

Table des matières

Préface	1
Louis MARCHILDON	
Avant-propos	3
Chapitre 1. Équation de Schrödinger et applications	7
1.1. État physique et grandeur physique.	8
1.1.1. État dynamique d'une particule.	8
1.1.2. Grandeurs physiques associées à une particule.	9
1.2. Fonction d'onde de carré sommable	9
1.2.1. Définition, principe de superposition	9
1.2.2. Propriétés.	10
1.3. Opérateur	11
1.3.1. Définition d'un opérateur, exemples	11
1.3.2. Opérateur hermitien	12
1.3.3. Opérateur linéaire, observable	13
1.3.4. Principe de correspondance, Hamiltonien.	14
1.4. Évolution des systèmes physiques	18
1.4.1. Équation de Schrödinger dépendant du temps	18
1.4.2. Équation de Schrödinger stationnaire	19
1.4.3. Opérateur d'évolution	20
1.5. Propriétés de l'équation de Schrödinger	22
1.5.1. Déterminisme dans l'évolution des systèmes physiques	22
1.5.2. Principe de superposition	22
1.5.3. Densité de courant de probabilité.	23

1.6. Applications de l'équation de Schrödinger	26
1.6.1. Puits de potentiel infiniment profond	26
1.6.1.1. Comportement de la particule	26
1.6.1.2. Analyse de l'équation de Schrödinger	27
1.6.1.3. Quantification de l'énergie	28
1.6.1.4. Expression de la fonction d'onde normée	29
1.6.1.5. Expression de la densité de probabilité	30
1.6.2. Marche de potentiel.	31
1.6.2.1. Cas où $E > V_0$	32
1.6.2.2. Cas où $E < V_0$	35
1.6.2.3. Conclusion.	36
1.6.3. Barrière de potentiel, effet tunnel	40
1.6.3.1. Descriptions classique et quantique, équation de Schrödinger.	40
1.6.3.2. Expression de la transparence de la barrière	42
1.6.3.3. Effet tunnel	43
1.6.3.4. Longueur de pénétration d'une particule par effet tunnel	44
1.6.4. Boîte quantique	46
1.6.4.1. Équation de Schrödinger, fonction d'onde normée	47
1.6.4.2. Spectre de la particule, dégénérescence des niveaux d'énergie	49
1.6.5. Énergie de l'état fondamental des systèmes hydrogénéoïdes	50
1.6.5.1. Équation de Schrödinger	50
1.6.5.2. Énergie de l'état fondamental	52
1.7. Exercices	53
1.7.1. Exercice 1 – Densité de courant de probabilité.	53
1.7.2. Exercice 2 – Relations d'incertitude spatiales de Heisenberg	54
1.7.3. Exercice 3 – Marche de potentiel de profondeur finie	55
1.7.4. Exercice 4 – Marche de potentiel en escalier.	56
1.7.5. Exercice 5 – Particule confinée dans un potentiel rectangulaire.	57
1.7.6. Exercice 6 – Puits de potentiel carré : états non liés.	59
1.7.7. Exercice 7 – Puits de potentiel carré : états liés	60
1.7.8. Exercice 8 – Puits de potentiel rectangulaire infiniment profond	61
1.7.9. Exercice 9 – Métal assimilé à un puits de potentiel, émission froide	62
1.7.10. Exercice 10 – Énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique	64
1.7.11. Exercice 11 – Énergie quantifiée de l'oscillateur harmonique	65
1.7.12. Exercice 12 – Étude de la molécule HCl assimilée à un oscillateur linéaire	66
1.7.13. Exercice 13 – Énergie quantifiée des systèmes hydrogénéoïdes	67

1.7.14. Exercice 14 – Circulation du vecteur densité de courant de probabilité, magnéton de Bohr	68
1.7.15. Exercice 15 – Équation de Schrödinger en présence de champ magnétique, triplet de Zeeman-Lorentz	70
1.7.16. Exercice 16 – Dédution de l'équation de Schrödinger stationnaire à partir de la relation de de Broglie	72
1.8. Solutions des exercices	73
1.8.1. Solution 1 – Densité de courant de probabilité.	73
1.8.2. Solution 2 – Relations d'incertitude spatiales de Heisenberg	75
1.8.3. Solution 3 – Marche de potentiel de profondeur finie.	79
1.8.4. Solution 4 – Marche de potentiel en escalier	82
1.8.5. Solution 5 – Particule confinée dans un potentiel rectangulaire	86
1.8.6. Solution 6 – Puits de potentiel carré : états non liés	89
1.8.7. Solution 7 – Puits de potentiel carré : états liés	94
1.8.8. Solution 8 – Puits de potentiel rectangulaire infiniment profond	103
1.8.9. Solution 9 – Métal assimilé à un puits de potentiel, émission froide	108
1.8.10. Solution 10 – Énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique	110
1.8.11. Solution 11 – Énergie quantifiée de l'oscillateur harmonique	113
1.8.12. Solution 12 – Étude de la molécule HCl assimilée à un oscillateur linéaire	117
1.8.13. Solution 13 – Énergie quantifiée des systèmes hydrogénoïdes	122
1.8.14. Solution 14 – Circulation du vecteur densité de courant de probabilité, magnéton de Bohr	126
1.8.15. Solution 15 – Équation de Schrödinger en présence de champ magnétique, triplet de Zeeman-Lorentz	129
1.8.16. Solution 16 – Dédution de l'équation de Schrödinger stationnaire à partir de la relation de de Broglie	132
Chapitre 2. Opérateurs hermitiens, notations de Dirac	137
2.1. Bases orthonormées dans l'espace des fonctions d'onde de carré sommable	138
2.1.1. Sous-espace des fonctions d'onde de carré sommable	138
2.1.2. Définition des bases orthonormées discrètes	139
2.1.3. Composante et norme d'une fonction d'onde	140
2.1.4. Relation de fermeture	141
2.2. Espace des états, notations de Dirac	142
2.2.1. Définition.	142
2.2.2. Vecteur ket, vecteur bra	143

2.2.3. Propriétés du produit scalaire	144
2.2.4. Bases orthonormées discrètes, composante d'un ket	144
2.3. Opérateurs hermitiens.	145
2.3.1. Opérateur linéaire, élément de matrice	145
2.3.2. Projecteur sur un ket, projecteur sur un sous-espace	146
2.3.3. Opérateur autoadjoint, conjugaison hermitienne.	149
2.3.4. Fonctions d'opérateurs	150
2.4. Algèbre des commutateurs	151
2.4.1. Crochet de Poisson	151
2.4.2. Commutation de fonctions d'opérateurs	154
2.4.3. Trace d'un opérateur	158
2.5. Exercices	159
2.5.1. Exercice 1 – Propriétés des commutateurs	159
2.5.2. Exercice 2 – Trace d'un opérateur	160
2.5.3. Exercice 3 – Fonction d'opérateurs	160
2.5.4. Exercice 4 – Opérateur unitaire infinitésimal.	161
2.5.5. Exercice 5 – Propriétés des matrices de Pauli	161
2.5.6. Exercice 6 – Opérateur densité	162
2.5.7. Exercice 7 – Opérateur d'évolution	162
2.5.8. Exercice 8 – Opérateur moment cinétique orbital	163
2.6. Solutions des exercices	163
2.6.1. Solution 1 – Propriétés des commutateurs	163
2.6.2. Solution 2 – Trace d'un opérateur	167
2.6.3. Solution 3 – Fonction d'opérateurs.	169
2.6.4. Solution 4 – Opérateur unitaire infinitésimal.	171
2.6.5. Solution 5 – Propriétés des matrices de Pauli	173
2.6.6. Solution 6 – Opérateur densité	177
2.6.7. Solution 7 – Opérateur d'évolution	178
2.6.8. Solution 8 – Opérateur moment cinétique orbital	182

Chapitre 3. Valeurs propres et vecteurs propres d'une observable.

3.1. Représentation	186
3.1.1. Définition.	186
3.1.2. Représentation des kets et des bras.	187
3.1.3. Représentation des opérateurs	187
3.1.4. Matrice hermitienne	189
3.2. Équation aux valeurs propres, valeur moyenne.	190
3.2.1. Définitions, dégénérescence.	190
3.2.2. Équation caractéristique	193

3.2.3. Propriétés des vecteurs propres et des valeurs propres d'un opérateur hermitien	196
3.2.4. Évolution de la valeur moyenne d'une observable	197
3.2.5. Ensemble complet d'observables qui commutent	198
3.3. Systèmes conservatifs.	199
3.3.1. Définition.	199
3.3.2. Intégration de l'équation de Schrödinger	199
3.3.3. Théorème d'Ehrenfest	201
3.4. Exercices	204
3.4.1. Exercice 1 – Matrices de Pauli, valeurs propres et vecteurs propres	204
3.4.2. Exercice 2 – Observables associées au spin	204
3.4.3. Exercice 3 – Évolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique : ECOC, précession de Larmor.	205
3.4.4. Exercice 4 – Valeur propre de l'opérateur carré moment cinétique.	207
3.4.5. Exercice 5 – Constante de mouvement, bons nombres quantiques	207
3.4.6. Exercice 6 – Évolution des valeurs moyennes des opérateurs associés à la position et à l'impulsion	208
3.4.7. Exercice 7 – Particule soumise à divers potentiels	208
3.4.8. Exercice 8 – Dipôle moléculaire oscillant, écart quadratique moyen	209
3.4.9. Exercice 9 – Puits de potentiel infini, relation d'incertitude temps-énergie	210
3.4.10. Exercice 10 – Étude d'un système conservatif	212
3.4.11. Exercice 11 – Évolution de l'opérateur densité.	212
3.4.12. Exercice 12 – Évolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique	213
3.5. Solutions des exercices	214
3.5.1. Solution 1 – Matrices de Pauli, valeurs propres et vecteurs propres	214
3.5.2. Solution 2 – Observables associées au spin.	217
3.5.3. Solution 3 – Évolution d'un spin 1/2 dans un champ magnétique : ECOC, précession de Larmor.	221
3.5.4. Solution 4 – Valeur propre de l'opérateur carré moment cinétique.	224
3.5.5. Solution 5 – Constante de mouvement, bons nombres quantiques	230
3.5.6. Solution 6 – Évolution des valeurs moyennes des opérateurs associés à la position et à l'impulsion	231

3.5.7. Solution 7 – Particule soumise à divers potentiels.	236
3.5.8. Solution 8 – Dipôle moléculaire oscillant, écart quadratique moyen.	238
3.5.9. Solution 9 – Puits de potentiel infini, relation d’incertitude temps-énergie	243
3.5.10. Solution 10 – Étude d’un système conservatif	252
3.5.11. Solution 11 – Évolution de l’opérateur densité.	259
3.5.12. Solution 12 – Évolution d’un spin 1/2 dans un champ magnétique	262
Annexe 1. Puits quantiques de matériaux semi-conducteurs	267
Annexe 2. Boîtes quantiques de matériaux semi-conducteurs	275
Annexe 3. Transparence d’une barrière de potentiel, phénomène de résonance	279
Bibliographie	285
Index	289
Sommaire de <i>Introduction à la mécanique quantique 1</i>.	293