = p^2/(2m)$. En utilisant les relations de de Broglie ($E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$), on obtient la relation de dispersion pour l'onde de matière :

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{9}$$

Schrödinger chercha une équation d'onde linéaire dont les solutions planes, de la forme $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$, satisferaient cette relation. Il constata qu'en appliquant l'opérateur de dérivée temporelle $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ et l'opérateur de dérivée spatiale seconde $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ à une telle onde plane, on obtenait :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) &= \hbar\omega\Psi(x, t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x, t) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\Psi(x, t) \end{aligned}$$

En égalant ces deux expressions conformément à la relation de dispersion, il obtint l'équation de Schrödinger pour une particule libre à une dimension :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} \tag{10}$$

2.2 Généralisation à une particule dans un potentiel

Pour une particule soumise à une énergie potentielle $V(x)$, l'énergie totale classique est $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Par analogie, Schrödinger postula que l'équation d'onde devait être modifiée en ajoutant un terme potentiel.

Théorème 2.1 (Équation de Schrödinger dépendante du temps). L'évolution de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ d'une particule de masse m dans un potentiel $V(x, t)$ est régie par :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \Psi(x, t) \quad (11)$$

L'opérateur entre crochets est appelé l'opérateur Hamiltonien, noté \hat{H} .

2.3 Interprétation probabiliste et normalisation

L'interprétation physique de la fonction d'onde fut proposée par Max Born.

Propriété 2.1 (Règle de Born). La quantité $|\Psi(x, t)|^2$ représente la densité de probabilité de trouver la particule à la position x à l'instant t . La probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[a, b]$ est donnée par :

$$P(x \in [a, b], t) = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (12)$$

Puisque la particule doit se trouver quelque part dans l'espace, la probabilité totale doit être égale à 1. Cela impose une condition de normalisation à la fonction d'onde :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (13)$$

Une fonction d'onde satisfaisant cette condition est dite "de carré sommable". L'ensemble de ces fonctions forme l'espace de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$.

2.4 Courant de probabilité et conservation

On peut montrer à partir de l'équation de Schrödinger que la probabilité totale est conservée au cours du temps. Pour ce faire, on introduit le courant de probabilité $j(x, t)$, qui satisfait une équation de continuité locale $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$, où $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ est la densité de probabilité.

Définition 2.1 (Courant de probabilité). *Le courant de probabilité $j(x, t)$ est défini par :*

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad (14)$$

Cette quantité mesure le flux de probabilité à travers le point x . L'équation de continuité assure que toute variation locale de la densité de probabilité est due à un flux entrant ou sortant, garantissant la conservation de la probabilité totale.

2.5 États stationnaires et équation de Schrödinger indépendante du temps

Un cas particulièrement important est celui où le potentiel V ne dépend pas du temps. On peut alors chercher des solutions à variables séparées de la forme $\Psi(x, t) = \psi(x)f(t)$. En substituant dans l'équation de Schrödinger, on trouve que $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$, où E est une constante d'intégration qui s'interprète comme l'énergie de la particule. La fonction spatiale $\psi(x)$ doit alors satisfaire l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

Théorème 2.2 (Équation de Schrödinger indépendante du temps). Pour un potentiel stationnaire $V(x)$, les fonctions d'onde des états d'énergie définie E , appelés états stationnaires, sont les solutions de l'équation aux valeurs propres :

$$\hat{H}\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (15)$$

Pour un état stationnaire, la densité de probabilité $|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2$ est indépendante du temps, justifiant le terme "stationnaire". Les valeurs de E pour lesquelles il existe des solutions physiquement acceptables (normalisables) constituent le spectre d'énergie du système.

3 Le formalisme général de la mécanique quantique

La mécanique ondulatoire est une première formulation de la théorie quantique, mais il est nécessaire d'adopter un cadre mathématique plus général et abstrait pour décrire tous les phénomènes quantiques, y compris ceux sans analogue classique comme le spin. Ce formalisme repose sur la théorie des espaces de Hilbert.

3.1 Espace des états et principe de superposition

Définition 3.1 (Postulat 1 : Espace des états). *L'état d'un système quantique à un instant donné est décrit par un vecteur, appelé **ket** et noté $|\psi\rangle$, dans un espace vectoriel complexe doté d'un produit scalaire, appelé *espace de Hilbert* \mathcal{H} .*

Remarque 3.1. Le ket $|\psi\rangle$ est un vecteur abstrait. La fonction d'onde $\psi(x)$ en est une "représentation" particulière, correspondant à ses composantes dans la "base" des positions : $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$.

La structure d'espace vectoriel de \mathcal{H} incarne le **principe de superposition** : si $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont deux états possibles du système, alors toute combinaison linéaire $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ (avec $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$) est également un état possible.

3.2 Espace dual, bras et produit hermitien

Définition 3.2 (Espace dual et bras). *À tout espace de kets \mathcal{H} est associé son espace dual \mathcal{H}^* , qui est l'espace des formes linéaires continues sur \mathcal{H} . Le théorème de Riesz établit une correspondance antilinéaire entre chaque ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ et un unique élément de \mathcal{H}^* , appelé **bra** et noté $\langle\psi|$.*

Le bra $\langle\psi|$ peut être vu comme l'opérateur qui, appliqué à un ket $|\phi\rangle$, donne le nombre complexe correspondant au produit scalaire. Ce produit scalaire, noté $\langle\psi|\phi\rangle$ (un "bra-ket"), possède les propriétés suivantes :

1. **Linéarité à droite** : $\langle\psi|(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle) = c_1\langle\psi|\phi_1\rangle + c_2\langle\psi|\phi_2\rangle$
2. **Antilinéarité à gauche** : $(c_1\langle\psi_1| + c_2\langle\psi_2|)|\phi\rangle = c_1^*\langle\psi_1|\phi\rangle + c_2^*\langle\psi_2|\phi\rangle$
3. **Symétrie hermitienne** : $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$
4. **Positivité** : $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, avec égalité si et seulement si $|\psi\rangle = 0$.

La norme d'un ket est définie par $\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$. Les états physiques sont représentés par des kets normalisés à 1, i.e., $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

3.3 Observables et opérateurs hermitiens

Définition 3.3 (Postulat 2 : Observables). *À toute grandeur physique mesurable, ou observable A , est associé un opérateur linéaire hermitien (ou autoadjoint) \hat{A} agissant sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} .*

Un opérateur \hat{A} est dit hermitien si $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, où \hat{A}^\dagger est l'opérateur adjoint de \hat{A} , défini par la relation $\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\phi\rangle$ pour tous kets $|\psi\rangle, |\phi\rangle$.

Propriété 3.1 (Propriétés des opérateurs hermitiens). — Les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont toujours réelles.
 — Les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.
 — Les vecteurs propres d'un opérateur hermitien forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert (théorème spectral).

3.4 La mesure en mécanique quantique

Définition 3.4 (Postulat 3 : Résultats de la mesure). *Les seuls résultats possibles d'une mesure de l'observable A sont les valeurs propres a_n de l'opérateur correspondant \hat{A} .*

Définition 3.5 (Postulat 4 : Probabilités de la mesure (Règle de Born)). *Si un système est dans l'état normalisé $|\psi\rangle$, la probabilité de mesurer la valeur propre non-dégénérée a_n de l'observable A est donnée par :*

$$P(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2 \quad (16)$$

où $|a_n\rangle$ est le vecteur propre normalisé associé à a_n . $\langle a_n|\psi\rangle$ est appelé l'amplitude de probabilité. Si la valeur propre est p -fois dégénérée, la probabilité est $P(a_n) = \sum_{i=1}^p |\langle a_n^i|\psi\rangle|^2$.

Définition 3.6 (Postulat 5 : Réduction du paquet d'onde). *Immédiatement après une mesure de A ayant donné le résultat a_n , l'état du système est projeté sur le sous-espace propre associé à a_n . Si a_n est non-dégénérée, l'état devient :*

$$|\psi\rangle_{\text{après}} = |a_n\rangle \quad (17)$$

La valeur moyenne (ou espérance) d'une mesure de A sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ est donnée par :

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (18)$$

3.5 Évolution temporelle et théorème d'Ehrenfest

Définition 3.7 (Postulat 6 : Évolution temporelle). *L'évolution temporelle de l'état $|\psi(t)\rangle$ d'un système est régie par l'équation de Schrödinger :*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (19)$$

où \hat{H} est l'opérateur Hamiltonien du système.

Si l'Hamiltonien ne dépend pas du temps, la solution formelle de cette équation est :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad \text{avec } \hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \quad (20)$$

L'opérateur $\hat{U}(t, t_0)$, appelé opérateur d'évolution temporelle, est un opérateur unitaire ($\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$), ce qui garantit la conservation de la norme de l'état au cours du temps.

Théorème 3.1 (Théorème d'Ehrenfest). L'évolution temporelle de la valeur moyenne d'une observable A est donnée par :

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (21)$$

Ce théorème établit un pont important entre la mécanique quantique et la mécanique classique. Une observable A dont l'opérateur ne dépend pas explicitement du temps est une **constante du mouvement** si sa valeur moyenne est conservée, ce qui est le cas si $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$.

4 Le moment cinétique de spin

Le spin est une propriété intrinsèque des particules, un moment cinétique qui n'a pas d'analogie en mécanique classique. Il ne provient pas d'une rotation de la particule sur elle-même mais est une caractéristique fondamentale au même titre que la masse ou la charge.

4.1 L'expérience de Stern et Gerlach

L'expérience de Stern et Gerlach (1922) a fourni la première preuve de la quantification du moment cinétique. Des atomes d'argent (électriquement neutres mais possédant un moment magnétique dû à leur électron de valence) sont envoyés à travers un champ magnétique non-uniforme.

- **Prédiction classique :** Le moment magnétique des atomes étant orienté aléatoirement, la force magnétique devrait dévier les atomes de manière continue, produisant une tache continue sur l'écran de détection.
- **Résultat observé :** Le faisceau se sépare en un nombre discret de faisceaux. Pour les atomes d'argent, on observe deux faisceaux distincts.

Cette observation spectaculaire signifie que la projection du moment cinétique sur un axe donné est quantifiée. Pour une particule de spin s , la mesure de la projection du spin selon n'importe quel axe ne peut donner que $2s + 1$ valeurs discrètes.

4.2 Formalisme général et algèbre des moments cinétiques

Pour décrire le spin, on introduit un opérateur vectoriel $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ dont les composantes sont des observables (opérateurs hermitiens). Ces composantes ne commutent pas entre elles et obéissent aux relations de commutation canoniques de tout moment cinétique :

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{S}_k \quad (22)$$

où ϵ_{ijk} est le symbole de Levi-Civita. On définit également l'opérateur "carré du spin" $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$. Cet opérateur commute avec toutes les composantes de $\hat{\vec{S}}$:

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_i] = 0 \quad \text{pour } i = x, y, z \quad (23)$$

Puisque \hat{S}^2 et une de ses composantes (par convention \hat{S}_z) commutent, ils possèdent une base de vecteurs propres communs, notés $|s, m_s\rangle$. Ces états sont définis par les équations aux valeurs propres suivantes :

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle \quad (24)$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \quad (25)$$

Le nombre quantique s peut être un entier ou un demi-entier ($s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$) et définit le spin de la particule. Pour un s donné, le nombre quantique magnétique m_s peut prendre les $2s+1$ valeurs : $m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$. L'espace des états de spin pour une particule de spin s est un espace de Hilbert de dimension $2s+1$.

4.3 Exemple 1 : Le spin 1/2

C'est le cas le plus courant pour les particules fondamentales de la matière (électrons, quarks, etc.). Ici, $s = 1/2$, donc m_s peut prendre les deux valeurs $\pm 1/2$. L'espace des états est de dimension 2. On note les vecteurs de base :

- $|+\rangle \equiv |1/2, +1/2\rangle$ (spin up)
- $|-\rangle \equiv |1/2, -1/2\rangle$ (spin down)

Dans cette base, les opérateurs de spin sont représentés par des matrices 2x2. Il est commode de les exprimer en fonction des matrices de Pauli σ_i :

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (26)$$

avec

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (27)$$

4.4 Exemple 2 : Le spin 1

Certaines particules comme le photon ou les bosons W et Z sont des particules de spin 1. Ici, $s = 1$, donc m_s peut prendre les trois valeurs $-1, 0, +1$. L'espace des états est de dimension 3. La base est formée des vecteurs $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$. Dans cette base (ordonnée par m_s décroissant), les opérateurs de spin sont représentés par les matrices 3x3 suivantes :

$$\hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$\hat{S}_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (30)$$

On peut vérifier que ces matrices satisfont bien les relations de commutation du moment cinétique.

4.5 Interaction avec un champ magnétique et effet Zeeman

Le spin d'une particule chargée lui confère un moment magnétique intrinsèque $\vec{\mu} = \gamma \vec{S}$, où γ est le rapport gyromagnétique. Placé dans un champ magnétique externe \vec{B} , ce moment magnétique interagit via l'Hamiltonien $\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Si le champ est uniforme et dirigé selon l'axe z , $\vec{B} = B_0 \vec{z}$, l'Hamiltonien devient :

$$\hat{H} = -\gamma B_0 \hat{S}_z \quad (31)$$

Les états propres de cet Hamiltonien sont les états de spin $|s, m_s\rangle$, et les niveaux d'énergie correspondants sont :

$$E_{m_s} = -\gamma B_0 (\hbar m_s) = -\hbar m_s \omega_L \quad (32)$$

où $\omega_L = \gamma B_0$ est la pulsation de Larmor. Cette interaction lève la dégénérescence en énergie des $2s + 1$ états de spin. En l'absence de champ, tous ces états ont la même énergie. En présence du champ, on obtient $2s + 1$ niveaux d'énergie distincts et équidistants. C'est l'effet Zeeman.

5 Commutation, Incertitude et Évolution

La structure mathématique de la mécanique quantique, où les observables sont représentées par des opérateurs non-commutatifs, a des conséquences physiques profondes. Elle régit ce que l'on peut mesurer simultanément, la précision de ces mesures, et la manière dont les grandeurs physiques évoluent dans le temps.

5.1 Observables compatibles et incompatibles

Définition 5.1 (Observables compatibles). Deux observables A et B sont dites compatibles si leurs opérateurs correspondants commutent : $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$. Dans le cas contraire, elles sont incompatibles.

Si deux observables sont compatibles, le théorème spectral garantit l'existence d'une base de vecteurs propres communs aux deux opérateurs. Cela signifie qu'il est possible pour le système d'avoir simultanément des valeurs bien définies pour les deux grandeurs. La mesure de l'une n'affecte pas le résultat d'une mesure subséquente de l'autre. Si elles sont incompatibles, une telle base n'existe pas, et la mesure de l'une perturbe inévitablement la connaissance que l'on a de l'autre.

Exemple 5.1 (Observables compatibles). Pour une particule libre, l'Hamiltonien $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ et l'opérateur impulsion \hat{p} commutent : $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$. L'énergie et l'impulsion sont donc compatibles et peuvent être mesurées simultanément avec une précision arbitraire. Les ondes planes e^{ikx} sont bien des états propres à la fois de l'impulsion (valeur propre $\hbar k$) et de l'énergie (valeur propre $\hbar^2 k^2/(2m)$).

5.2 Relations d'incertitude d'Heisenberg-Robertson

L'incompatibilité de deux observables est quantifiée par une relation d'incertitude. Pour un système dans un état $|\psi\rangle$, on définit l'écart-type (ou incertitude) d'une observable A par $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$.

Théorème 5.1 (Relation d'incertitude générale). Pour deux observables quelconques A et B , l'incertitude sur leurs mesures satisfait la relation :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (33)$$

Exemple 5.2 (Position et impulsion). Pour la position \hat{x} et l'impulsion \hat{p} , on a $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. La relation d'incertitude devient :

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (34)$$

Cette inégalité fondamentale exprime qu'il est impossible de connaître simultanément avec une précision infinie la position et l'impulsion d'une particule. Un état très localisé en position (petit Δx) aura nécessairement une grande dispersion en impulsion (grand Δp), et vice-versa. Les états qui minimisent cette incertitude (saturant l'inégalité) sont décrits par des paquets d'onde gaussiens.

Exemple 5.3 (Composantes du spin). Pour un spin 1/2, les composantes du spin sont incompatibles, par exemple $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$. La relation d'incertitude est :

$$\Delta S_x \cdot \Delta S_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{S}_z \rangle| \quad (35)$$

Supposons que le système est dans l'état "spin up" $|+\rangle$, qui est un état propre de \hat{S}_z avec la valeur propre $+\hbar/2$. Dans cet état, $\langle \hat{S}_z \rangle = \hbar/2$ et $\Delta S_z = 0$. La relation devient $\Delta S_x \cdot \Delta S_y \geq \hbar^2/4$. Un calcul direct montre que pour l'état $|+\rangle$, on a $\langle \hat{S}_x \rangle = 0$, $\langle \hat{S}_x^2 \rangle = \hbar^2/4$, donc $\Delta S_x = \hbar/2$. De même, $\Delta S_y = \hbar/2$. Le produit est $\Delta S_x \Delta S_y = \hbar^2/4$, ce qui sature l'inégalité. La connaissance parfaite de S_z implique une incertitude maximale sur S_x et S_y .

5.3 Constantes du mouvement

Le lien entre la commutation et l'évolution temporelle est donné par le théorème d'Ehrenfest. Une observable A dont l'opérateur \hat{A} ne dépend pas explicitement du temps est une **constante du mouvement** si sa valeur moyenne est conservée au cours du temps. D'après le théorème d'Ehrenfest, cela se produit si et seulement si l'opérateur commute avec l'Hamiltonien.

Propriété 5.1 (Conservation des observables). Une observable A (ne dépendant pas explicitement du temps) est une grandeur conservée si et seulement si :

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \quad (36)$$

Cette proposition est fondamentale : elle associe les symétries du système (traduites par des opérateurs qui commutent avec \hat{H}) à des lois de conservation.

- Si l'Hamiltonien est invariant par translation dans l'espace ($V(x)$ constant), alors $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$ et **l'impulsion est conservée**.
- Si l'Hamiltonien est invariant par translation dans le temps (V ne dépend pas de t), alors $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ et **l'énergie est conservée**.
- Si l'Hamiltonien est invariant par rotation (potentiel central), alors $[\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = 0$ et le **moment cinétique orbital est conservé**.

6 L'oscillateur harmonique quantique

L'oscillateur harmonique est un système fondamental en physique, modélisant de nombreux phénomènes autour d'une position d'équilibre stable (vibrations moléculaires, modes d'un champ électromagnétique, etc.). En mécanique quantique, il correspond à une particule de masse m soumise à un potentiel quadratique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. L'Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (37)$$

6.1 Méthode algébrique : opérateurs de création et d'annihilation

La résolution est grandement simplifiée en introduisant les opérateurs d'échelle (ou de création et d'annihilation), non hermitiens :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) \quad (\text{opérateur d'annihilation}) \quad (38)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p} \right) \quad (\text{opérateur de création}) \quad (39)$$

Ces opérateurs satisfont la relation de commutation canonique $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. L'Hamiltonien peut alors se réécrire de façon très simple en fonction de l'opérateur "nombre" $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (40)$$

6.2 Spectre d'énergie et états propres (états de Fock)

Les vecteurs propres de \hat{H} sont les mêmes que ceux de \hat{N} . On peut montrer que les valeurs propres de \hat{N} sont les entiers naturels $n = 0, 1, 2, \dots$.

Propriété 6.1 (Spectre de l'oscillateur harmonique). Les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique quantique sont quantifiés et équidistants :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (41)$$

Remarque 6.1. L'énergie de l'état fondamental ($n = 0$) n'est pas nulle : $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Cette "énergie du point zéro" est une conséquence directe du principe d'incertitude. Une particule à l'arrêt complet ($\Delta p = 0$) au fond du puits ($\Delta x = 0$) violerait l'inégalité d'Heisenberg.

L'état fondamental $|0\rangle$, appelé le vide, est défini par la condition $\hat{a}|0\rangle = 0$. Les autres états propres (états excités), ou états de Fock $|n\rangle$, sont obtenus par l'application successive de l'opérateur de création :

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \quad (42)$$

L'opérateur \hat{a}^\dagger fait "monter" le système d'un niveau d'énergie (crée un quantum d'énergie), tandis que \hat{a} le fait "descendre" (annihile un quantum) :

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (43)$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (\text{pour } n > 0) \quad (44)$$

6.3 Fonctions d'onde

Bien que la méthode algébrique soit très puissante, il est instructif de regarder la forme des fonctions d'onde $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$. La condition $\hat{a}|0\rangle = 0$ se traduit en représentation position par une équation différentielle du premier ordre :

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0 \quad (45)$$

La solution, une fois normalisée, est une gaussienne :

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (46)$$

Les fonctions d'onde des états excités $\psi_n(x)$ peuvent être obtenues en appliquant l'opérateur \hat{a}^\dagger en représentation position. Elles sont de la forme d'une gaussienne multipliée par un polynôme d'Hermite.

6.4 États cohérents : le pont vers le classique

Les états de Fock $|n\rangle$ sont purement quantiques (l'énergie est parfaitement définie, mais la valeur moyenne de la position et de l'impulsion est nulle). On peut construire d'autres états, appelés états cohérents, qui ont un comportement quasi-classique.

Définition 6.1 (État cohérent). *Un état cohérent $|\alpha\rangle$ est un état propre de l'opérateur d'annihilation, avec une valeur propre complexe $\alpha \in \mathbb{C}$:*

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (47)$$

Ces états ne sont pas stationnaires. Un état initialement cohérent $|\alpha_0\rangle$ évolue en $|\psi(t)\rangle = |\alpha(t)\rangle$ avec $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$. On peut montrer que les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion pour un tel état oscillent exactement comme un oscillateur harmonique classique :

$$\langle \hat{x} \rangle(t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha(t)) \quad (48)$$

$$\langle \hat{p} \rangle(t) = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\alpha(t)) \quad (49)$$

De plus, les états cohérents sont des paquets d'onde gaussiens qui minimisent la relation d'incertitude ($\Delta x \Delta p = \hbar/2$) à tout instant. Ils sont donc la meilleure description quantique d'un oscillateur classique et sont essentiels en optique quantique pour décrire la lumière laser.