

SAVOIRS

PHYSIQUE

ACTUELS

MÉCANIQUE QUANTIQUE

TOME I
Nouvelle édition

●
CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

CNRS ÉDITIONS



edp sciences

MÉCANIQUE QUANTIQUE I

CLAUDE COHEN-TANNOUJJI
BERNARD DIU
FRANCK LALOË

Cet ouvrage, issu de nombreuses années d'enseignements universitaires à divers niveaux, a été conçu afin de faciliter le premier contact avec la physique quantique et d'aider ensuite le lecteur à progresser continuellement dans la compréhension de cette physique. Les deux premiers tomes, publiés il y a plus de 40 ans, sont devenus des classiques dans le monde entier, traduits dans de multiples langues. Ils se placent toutefois à un niveau intermédiaire et ont été complétés par un troisième tome d'un niveau plus avancé. L'ensemble est systématiquement fondé sur une approche progressive des problèmes, où aucune difficulté n'est passée sous silence et où chaque aspect du problème est discuté (en partant souvent d'un rappel classique).

Cette volonté d'aller au fond des choses se concrétise dans la structure même de l'ouvrage, faite de deux textes distincts mais imbriqués : les « chapitres » et les « compléments ». Les chapitres présentent les idées générales et les notions de base. Chacun d'entre eux est suivi de plusieurs compléments, en nombre variable, qui illustrent les méthodes et concepts qui viennent d'être introduits ; les compléments sont des éléments indépendants, dont le but est de proposer un large éventail d'applications et prolongements intéressants. Pour faciliter l'orientation du lecteur et lui permettre d'organiser ses lectures successives, un guide de lecture des compléments est proposé à la fin de chaque chapitre.

Le tome I fournit une introduction générale, suivie d'un chapitre détaillé qui décrit les outils mathématiques de base de la mécanique quantique. L'expérience d'enseignement des auteurs a montré que cette présentation est à terme la plus efficace. Les postulats sont ensuite clairement énoncés à partir du troisième chapitre avec de nombreuses applications en compléments. Ensuite sont décrites quelques grandes applications de la mécanique quantique, par exemple le spin et les systèmes à deux niveaux, ou encore l'oscillateur harmonique qui donne lieu à de très nombreuses applications (vibration des molécules, phonons, etc.) dont bon nombre font l'objet d'un complément spécifique.

Claude Cohen-Tannoudji a été chercheur CNRS, puis professeur successivement à l'Université de Paris et au Collège de France, donnant des cours dont l'influence scientifique a été considérable. Il a été lauréat du Prix Nobel en 1997, avec Steve Chu et Williams Phillips, pour ses nombreuses contributions à la recherche, en particulier dans le domaine du refroidissement et du piégeage d'atomes par des faisceaux laser.

Bernard Diu a été professeur à l'Université de Paris et y a enseigné divers domaines de la physique, en particulier la mécanique quantique et la physique statistique, sur laquelle il a écrit un ouvrage de référence avec trois co-auteurs. Il a toujours montré un intérêt soutenu pour l'enseignement et la diffusion des sciences. Son domaine de recherche principal est la physique des particules.

Franck Laloë a été maître-assistant attaché aux cours de mécanique quantique, puis chercheur CNRS au sein du Laboratoire Kastler Brossel. Ses travaux de recherches ont porté sur divers effets liés aux statistiques quantiques, l'orientation nucléaire de l'hélium trois par pompage optique, les ondes de spin dans les gaz à basse température, et divers aspects de la mécanique quantique fondamentale.

Série Physique dirigée par Michèle LEDUC et Michel LE BELLAC

SAVOIRS ACTUELS

Collection dirigée par Michèle LEDUC

CNRS ÉDITIONS

www.cnrseditions.fr



edp sciences
www.edpsciences.org

Création graphique : Béatrice Couëdel



64 €

ISBN EDP Sciences 978-2-7598-2287-4
ISBN CNRS ÉDITIONS 978-2-271-12498-2

Ces ouvrages, écrits par des chercheurs, reflètent des enseignements dispensés dans le cadre de la formation à la recherche. Ils s'adressent donc aux étudiants avancés, aux chercheurs désireux de perfectionner leurs connaissances ainsi qu'à tout lecteur passionné par la science contemporaine.

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu
et Franck Laloë

Mécanique quantique

Tome I

Nouvelle édition

Collection dirigée par
Michèle Leduc et Michel Le Bellac

SAVOIRS ACTUELS

EDP Sciences/CNRS ÉDITIONS

Dans la même collection :

Analyse dans les espaces métriques

Hervé Pajot et Emmanuel Russ

Comprenons-nous vraiment la mécanique quantique ? 2^e édition

Franck Laloë

Mécanique quantique - Tomes II et III

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë

Cohomologie galoisienne

David Harari

Optique non linéaire

François Hache

Chimie verte

Jacques Augé et Marie-Christine Scherrmann

Ouvrage publié grâce au mécénat du
Centre National de la Recherche Scientifique,
de Paris-Sciences-et-Lettres et du Collège de France.

Ouvrage publié avec le soutien du laboratoire Kastler-Brossel.

Imprimé en France

© 2018, **EDP Sciences**, 17 avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf, 91944 Les Ulis Cedex A

et

CNRS Éditions, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'œuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

EDP Sciences, ISBN (papier) : 978-2-7598-2287-4, ISBN (ebook) : 978-2-7598-2288-1

CNRS Éditions, ISBN (papier) : 978-2-271-12498-2, ISBN (ebook) : 978-2-271-12500-2

Avertissement important : “mode d’emploi”

L’exposé qui va suivre est composé de deux parties distinctes, bien qu’imbriquées : les chapitres et les compléments.

– Les *chapitres* contiennent les notions de base : à quelques développements et quelques variations près, leur niveau correspond à celui d’un cours en Licence 3 pour le premier tome, Master 1 pour le second, et Master 2 pour le troisième. Ces chapitres, au nombre de 21 en tout, *forment un tout*, qui peut être étudié indépendamment des compléments.

– Les *compléments* suivent chacun des chapitres ; ils sont repérés par une lettre à laquelle, en indice, est adjoint le numéro du chapitre auquel ils sont attachés (par exemple, les compléments qui suivent le Chapitre V sont notés, dans l’ordre : A_V , B_V , C_V , etc.), et peuvent être immédiatement distingués par un signe ● figurant en haut des pages correspondantes. A la fin de chaque chapitre figure un guide de lecture et une liste de ses compléments, dont le nombre est variable (de 2 à 14).

Les compléments sont de *types divers* : certains sont par exemple destinés à faciliter l’assimilation du chapitre auquel ils sont attachés, ou à préciser certains points ; d’autres peuvent également indiquer des applications physiques concrètes, ou encore ouvrir des perspectives sur différents domaines de la physique ; l’un de ces compléments (généralement le dernier) regroupe des exercices.

Les compléments sont de *niveaux variés* : tous peuvent être compris à partir des chapitres qui les précèdent, mais certains en sont des applications ou des prolongements très simples, alors que d’autres sont plus difficiles (quelques uns peuvent même se situer au niveau du Master 2 ou s’intéresser à des sujets proches de la recherche).

En aucun cas il n’est conseillé d’étudier l’ensemble des compléments d’un chapitre dans l’ordre où ils se présentent. Suivant ses préoccupations et ses intérêts, le lecteur en choisira un petit nombre (par exemple 2 ou 3), plus quelques exercices ; les autres compléments pourront être réservés pour une lecture ultérieure. Il pourra s’appuyer pour cela sur le guide de lecture des compléments qui figure à la fin de chaque chapitre.

Signalons enfin que, dans le texte des chapitres et des compléments, certains passages pouvant être sautés en première lecture sont imprimés en petits caractères.

Avant-propos

La mécanique quantique est une branche de la physique dont l'importance n'a cessé de s'accroître au cours des dernières décennies. Elle est bien sûr essentielle pour comprendre la structure et la dynamique des objets microscopiques comme les atomes, les molécules, ainsi que leurs interactions avec le rayonnement électromagnétique. Mais elle est aussi à la base du fonctionnement de nombreux systèmes nouveaux comme les sources laser (communications, médecine, usinage, etc.), les horloges atomiques (essentiels, en particulier, pour le GPS), les transistors (et donc les communications, l'informatique), l'imagerie par résonance magnétique, la production d'énergie (capteurs solaires, nucléaire), etc., donc des applications pratiques innombrables. Elle permet également d'expliquer des phénomènes surprenants comme la superfluidité ou la supraconductivité. Un grand intérêt est actuellement porté aux états quantiques intriqués, dont les propriétés de non-localité et non-séparabilité sont peu intuitives, et permettent d'envisager des applications remarquables dans le domaine de l'information quantique. Notre civilisation devient ainsi de plus en plus imprégnée par les applications technologiques qui découlent des concepts quantiques. Il est par suite clair qu'une attention particulière doit être portée à l'enseignement de la mécanique quantique. L'objet de ces trois tomes est de concourir à cet objectif.

Un premier contact avec la mécanique quantique peut cependant être très déroutant. Le présent ouvrage, issu de plusieurs enseignements auprès des étudiants, a été conçu dans le but de faciliter une approche initiale, et d'aider ensuite le lecteur à progresser continûment vers un niveau avancé de mécanique quantique. Les deux premiers tomes, publiés il y a plus de 40 ans, ont été utilisés dans le monde entier et traduits dans de multiples langues. Ils restaient toutefois à un niveau intermédiaire ; l'ouvrage est maintenant complété par un troisième tome qui permet au lecteur d'aller plus loin. L'ensemble est systématiquement fondé sur une approche progressive des problèmes, où aucune difficulté n'est passée sous silence, et où chaque aspect des diverses questions est discuté en détail (en partant souvent d'un rappel classique).

Cette volonté d'aller au fond des choses « sans tricher ni prendre de raccourci » se concrétise dans la structure même de l'ouvrage, construite à l'aide de deux textes distincts mais imbriqués : les *chapitres* et les *compléments*. Les chapitres se suivent pour présenter les idées générales et les notions de base. Chaque chapitre est suivi de plusieurs compléments, en nombre variable, qui illustrent les méthodes et concepts qui viennent d'être introduits. Les compléments sont indépendants les uns des autres, et leur but est de proposer un large éventail d'applications diverses et prolongements intéressants. Pour faciliter l'orientation du lecteur et lui permettre d'organiser ses lectures successives, un guide de lecture comprenant une liste de commentaires des compléments un par un est proposée à la fin de chaque chapitre.

Le tome I présente une introduction générale du sujet, suivie d'un chapitre détaillé qui décrit les outils mathématiques de base de la mécanique quantique. Ce chapitre peut paraître un peu long et dense, mais l'expérience d'enseignement des auteurs a montré que cette présentation est à terme la plus efficace. Les postulats sont clairement énoncés à partir du troisième chapitre, avec de nombreuses illustrations en compléments. Ensuite sont décrites quelques grandes applications de la

mécanique quantique, par exemple l'oscillateur harmonique, qui donne lieu à de très nombreuses applications (vibration des molécules, phonons, etc.), dont bon nombre font l'objet d'un complément spécifique.

Le tome II poursuit dans cette voie, en élargissant sa portée, et à un niveau un peu plus élevé. Il aborde la théorie des collisions, le spin, la composition des moments cinétiques et les calculs des perturbations indépendantes ou dépendantes du temps. Il fait une première incursion dans l'étude des particules identiques. Dans ce tome, comme dans le précédent, toute notion théorique est immédiatement illustrée par des applications diverses présentées dans des compléments. Comme le tome I, il a bénéficié de quelques corrections récentes, mais il a également été augmenté : le chapitre XIII comprend maintenant deux §§ D et E qui traitent des perturbations aléatoires, et un complément entier sur la relaxation a été ajouté à ce chapitre.

Enfin le tome III vient maintenant compléter les deux premiers, en se situant à un niveau plus élaboré. Il se base sur l'usage du formalisme des opérateurs de création et d'annihilation (deuxième quantification), d'utilisation courante en théorie quantique des champs. Dans une première partie, on étudie les systèmes de particules identiques, fermions et bosons. Les propriétés des gaz parfaits en équilibre thermique sont exposées. Pour les fermions, la méthode de Hartree-Fock est présentée en détail ; elle est à la base d'un nombre considérable d'études en chimie, physique atomique ou du solide, etc. Pour les bosons, l'équation de Gross-Pitaevskii et la théorie de Bogolubov sont discutées. Une présentation originale qui regroupe les effets d'appariement dans les fermions et les bosons permet d'obtenir la théorie BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) et de Bogolubov dans un cadre unifié. Une seconde partie du tome III est consacrée à l'électrodynamique quantique, son introduction générale, l'étude des interactions entre atomes et photons, et diverses applications (émission spontanée, transitions multi-photoniques, pompage optique, etc.). La méthode de l'atome habillé est présentée et illustrée dans des cas concrets. Un dernier chapitre discute la notion d'intrication quantique et certains aspects fondamentaux de la mécanique quantique, en particulier les inégalités de Bell et leur violation.

Mentionnons enfin que nous n'avons abordé, ni la discussion des implications philosophiques de la mécanique quantique, ni celle des diverses interprétations de cette théorie, malgré le très grand intérêt qui s'attache à ces sujets. Nous nous sommes en fait limités à présenter que l'on appelle souvent "le point de vue orthodoxe", et seul le Chapitre XXI s'approche un peu de certaines questions touchant les fondements de la mécanique quantique (sa non-localité, etc.). Nous avons fait ce choix car il nous semble que l'on peut s'intéresser aux questions relatives aux fondements de façon plus efficace une fois que l'on a acquis au préalable une bonne aisance dans le maniement pratique de la mécanique quantique, ainsi que de ses applications si nombreuses. Ces sujets sont abordés dans l'ouvrage *Comprenons-nous vraiment la Mécanique Quantique ?* (F. Laloë, EDP Sciences, 2017) ; voir également la section 5 de la bibliographie des Tomes I et II.

Remerciements :

Tomes I et II : l'enseignement qui est à l'origine de cet ouvrage résulte d'un travail d'équipe qui s'est poursuivi pendant plusieurs années. Nous tenons à remercier ici tous les membres des diverses équipes dont nous avons fait partie, et tout particulièrement Jacques Dupont-Roc et Serge Haroche, pour leur collaboration amicale, les discussions fructueuses que nous avons eues ensemble lors de nos réunions hebdomadaires, les idées de problèmes et d'exercices qu'ils nous ont suggérées. Sans leur enthousiasme et leur aide précieuse, nous n'aurions jamais pu entreprendre et mener à bien la rédaction de cet ouvrage. Nous ne saurions également oublier tout ce que nous devons aux physiciens qui nous ont initiés à la recherche, Alfred Kastler et Jean Brossel pour deux d'entre nous, Maurice Lévy pour le troisième. C'est dans l'ambiance de leurs laboratoires que nous avons découvert la beauté et la puissance de la mécanique quantique. Nous n'oublions pas non plus l'importance qu'a eue pour nous l'enseignement de la physique moderne dispensé au C.E.A. par Albert Messiah, Claude Bloch et Anatole Abragam, à une époque où le troisième cycle n'avait pas encore fait son apparition dans l'enseignement supérieur.

Tome III : Nicole et Dan Ostrowsky ont, à l'occasion de leur traduction du texte en anglais, proposé de nombreuses améliorations ou clarifications, et nous leur en sommes très reconnaissants. Nombreux sont en fait les collègues et amis qui ont grandement contribué à la mise au point de cet ouvrage. Cela nous a d'autant plus aidés que chacun, dans son style propre, nous a apporté des remarques et suggestions complémentaires, et toujours utiles. Tous nos remerciements vont donc en particulier à :

Pierre-François Cohadon
Jean Dalibard
Sébastien Gleyzes
Markus Holzmann
Thibaut Jacqumin
Philippe Jacquier
Amaury Mouchet
Jean-Michel Raimond
Félix Werner

De plus, Marco Picco et Pierre Cladé nous ont grandement aidés à maîtriser certains aspects délicats de la typographie Latex, et à vectoriser des figures. Roger Balian, Edouard Brézin et William Mullin nous ont fait bénéficier d'utiles conseils et suggestions. Enfin, pour un certain nombre de figures, nous remercions vivement pour leur aide Geneviève Tastevin, Pierre-François Cohadon et Samuel Deléglise.

Tome I

I	ONDES ET PARTICULES. INTRODUCTION AUX IDÉES FONDAMENTALES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE	1
A	Ondes électromagnétiques et photons	3
B	Corpuscules matériels et ondes de matière	10
C	Description quantique d'une particule. Paquets d'ondes	14
D	Particule dans un potentiel scalaire indépendant du temps	24
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	35
A_I	Ordre de grandeur des longueurs d'onde	37
B_I	Contraintes imposées par la relation de Heisenberg	41
1	Système macroscopique	41
2	Système microscopique	41
C_I	Relation de Heisenberg et paramètres atomiques	43
D_I	Une expérience illustrant la relation de Heisenberg	47
E_I	Paquet d'ondes à deux dimensions	51
1	Introduction	51
2	Dispersion angulaire et dimensions latérales	51
3	Discussion physique	53
F_I	Lien entre les problèmes à une et à trois dimensions	55
1	Paquet d'ondes à trois dimensions	55
2	Justification des modèles à une dimension	58
G_I	Paquet d'ondes gaussien	59
1	Définition d'un paquet d'ondes gaussien	59
2	Calcul de Δx et Δp ; relation de Heisenberg	61
3	Evolution du paquet d'ondes	61
H_I	Potentiels carrés à une dimension	65
1	Comportement d'une fonction d'onde stationnaire $\varphi(x)$	65
2	Étude de certains cas simples	67
J_I	Paquet d'ondes dans une marche de potentiel	77
1	Réflexion totale : $E < V_0$	77
2	Réflexion partielle : $E > V_0$	81
K_I	Exercices	85

II LES OUTILS MATHÉMATIQUES DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE	89
A Espace des fonctions d'onde d'une particule	90
B Espace des états. Notations de Dirac	104
C Représentations dans l'espace des états	118
D Equation aux valeurs propres. Observables	128
E Deux exemples importants de représentations et d'observables	141
F Produit tensoriel d'espaces d'états	150
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	161
A_{II} Inégalité de Schwarz	163
B_{II} Rappel de quelques propriétés utiles des opérateurs linéaires	165
1 Trace d'un opérateur	165
2 Algèbre des commutateurs	167
3 Restriction d'un opérateur à un sous-espace	167
4 Fonctions d'opérateurs	168
5 Dérivation d'un opérateur	171
C_{II} Opérateurs unitaires	175
1 Propriétés générales des opérateurs unitaires	175
2 Transformation unitaire sur les opérateurs	179
3 Opérateur unitaire infinitésimal	180
D_{II} Etude plus détaillée des représentations $\{ r\rangle\}$ et $\{ p\rangle\}$	183
1 Représentation $\{ r\rangle\}$	183
2 Représentation $\{ p\rangle\}$	186
E_{II} Quelques propriétés générales de deux observables Q et P dont le commutateur est égal à $i\hbar$	189
1 Opérateur $S(\lambda)$: définition, propriétés	189
2 Valeurs propres et vecteurs propres de Q	190
3 Représentation $\{ q\rangle\}$	191
4 Représentation $\{ p\rangle\}$. Symétrie entre les observables P et Q	192
F_{II} Opérateur parité	195
1 Etude de l'opérateur parité	195
2 Opérateurs pairs et impairs	198
3 Etats propres d'une observable B_+ paire	201
4 Application à un cas particulier important	201
G_{II} Application des propriétés du produit tensoriel; puits infini à deux dimensions	203
1 Définition ; états propres	203
2 Etude des niveaux d'énergie	204
H_{II} Exercices	207

III	LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE	215
A	Introduction	215
B	Enoncé des postulats	217
C	Interprétation physique des postulats sur les observables et leur mesure	229
D	Contenu physique de l'équation de Schrödinger	239
E	Principe de superposition et prévisions physiques	256
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	271
A_{III}	Particule dans un puits de potentiel infini : étude physique	275
1	Répartition des valeurs de l'impulsion dans un état stationnaire	275
2	Evolution de la fonction d'onde de la particule	279
3	Perturbation apportée par une mesure de la position	283
B_{III}	Etude du courant de probabilité dans quelques cas particuliers	287
1	Expression du courant dans des régions où le potentiel est constant	287
2	Application aux problèmes de marches de potentiel	288
3	Courant de probabilité des ondes incidente et évanescence, dans le cas d'une réflexion sur une marche de potentiel à deux dimensions	289
C_{III}	Ecarts quadratiques moyens de deux observables conjuguées	293
1	Relation de Heisenberg pour P et Q	293
2	Paquet d'ondes "minimum"	294
D_{III}	Mesures portant sur une partie d'un système physique	297
1	Calcul des prévisions physiques	297
2	Signification physique d'un état produit tensoriel	299
3	Signification physique d'un état qui n'est pas un produit tensoriel	300
E_{III}	L'opérateur densité	303
1	Position du problème	303
2	Notion de mélange statistique d'états	303
3	Cas pur. Introduction de l'opérateur densité	305
4	Mélange statistique d'états (cas non pur)	308
5	Exemples d'utilisation de l'opérateur densité	312
F_{III}	Opérateur d'évolution	317
1	Propriétés générales	317
2	Cas des systèmes conservatifs	319
G_{III}	Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg	321
H_{III}	Invariance de jauge	325
1	Position du problème : potentiels scalaire et vecteur associés à un champ électromagnétique ; notion de jauge	325
2	Invariance de jauge en mécanique classique	326
3	Invariance de jauge en mécanique quantique	331

J_{III}	Propagateur de l'équation de Schrödinger	339
1	Introduction. Idée physique	339
2	Existence et propriétés d'un propagateur $K(2, 1)$	340
3	Formulation lagrangienne de la mécanique quantique	343
K_{III}	Niveaux instables. Durée de vie	347
1	Introduction	347
2	Définition de la durée de vie	348
3	Description phénoménologique de l'instabilité d'un niveau	349
L_{III}	Exercices	351
M_{III}	Etats liés dans un "puits de potentiel" de forme quelconque	363
1	Quantification de l'énergie des états liés	363
2	Valeur minimale de l'énergie du niveau fondamental	367
N_{III}	Etats non liés d'une particule en présence d'un puits ou d'une barrière de potentiel de forme quelconque	371
1	Matrice de transmission $M(k)$	372
2	Coefficients de transmission et de réflexion	376
3	Exemple	377
O_{III}	Propriétés quantiques d'une particule dans une structure périodique à une dimension	379
1	Traversée successive de plusieurs barrières de potentiel identiques	380
2	Discussion physique : notion de bande d'énergie permise ou interdite . .	386
3	Quantification des niveaux d'énergie dans un potentiel de structure pé- riodique ; effet des conditions aux limites	388

IV	APPLICATION DES POSTULATS À DES CAS SIMPLES :	
	SPIN 1/2 ET SYSTÈMES À DEUX NIVEAUX	397
A	Particule de spin 1/2 : quantification du moment cinétique	398
B	Illustration des postulats sur le cas d'un spin 1/2	405
C	Etude générale des systèmes à deux niveaux	416
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	427
A_{IV}	Les matrices de Pauli	429
1	Définition ; valeurs propres et vecteurs propres	429
2	Propriétés simples	430
3	Une base commode de l'espace des matrices 2×2	431
B_{IV}	Diagonalisation d'une matrice hermitique 2×2	433
1	Introduction	433
2	Changement d'origine pour le repérage des valeurs propres	433
3	Calcul des valeurs propres et vecteurs propres	435

C_{IV}	Spin fictif 1/2 associé à un système à deux niveaux	439
1	Introduction	439
2	Interprétation de l'hamiltonien en termes de spin fictif	439
3	Interprétation géométrique	441
D_{IV}	Système de deux spins 1/2	445
1	Description quantique	445
2	Prédiction des résultats de mesure	448
E_{IV}	Matrice densité d'un spin 1/2	453
1	Introduction	453
2	Matrice densité d'un spin parfaitement polarisé (cas pur)	453
3	Exemple de mélange statistique : spin non polarisé	454
4	Spin 1/2 à l'équilibre thermodynamique dans un champ statique	456
5	Décomposition de la matrice densité sur les matrices de Pauli	457
F_{IV}	Résonance magnétique	459
1	Traitement classique; référentiel tournant	459
2	Traitement quantique	462
3	Lien entre le traitement classique et le traitement quantique : évolution de $\langle \mathbf{M} \rangle$	467
4	Equations de Bloch	467
G_{IV}	Modèle simple pour la molécule d'ammoniac	473
1	Description du modèle	473
2	Fonctions propres et valeurs propres de l'hamiltonien	475
3	La molécule d'ammoniac considérée comme un système à deux niveaux	482
H_{IV}	Effets d'un couplage entre un état stable et un état instable	489
1	Introduction. Notations	489
2	Influence d'un couplage faible sur des niveaux d'énergies différentes	490
3	Influence d'un couplage quelconque sur des niveaux de même énergie	491
J_{IV}	Exercices	495

V	L'OSCILLATEUR HARMONIQUE À UNE DIMENSION	501
A	Introduction	501
B	Valeurs propres de l'hamiltonien	507
C	Etats propres de l'hamiltonien	514
D	Discussion physique	521
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS		529
A_V	Etude de quelques exemples physiques d'oscillateurs harmoniques	531
1	Vibration des noyaux d'une molécule diatomique	531
2	Vibration des noyaux dans un cristal	538
3	Oscillations de torsion d'une molécule : exemple de l'éthylène	540
4	Atomes muoniques lourds	546

B_V	Etude des états stationnaires en représentation $\{ x\rangle\}$. Polynômes d'Hermite	551
1	Les polynômes d'Hermite	551
2	Les fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique . . .	554
C_V	Résolution de l'équation aux valeurs propres de l'oscillateur harmonique par la méthode polynomiale	559
1	Changement de fonction et de variable	559
2	Méthode polynomiale	561
D_V	Etude des états stationnaires en représentation $\{ p\rangle\}$	567
1	Fonctions d'onde dans l'espace des impulsions	567
2	Discussion physique	570
E_V	L'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	573
1	L'opérateur hamiltonien	573
2	Séparation des variables en coordonnées cartésiennes	574
3	Dégénérescence des niveaux d'énergie	576
F_V	Oscillateur harmonique chargé placé dans un champ électrique uniforme	579
1	Equation aux valeurs propres de $H'(\mathcal{E})$ en représentation $\{ x\rangle\}$	580
2	Discussion physique	581
3	Utilisation de l'opérateur translation	583
G_V	Etats cohérents "quasi classiques" de l'oscillateur harmonique	587
1	Recherche des états quasi classiques	588
2	Propriétés des états $ \alpha\rangle$	592
3	Evolution d'un état quasi classique au cours du temps	599
4	Exemple d'application : étude quantique d'un oscillateur macroscopique	601
H_V	Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques couplés	603
1	Vibrations des deux particules en mécanique classique	603
2	Etats de vibration du système en mécanique quantique	609
J_V	Modes de vibration d'une chaîne linéaire indéfinie d'oscillateurs harmoniques couplés ; phonons	615
1	Etude classique	616
2	Etude quantique	626
3	Application à l'étude des vibrations dans un cristal : les phonons	630
K_V	Modes de vibration d'un système physique continu. Application au rayonnement ; photons	635
1	Position du problème	635
2	Modes de vibration d'un système mécanique continu : exemple de la corde vibrante	636
3	Modes de vibration du rayonnement : les photons	643

L_V	Oscillateur harmonique à une dimension en équilibre thermodynamique à la température T	651
1	Energie moyenne	652
2	Discussion physique	654
3	Applications	655
4	Distribution de probabilité de l'observable X	659
M_V	Exercices	667

VI	MOMENTS CINÉTIQUES EN MÉCANIQUE QUANTIQUE	673
A	Introduction : importance du moment cinétique	673
B	Relations de commutation caractéristiques des moments cinétiques . . .	675
C	Théorie générale du moment cinétique	678
D	Application au moment cinétique orbital	691
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	709
A_{VI}	Les harmoniques sphériques	711
1	Calcul des harmoniques sphériques	711
2	Propriétés des harmoniques sphériques	716
B_{VI}	Moment cinétique et rotations	723
1	Introduction	723
2	Etude succincte des rotations géométriques \mathcal{R}	724
3	Opérateurs de rotation dans l'espace des états. Exemple d'une particule sans spin	726
4	Opérateurs de rotation dans l'espace des états d'un système quelconque	733
5	Rotation des observables	736
6	L'invariance par rotation	740
C_{VI}	Rotation des molécules diatomiques	745
1	Introduction	745
2	Rotateur rigide. Etude classique	746
3	Quantification du rotateur rigide	747
4	Manifestations expérimentales de la rotation des molécules	752
D_{VI}	Moment cinétique des états stationnaires d'un oscillateur harmonique à deux dimensions	761
1	Introduction	761
2	Classification des états stationnaires au moyen des nombres quantiques n_x et n_y	765
3	Classification des états stationnaires en fonction de leur moment cinétique	767
4	Etats quasi classiques	771

E_{VI} Particule chargée dans un champ magnétique. Niveaux de Landau	777
1 Rappels classiques	777
2 Propriétés quantiques générales d'une particule dans un champ magnétique	782
3 Cas où le champ magnétique est uniforme	785
F_{VI} Exercices	801

VII PARTICULE DANS UN POTENTIEL CENTRAL. ATOME D'HYDROGÈNE	809
A Etats stationnaires d'une particule dans un potentiel central	810
B Mouvement du centre de masse et mouvement relatif pour un système de deux particules en interaction	819
C L'atome d'hydrogène	824
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	839
A_{VII} Systèmes hydrogénéoïdes	841
1 Systèmes hydrogénéoïdes comprenant un électron	842
2 Systèmes hydrogénéoïdes sans électron	847
B_{VII} Exemple soluble de potentiel central : l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	851
1 Résolution de l'équation radiale	852
2 Niveaux d'énergie et fonctions d'onde stationnaires	854
C_{VII} Courants de probabilité associés aux états stationnaires de l'atome d'hydrogène	861
1 Expression générale du courant de probabilité	861
2 Application aux états stationnaires de l'atome d'hydrogène	862
D_{VII} Atome d'hydrogène plongé dans un champ magnétique uniforme. Paramagnétisme et diamagnétisme. Effet Zeeman	865
1 Hamiltonien du problème. Terme paramagnétique et terme diamagnétique	866
2 Effet Zeeman	872
E_{VII} Etude de quelques orbitales atomiques. Orbitales hybrides	879
1 Introduction	879
2 Orbitales atomiques associées à des fonctions d'onde réelles	880
3 Hybridation sp	886
4 Hybridation sp^2	888
5 Hybridation sp^3	892
F_{VII} Niveaux de vibration-rotation des molécules diatomiques	895
1 Introduction	895
2 Résolution approchée de l'équation radiale	896
3 Evaluation de quelques corrections	902

G_{VII} Exercices	909
1 Particule dans un potentiel à symétrie cylindrique	909
2 Oscillateur harmonique à trois dimensions dans un champ magnétique uniforme	909

INDEX	911
--------------	------------

Tome II

VIII	THÉORIE ÉLÉMENTAIRE DES COLLISIONS	931
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	965
A _{VIII}	La particule libre : états stationnaires de moment cinétique bien défini	967
B _{VIII}	Description phénoménologique des collisions avec absorption	979
C _{VIII}	Exemples simples d'application de la théorie de la diffusion	985

IX	LE SPIN DE L'ÉLECTRON	993
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	1007
A _{IX}	Opérateurs de rotation pour une particule de spin 1/2	1009
B _{IX}	Exercices	1017

X	COMPOSITION DES MOMENTS CINÉTIQUES	1023
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	1049
A _X	Exemples de composition de moments cinétiques	1051
B _X	Coefficients de Clebsch-Gordan	1059
C _X	Composition des harmoniques sphériques	1067
D _X	Opérateurs vectoriels : Théorème de Wigner-Eckart	1073
E _X	Moments multipolaires électriques	1085
F _X	Deux moments cinétiques J_1 et J_2 couplés par une interaction $aJ_1 \cdot J_2$	1099
G _X	Exercices	1113

XI	THÉORIE DES PERTURBATIONS STATIONNAIRES	1121
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	1135
A _{XI}	Oscillateur harmonique à une dimension soumis à un potentiel perturbateur en x, x^2, x^3	1137

B _{XI} Interaction entre les dipôles magnétiques de deux particules de spin 1/2	1147
C _{XI} Forces de Van der Waals	1157
D _{XI} Effet de volume : influence de l'extension spatiale du noyau sur les niveaux atomiques	1169
E _{XI} La méthode des variations	1177
F _{XI} Bandes d'énergie des électrons dans les solides : modèle simple	1185
G _{XI} Exemple simple de liaison chimique : l'ion H ₂ ⁺	1199
H _{XI} Exercices	1231

XII APPLICATION DE LA THÉORIE DES PERTURBATIONS : STRUCTURE FINE ET HYPERFINE DE L'ATOME D'HYDROGÈNE	1241
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	1277
A _{XII} Hamiltonien hyperfin magnétique	1279
B _{XII} Calcul des valeurs moyennes de l'hamiltonien de structure fine dans les états 1s, 2s et 2p	1289
C _{XII} Structure hyperfine et effet Zeeman du muonium et du positronium	1293
D _{XII} Influence du spin électronique sur l'effet Zeeman de la raie de résonance de l'hydrogène	1301
E _{XII} Effet Stark de l'atome d'hydrogène	1311

XIII MÉTHODES D'APPROXIMATION POUR LES PROBLÈMES DÉPENDANT DU TEMPS	1315
GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	1349
A _{XIII} Interaction d'un atome avec une onde électromagnétique	1351
B _{XIII} Réponses linéaire et non linéaire d'un système à deux niveaux soumis à une perturbation sinusoïdale	1369
C _{XIII} Oscillations d'un système entre deux états discrets sous l'effet d'une perturbation sinusoïdale résonnante	1387

D _{XIII}	Désintégration d'un état discret couplé à un continuum d'états finals	1391
E _{XIII}	Perturbation aléatoire dépendant du temps, relaxation	1405
F _{XIII}	Exercices	1425

XIV	SYSTÈMES DE PARTICULES IDENTIQUES	1435
	GUIDE DE LECTURE DES COMPLÉMENTS	1473
A _{XIV}	Atomes à plusieurs électrons. Configurations électroniques	1475
B _{XIV}	Niveaux d'énergie de l'atome d'Hélium : configurations, termes, multiplets	1483
C _{XIV}	Propriétés physiques d'un gaz d'électrons. Application aux solides	1499
D _{XIV}	Exercices	1515

	APPENDICES	1525
I	Séries de Fourier et transformation de Fourier	1525
II	La "fonction" δ de Dirac	1535
III	Lagrangien et Hamiltonien en mécanique classique	1547
	BIBLIOGRAPHIE DES TOMES I ET II	1565
	INDEX	1587

- linéaire, tenseur
- électrique 1233(ex.)
- électrique d'un atome 1364
- électrique d'un atome d'hydrogène
1312(ex.)
- électrique d'un électron élastique-
ment lié 581
- électrique de NH₃ 487
- linéaire avec perturbation sinusoi-
dale 1378
- magnétique 1234(ex.), 1505
- Symétrique
- ket, état 1444
- observable 1445, 1458
- Symétrisation (postulat de) 1451, 1469
- Symétrisation des observables ... 226
- Symétriseur 1444, 1448
- Systèmes
- à deux niveaux 439
- à trois niveaux 1426(ex.)
- hydrogénoïdes 841

- T**
- Tamasic (composante de la transfor-
mée de Wigner) 2374
- Taux d'absorption 1347
- Taux de photo-ionisation .. 2159, 2169
- Température d'Einstein 663
- Température Doppler 2071
- Temps de relaxation
- longitudinale 1417
- transversale 1422
- Tenseur
- de susceptibilité 1234(ex.),
1426(ex.)
- interaction tenseur 1148
- Tensoriel (opérateur) 1116(ex.),
1118(ex.)
- Tensoriel (produit)
- applications 203, 445
- définition et propriétés 150
- état produit tensoriel ... 299, 315
- Terme
- d'échange 1464, 1468
- de contact 1248, 1257, 1284
- de Darwin 1245, 1292
- Terme d'appariement 1912
- Terme direct et d'échange 1630, 1651,
1653, 1667, 1670
- Termes
- spectraux 1483, 1486
- Théorème
- de Bloch 663, 1193
- de projection 1079
- de Ritz 1178
- de Wigner-Eckart ... 1073, 1093,
1116(ex.), 1265
- du viriel 354(ex.), 1219
- optique 983
- Théorème de Bell 2253, 2257
- Théorème de Wick 1831, 1835
- Thermodynamique (équilibre)
- gaz d'électrons 1504
- généralités 312
- oscillateur harmonique 651
- spin 1/2 456
- Thomas (précession de) 1245
- Thomas-Reiche-Kuhn (règle de somme
de) 1365
- Tore (écoulement dans un) 1689
- Torsion (oscillations de) 540
- Townes (effet Autler-Townes) 1426(ex.)
- Trace
- d'un opérateur 165
- partielle d'un opérateur 313
- Transformation de Bogolubov ... 1987
- Transformation de Bogolubov-Valatin
1869, 1955
- Transformation de Fourier 1525
- Transformation de jauge 1996
- Transformation des opérateurs ... 179
- Transformée de Wigner 2347
- Transition ... voir Probabilité, Inter-
dite, Dipolaire électrique, Di-
polaire magnétique, Quadru-
polaire électrique
- à un ou plusieurs quanta ... 1323,
1381, 1426(ex.)
- Transition virtuelle 2145
- Transitions à deux photons 2141
- Transitions dipolaires électriques 2098
- Translation (opérateur de) .. 192, 583,
797
- Transposition 1447
- Transversale (relaxation) 1420

- Transverses (champs) 1997
 Triplet 1032, 1490
 Triplet de fluorescence 2189
 Tritium 842
 Trou 1512
 Trou d'échange 1805
 Trous 1639
 Trous (création et d'annihilation) 1640
 Tunnel (effet) ... 30, 72, 369, 480, 544, 1185, 1187
 Tunnel (ionisation) 2171
- U**
- Une particule (opérateur à) 1620, 1623, 1646, 1784
 Unicité du résultat de mesure ... 2249
 Unitaire
 matrice 127, 178
 opérateur 175, 318
 transformation des opérateurs 179
- V**
- Valence (bande de) 1511
 Valeur moyenne d'une observable 230, 243
 Valeur(s) propre(s) .. 12, 26, 128, 154, 178, 218
 dégénérée(s) ... 129, 205, 219, 263
 Valeurs moyennes anormales 1861
 Van der Waals (forces de) 1157
 Variables continues (dans lagrangien) 2021
 Variables intensives ou extensives 2341
 Variables normales . 606, 620, 635, 637
 Variables normales du champ ... 2007
 Variations (méthode des) . 1177, 1190, 1199, 1238(ex.)
 Vecteur
 d'état voir Etat
 propre 128, 154, 178
 Vectoriel
 modèle 1080, 1099, 1266
 opérateur ... 738, 1073, 1116(ex.)
 Vibration
 des noyaux dans un cristal .. 538, 615, 657
 des noyaux dans une molécule 531, 895
 Vide (état du) 1612
- Vide (fluctuations du) 648
 Vide d'excitations 1641
 Vide de photons 2043
 Vide de quasi-particules 1869
 Violations des inégalités de Bell 2259, 2313
 Viriel (théorème du) ... 354(ex.), 1219
 Virtuelle (transition) 2145
 Vitesse
 de groupe 24, 39, 57, 62, 619, 1196
 de phase 22, 39
 généralisée 216, 1550
 Vitesse critique 1694
 Volume (effet de) 549, 848, 1169, 1280
 Von Neumann (chaîne de) 2249
 Von Neumann (entropie statistique) 2265
 Von Neumann (équation de) 310
 Von Neumann (mesure idéale) .. 2245
 Von Neumann (postulat de réduction) 2250
 Vortex dans un superfluide 1689
- W**
- Weyl (opérateur de) 2350
 Wick (théorème de) 1831, 1835
 Wigner (transformée de) 2347
 Wigner-Eckart (théorème) 1073, 1093, 1116(ex.), 1265
- Y**
- Young (expérience des fentes d') 4
 Yukawa (potentiel de) 985
- Z**
- Zeeman (effet) ... 865, 872, 995, 1262, 1264, 1268, 1272, 1274
 du muonium 1293
 du positronium 1293
 Zone de Brillouin 618, 1191