



N° Réf : .....

Centre Universitaire  
Abdelhafid Boussouf Mila

Institut des Sciences et Technologie

Département de Mathématiques et Informatique

## Mémoire préparé en vue de l'obtention du diplôme de Master

Filière : Mathématiques  
Spécialité : Mathématiques Appliquées

### Thème

# L'équation de Schrödinger en mécanique quantique

Préparé par : Zeggar Nour Elhouda  
Boubrek Chahra

Devant le jury :

- |                                   |                           |           |
|-----------------------------------|---------------------------|-----------|
| - Abdelouaheb Mohamed Salah (MCA) | C.U. Abd Elhafid Boussouf | Président |
| - Boudjedaa Badredine (MCA)       | C.U. Abdelhafid Boussouf  | Encadreur |
| - Kaouache Smail (MCB)            | C. U. Abdelhafid Boussouf | Examineur |

Année Universitaire : 2019/2020

# Remerciements

*Tout d'abord je remercie le Dieu qui m'a  
donné la volentée et la force j'accomplir ce travail  
pour aller plus loin in chaa Allah.*

*Après avoir terminer la préparation de ce travail, je voudrais avant tout  
adresser toute ma reconnaissance à la directeur*

*de ce mémoire Mr. Boujdlaa. B, pour sa patience, sa disponibilité et  
surtout ses judicieux conseils qui ont contribué à alimenter ma réflexion.*

*Je ne manque pas non plus d'exprimer ma sincère gratitude aux  
professeurs de mathématiques et d'informatique spécialisés en  
mathématiques appliquées, en particulier les membres du jury*

*Mr M. S. Abdelouaheb et R. Bouaden*

*qui ont accepté le jugement sur ce travail et apporté leur soutien.*

*Enfin de compte, je remercie tous ceux  
qui ont contribué de près ou de loin.*

*Chahra & Nour Elhouda*

# Dédicace

*Je remercie Dieu de m'avoir donné la force de faire ce travail  
pour aller de l'avant.*

*Je dédie ce mémoire à tous ceux que j'aime. A ceux qui m'ont indiqué  
la bonne voie, a ceux qui attendent patiemment le fruit de leur éducation.*

*Je le dédie à mon cher père Mahfoud qui a moissonné des épines  
sur mon chemin pour me frayer la voie pour apprendre,  
et qui a fait des efforts au fil des ans,*

*Afin de gravir les marches du succès, et m'a soutenu en toutes  
circonstances.*

*Je le dédie à ma chère Mère, qui a passé sa vie pour me voir toujours  
heureuse, et pour ses encouragements et ses prières tout au long de mes  
études, elle mérite qu'on lui donne ma joie.*

*Je le dédie à mes frères A. Elghani, A. e Elaziz, Rabeih,  
et mes sœurs*

*je les remercie pour leurs encouragements et leurs aides,  
et à toute ma grande famille.*

*A toutes mes Chers Amis sont chacun en leur propre nom que.*

*A chaque personne chère à mon cœur que Dieu te garde.*

*A mon binôme Nour elhouda pour son soutien moral, sa patience et sa  
compréhension tout au long de ce projet.*

*Je me dédie ce mémoire à moi-même Chahra.*

**CHAHRA**

# Dédicace

*Ce projet de fin d'études est dédié :*

*A mes chers parents avec tout mon amour*

*Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices que vous avez consenti pour mon instruction et mon bien être.*

*Je vous remercie pour tout le soutien et l'amour que vous me portez depuis mon enfance, leur soutien et leurs encouragements m'ont toujours donné la force pour persévérer dans la vie, sans eux je n'aurais pas été où je suis maintenant. Que ce modeste travail soit l'exaucement de vos vœux tant formulés, le fruit de vos innombrables sacrifices bien que quoi que vous fassiez.*

*Puisse Dieu, le Très Haut, vous accorder santé, bonheur et longue vie.*

*A ma grande mère décédée que Dieu ait pitié d'elle, qui m'avait toujours accompagnée de ses prières tout au long de mes années d'étude j'aurais aimé que tu sois avec moi.*

*A mes chers frères Mohamed Elsalah, Mehdi, à mes soeurs Achoiak, Hadil, qui m'avez toujours soutenu et encouragé durant ces années d'études.*

*Je vous souhaite un avenir radieux et plein de succès et tout ce qu'il y a de meilleur.*

*A mon mari Abd Elkrim Je te remercie pour ton soutien inconditionnel durant toutes ces longues années d'études.*

*A ma meilleurs amie Dounia je te remercie pour ton amitié chère à mon coeur et pour les moments agréables qui nous avons passé ensemble.*

*Je te souhaite Le bonheur du monde.*

*A mon binôme Chahra et a tous mes amis, mes collègues et les étudiants de mathématique et informatique et tous ceux qui n'ont jamais cessé d'une soutien.*

*A moi même Nour Elhouda.*

*NOUR ELHOUDA*

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Rappel</b>	<b>5</b>
1.1 Les espaces de <i>Hilbert</i>	5
1.1.1 La projection orthogonale	14
1.1.2 Système orthogonal et base hilbertienne	16
1.2 Les opérateurs linéaires	19
1.2.1 Ensemble résolvant et spectre d'un opérateur linéaire	22
<b>2 Equation de schrödinger en mécanique quantique</b>	<b>25</b>
2.1 La mécanique classique	25
2.2 La mécanique quantique	26
2.2.1 L'expérience des fentes d'Young	27
2.3 Postulats de la mécanique quantique	28
2.3.1 Description de l'état d'un système	29
2.3.2 Description des grandeurs physiques	30
2.3.3 Mesure des grandeurs physiques	30
2.3.4 Evolution des systèmes dans le temps	31
2.3.5 Principe de correspondance	33
2.3.6 Valeur Moyenne et Relation d'Incertitude	34
2.4 L'équation de Schrödinger et fonctions d'onde	39
2.4.1 L'équation de Schrödinger	39
2.4.2 Les fonctions d'onde	41
2.5 Equation de Schrödinger stationnaire	44
2.5.1 Etat stationnaire	44
<b>3 Applications</b>	<b>49</b>
3.1 L'équation de Schrödinger pour le champ coulombien	49
3.2 L'oscillateur Harmonique	54

<b>Conclusion</b>	<b>57</b>
<b>Bibliography</b>	<b>59</b>

# Erwin Schrödinger

Erwin Schrödinger, est né à Erdberg de Vienne, Autriche, le 12 Août 1887, était un physicien austro-irlandais lauréat du prix Nobel et avait développé un certain nombre de découvertes fondamentales en théorie quantique : L'équation



de Schrödinger fournit des information sur le système et décrit l'évolution du système au cours du temps.

En outre, il a été l'auteur de nombreux ouvrages sur divers aspects de la physique : mécanique statistique et thermodynamique, physique diélectrique, théorie des couleurs, électrodynamique, relativité générale et cosmologie, et il est également connu pour son expérience de pensée au « chat de Schrödinger ». Le 4 janvier 1961, Schrödinger mourut de la tuberculose à l'âge de 73 ans à Vienne.

# Notation

- $\mathbf{E}$  est un espace vectoriel.
- $\mathbb{R}^+$  l'ensemble des nombres réelles positives.
- $\mathbb{R}^m$  l'ensemble des nombres réelles d'ordre  $m$ .
- $\mathbb{C}$  l'ensemble des nombres complexes.
- $\mathbb{C}^m$  l'espace des  $m$  nombres complexes.
- $\mathbf{H}$  espace de Hilbert.
- $L^2(\Omega)$  l'espace des fonctions intégrables dans  $\Omega$ .
- $\mathcal{L}(\mathbf{E})$  l'espace des opérateurs linéaires continus sur  $\mathbf{E}$ .
- $\langle \cdot, \cdot \rangle$  le produit scalaire.
- $\|\cdot\|$  une norme.
- $\Delta$  le laplacien.
- $Y_l^m$  fonction sphérique.
- $P_l^m$  les fonctions de Legendre associées d'ordre  $m$ .
- $R_{n,l}$  les fonctions radiale.
- $L_n$  les polynômes de La guerre d'ordre  $l$ .
- $H_n$  les polynôme de Hermite.

# Introduction

La mécanique quantique est la branche de la physique théorique qui étudie et décrit les phénomènes fondamentaux à l'œuvre dans les systèmes physiques, plus particulièrement à l'échelle atomique et subatomique.

La mécanique quantique est née au début du  $XX^{\text{ème}}$  siècle par des travaux de plusieurs physiciens tels que (*Planck, Einstein, Bohr, Franck et Hertz, Schrödinger, ...*ect) qui ont essayé de résoudre des problèmes où la physique classique échouait à expliquer, comme le rayonnement du corps noir ...ect.

Les équations les plus utilisées dans la mécanique quantique sont : l'équation de Schrödinger, l'équation de Klein Gordon et l'équation de Dirac . Les deux équation de Klein Goldon et de Dirac sont des équations relativiste et l'équation de Schrödinger est une équation non relativiste.

Dans ce mémoire on s'intéresse à l'étude l'équation de Schrödinger qui est l'une des équations de base de la mécanique quantique non relativiste.

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique par analogie à celle de Newton en mécanique classique. Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution au cours du temps de la

fonction d'onde d'un système physique. Elle prend la forme suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi.$$

où  $H$  est l'opérateur Hamiltonien du système considéré.

Ce mémoire est composé de trois chapitres.

Dans le premier chapitre, nous rappelons les définitions générales et les propriétés des notions essentielles que nous utiliserons par la suite.

Dans le deuxième chapitre nous étudierons l'équation de Schrödinger en mécanique quantique, premièrement nous intéressons à la mécanique classique, mécanique quantique et nous énonçons les postulats, dans la suite nous avons traité l'équation de Schrödinger et nous essayons de trouver une solution à celle équation qui est représentée par la fonction d'onde  $\psi$ , et pour cela nous utilisons des méthodes mathématique.

Dans le troisième chapitre on donne quelques applications de l'équation de Schrödinger.

# Chapitre 1

## Rappel

Dans ce chapitre on rappelle des notions telles que les espaces de *Hilbert* ainsi que quelques résultats généraux d'analyse fonctionnelle, qu'on utilisera tout le long de ce mémoire.

### 1.1 Les espaces de *Hilbert*

Soit  $\mathbf{E}$  est un  $\mathbb{k}$  - espace vectoriel, où le corps des scalaires  $\mathbb{k}$  est toujours considéré  $\mathbb{R}$  ou  $\mathbb{C}$ .

#### Définition 1.1.1

*Une forme sesquilinéaire  $\varphi$  sur  $\mathbf{E}$  est une application*

$$\varphi : \mathbf{E} \times \mathbf{E} \rightarrow \mathbb{C}$$

telle que

$$x \mapsto \varphi(x, y) \text{ est antilinéaire (linéaire dans le cas réel);} \quad (1.1)$$

$$y \mapsto \varphi(x, y) \text{ est linéaire.} \quad (1.2)$$

Ce qui signifie qu'on a les propriétés suivantes pour tous vecteurs  $x, y, x_1, x_2, y_1, y_2$  de  $\mathbf{E}$  et pour tout scalaire  $\lambda$  :

$$\varphi(\lambda x, y) = \bar{\lambda}\varphi(x, y) \quad ; \quad \varphi(x, \lambda y) = \lambda\varphi(x, y) \quad ; \quad (1.3)$$

$$\varphi(x_1 + x_2, y_1 + y_2) = \varphi(x_1, y_1) + \varphi(x_1, y_2) + \varphi(x_2, y_1) + \varphi(x_2, y_2). \quad (1.4)$$

### Remarque 1.1.1

Dans le cas réel, i.e  $\mathbf{E}$  est un espace vectoriel réel, la forme  $\varphi$  est définie de  $\mathbf{E} \times \mathbf{E}$  dans  $\mathbb{R}$  et elle est dite bilinéaire.

### Définition 1.1.2

Une forme sesquilinéaire  $\varphi$  sur  $\mathbf{E}$  est dite

(i) hermitienne si

$$\varphi(x, y) = \overline{\varphi(y, x)}, \quad \forall (x, y) \in \mathbf{E} \times \mathbf{E} \quad (\text{Symétrique dans le ca réel}) ; \quad (1.5)$$

(ii) positive si

$$\varphi(x, x) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbf{E} ; \quad (1.6)$$

(iii) définie positive si

$$\varphi(x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0. \quad (1.7)$$

### Définition 1.1.3

Une forme sesquilinéaire sur  $\mathbf{E}$  hermitienne définie positive est appelée un produit scalaire sur  $\mathbf{E}$  et notée

$$(x, y) \in \mathbf{E} \times \mathbf{E} \mapsto \varphi(x, y) = \langle x | y \rangle \in \mathbb{C}. \quad (1.8)$$

### Remarque 1.1.2

Dans le cas où  $\mathbf{E}$  est un espace vectoriel réel, un produit scalaire sur  $\mathbf{E}$  est une forme bilinéaire sur  $\mathbf{E}$  symétrique définie positive.

### Exemple 1.1.1

1) Sur l'espace vectoriel  $\mathbb{C}^m$  (resp.  $\mathbb{R}^m$ ) la forme sesquilinéaire (resp. bilinéaire)

$$\langle x | y \rangle = \sum_{i=1}^m \overline{x_i} y_i \quad (\text{resp. } \langle x | y \rangle = \sum_{i=1}^m x_i y_i) \quad (1.9)$$

où  $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$  et  $y = (y_1, y_2, \dots, y_m) \in \mathbb{C}^m$  (resp.  $\in \mathbb{R}^m$ ) définit un produit scalaire.

2) Sur l'espace vectoriel  $L^2(\Omega)$ , des fonctions de carré intégrable sur  $\Omega$ , la forme sesquilinéaire (resp. bilinéaire pour les fonctions à valeurs réelles)

$$\langle x | y \rangle = \int_{\Omega} \overline{x(t)} y(t) dt \quad (\text{resp. } \langle x | y \rangle = \int_{\Omega} x(t) y(t) dt) \quad (1.10)$$

définit un produit scalaire.

Soit  $\mathbf{E}$  un espace vectoriel muni d'un produit scalaire. On définit une application de  $\mathbf{E}$  dans  $\mathbb{R}^+$  par

$$x \in \mathbf{E} \mapsto \|x\| = \sqrt{\langle x \mid x \rangle} \in \mathbb{R}^+. \quad (1.11)$$

### **Théorème 1.1.1**

*Soit  $\mathbf{E}$  un espace vectoriel muni d'un produit scalaire. Alors on a :*

*1- l'inégalité de Cauchy – Schwarz*

$$|\langle x \mid y \rangle| \leq \|x\| \|y\|, \quad \forall (x, y) \in \mathbf{E} \times \mathbf{E}; \quad (1.12)$$

*2- l'inégalité de Minkowski*

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \quad \forall (x, y) \in \mathbf{E} \times \mathbf{E}. \quad (1.13)$$

### **Démonstration 1.1.1**

*Montrons d'abord l'inégalité de Cauchy–Schwarz et l'inégalité de Minkowski ne sera qu'une simple conséquence de la première.*

*En effet, Soient  $x$  et  $y \in \mathbf{E}$  considérons pour tout  $\lambda \in \mathbb{R}$  le trinôme*

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\lambda) &= \langle x + \lambda y \mid x + \lambda y \rangle = \langle x \mid x \rangle + \lambda \langle x \mid y \rangle + \lambda \langle y \mid x \rangle + \lambda^2 \langle y \mid y \rangle \\ &= \|x\|^2 + 2\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle \lambda + \lambda^2 \|y\|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

*(où  $\operatorname{Re}$  désigne la partie réelle), alors le discriminant du trinôme  $\mathbf{P}(\lambda)$  doit être  $\leq 0$ , donc*

$$[\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle]^2 - \|x\|^2 \|y\|^2 \leq 0$$

c'est-à-dire

$$|\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle| \leq \|x\| \|y\|. \quad (1.14)$$

Si on est dans le cas réel, i.e. le produit scalaire est réel, alors l'inégalité (1.14) n'est autre que l'inégalité cherchée. Si le produit scalaire est complexe, on sait que  $\forall (x, y) \in \mathbf{E} \times \mathbf{E}$  il existe un  $\theta$  tel que  $\langle x \mid y \rangle = |\langle x \mid y \rangle| e^{i\theta}$ ; donc  $e^{-i\theta} \langle x \mid y \rangle = |\langle x \mid y \rangle| \geq 0$  et

$$|\langle x \mid y \rangle| = e^{-i\theta} \langle x \mid y \rangle = \langle e^{i\theta} x \mid y \rangle = |\operatorname{Re} \langle e^{i\theta} x \mid y \rangle| \leq \|e^{i\theta} x\| \|y\| = \|x\| \|y\|. \quad (1.15)$$

Montrons maintenant l'inégalité de Minkowski.

En effet, on sait que

$$\|x + y\|^2 = \langle x + y \mid x + y \rangle = \|x\|^2 + 2\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle + \|y\|^2 \leq \|x\|^2 + 2\|x\| \|y\| + \|y\|^2 = (\|x\| + \|y\|)^2 \quad (1.16)$$

c'est-à-dire l'inégalité de Minkowski

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

### Proposition 1.1.1

L'application définie par la relation (1.11) de  $\mathbf{E}$  dans  $\mathbb{R}^+$

$$x \in \mathbf{E} \mapsto \|x\| = \sqrt{\langle x \mid x \rangle} \in \mathbb{R}^+$$

est une norme sur  $\mathbf{E}$  dite norme induite par le produit scalaire.

**Définition 1.1.4**

Un espace vectoriel  $\mathbf{E}$  muni d'un produit scalaire et de la norme induite est appelé espace préhilbertien.

**Théorème 1.1.2** (*L'égalité du parallélogramme*)

Soit  $\mathbf{E}$  espace préhilbertien et soient  $x$  et  $y \in \mathbf{E}$ . Alors on a l'égalité suivante

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2(\|x\|^2 + \|y\|^2) , \quad (1.17)$$

appelée égalité du parallélogramme (qui signifie que dans un parallélogramme la somme des carrés des diagonales est égale à la somme des carrés des côtés).

**Démonstration 1.1.2**

En effet, on sait que

$$\begin{aligned} \|x + y\|^2 &= \langle x + y \mid x + y \rangle = \langle x \mid x \rangle + \langle x \mid y \rangle + \langle y \mid x \rangle + \langle y \mid y \rangle \\ &= \|x\|^2 + 2\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle + \|y\|^2 , \end{aligned} \quad (1.18)$$

et donc

$$\|x - y\|^2 = \|x\|^2 - 2\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle + \|y\|^2 , \quad (1.19)$$

d'où

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2(\|x\|^2 + \|y\|^2) .$$

**Théorème 1.1.3** (*Les identités de polarisation*)

Soient  $x, y$  deux éléments d'un espace préhilbertien  $\mathbf{E}$ . Alors on a

$$\langle x \mid y \rangle = \frac{1}{4} [\|x + y\|^2 - \|y - x\|^2] \quad (1.20)$$

si  $\mathbf{E}$  est un espace vectoriel réel et

$$\begin{aligned}\langle x \mid y \rangle &= \frac{1}{4} [\|x + y\|^2 - \|y - x\|^2] + \frac{i}{4} [\|y + ix\|^2 - \|y - ix\|^2] \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 i^k \|y + i^k x\|^2\end{aligned}\quad (1.21)$$

si  $\mathbf{E}$  est un espace vectoriel complexe.

### Démonstration 1.1.3

D'après les relations (1.18) et (1.19) on peut déduire que

$$\operatorname{Re} \langle x \mid y \rangle = \frac{1}{4} [\|x + y\|^2 - \|y - x\|^2] \quad (1.22)$$

$$\operatorname{Im} \langle x \mid y \rangle = \operatorname{Re} [-i \langle x \mid y \rangle] = \operatorname{Re} [\langle ix \mid y \rangle] = \frac{1}{4} [\|y + ix\|^2 - \|y - ix\|^2] , \quad (1.23)$$

d'où la conclusion du théorème.

### Définition 1.1.5

Deux vecteurs  $x, y$  d'un espace vectoriel  $\mathbf{E}$  muni d'un produit scalaire sont dit orthogonaux si  $\langle x \mid y \rangle = 0$ .

### Théorème 1.1.4 (Théorème de Pythagore)

Soient  $x$  et  $y$  deux vecteurs d'un espace préhilbertien  $\mathbf{E}$ . Si  $x$  et  $y$  sont orthogonaux alors on a

$$\|x + y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2. \quad (1.24)$$

#### Démonstration 1.1.4

*C'est une conséquence immédiate de l'identité*

$$\|x + y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 + \langle x | y \rangle + \langle y | x \rangle.$$

#### Proposition 1.1.2

*Soit  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien. Les applications suivantes, définies par*

$$(x, y) \in \mathbf{E} \times \mathbf{E} \mapsto \langle x | y \rangle \in \mathbb{C} ; \quad (1.25)$$

$$x \in \mathbf{E} \mapsto \langle x | y \rangle \in \mathbb{C} \quad (\forall y \in \mathbf{E}) \quad \text{et} \quad y \in \mathbf{E} \mapsto \langle x | y \rangle \in \mathbb{C} \quad (\forall x \in \mathbf{E}). \quad (1.26)$$

*sont continues.*

#### Démonstration 1.1.5

*Il suffit de remarquer que*

$$\langle x | y \rangle - \langle x_0 | y_0 \rangle = \langle x - x_0 | y - y_0 \rangle + \langle x - x_0 | y_0 \rangle + \langle x_0 | y - y_0 \rangle \quad (1.27)$$

*alors on peut déduire directement de l'inégalité de Cauchy – Schwarz (1.12) que*

$$|\langle x | y \rangle - \langle x_0 | y_0 \rangle| \leq \|x - x_0\| \|y - y_0\| + \|x - x_0\| \|y_0\| + \|x_0\| \|y - y_0\| \quad (1.28)$$

*d'où découle la continuité de chacune des trois applications ci-dessus.*

**Définition 1.1.6**

Soit  $\mathbf{M}$  un sous-ensemble d'un espace préhilbertien  $\mathbf{E}$ . On appelle l'orthogonal de  $\mathbf{M}$ , noté  $\mathbf{M}^\perp$ , le sous-ensemble de  $\mathbf{E}$  donné par

$$\mathbf{M}^\perp = \{y \in \mathbf{E} \mid \langle y \mid x \rangle = 0, \forall x \in \mathbf{M}\}. \quad (1.29)$$

**Proposition 1.1.3**

L'orthogonal  $\mathbf{M}^\perp$  d'un sous-ensemble  $\mathbf{M}$  d'un espace préhilbertien  $\mathbf{E}$  est un sous-espace vectoriel fermé de  $\mathbf{E}$ .

**Démonstration 1.1.6**

On peut facilement vérifier que  $\mathbf{M}^\perp$  est un sous-espace vectoriel de  $\mathbf{E}$ . Montrons qu'il est fermé dans  $\mathbf{E}$ .

En effet, soit  $\{x_n\}$  une suite d'éléments de  $\mathbf{M}^\perp$  qui converge vers  $x$ . Par définition de  $\mathbf{M}^\perp$ , on sait que  $\forall y \in \mathbf{M}$  on a  $\langle x_n \mid y \rangle = 0$  et puisque le produit scalaire est continu en ses arguments, on en déduit alors que

$$\langle x \mid y \rangle = \lim_{n \rightarrow +\infty} \langle x_n \mid y \rangle = 0$$

et donc

$$\langle x \mid y \rangle = 0, \forall y \in \mathbf{M} \Rightarrow x \in \mathbf{M}^\perp.$$

**Définition 1.1.7**

Un espace préhilbertien complet pour la norme induite est appelé espace de Hilbert. Les espaces de Hilbert sont habituellement notés par la lettre  $\mathbf{H}$ .

### Exemple 1.1.2

1) L'espace vectoriel  $\mathbb{C}^m$  (resp.  $\mathbb{R}^m$ ) muni de la norme induite du produit scalaire (1.9)

$$\|x\|^2 = \sum_{i=1}^m |x_i|^2, \quad (1.30)$$

est un espace de Hilbert.

2) L'espace vectoriel  $L^2(\Omega)$  muni de la norme induite du produit scalaire (1.10)

$$\|x\|^2 = \int_{\Omega} |x(t)|^2 dt, \quad (1.31)$$

est un espace de Hilbert.

## 1.1.1 La projection orthogonale

### Théorème 1.1.5

Soit  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien et  $\mathbf{M}$  un sous-ensemble convexe et complet de  $\mathbf{E}$ . Pour tout élément  $x \in \mathbf{E}$  il existe un et un seul élément  $y \in \mathbf{M}$  situé à une distance minimale de  $x$  :

$$\|x - y\| \leq \|x - z\|, \quad \forall z \in \mathbf{M}. \quad (1.32)$$

### Théorème 1.1.6 (La projection orthogonale)

Soit  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien et  $\mathbf{F}$  un sous-espace vectoriel complet de  $\mathbf{E}$ . Soit  $y$  l'élément de  $\mathbf{F}$  à plus courte distance de  $x$ , alors  $y$  est le seul élément de  $\mathbf{F}$  tel que  $x - y$  soit orthogonal à  $\mathbf{F}$ , et on dit que  $y$  est la projection orthogonale de  $x$  sur  $\mathbf{F}$ .

Si on note cet élément  $y$  par  $\mathbf{P}_{\mathbf{F}}x$  i.e.  $y = \mathbf{P}_{\mathbf{F}}x$ , on a donc

$$y = \mathbf{P}_{\mathbf{F}}x \Leftrightarrow \langle x - y \mid z \rangle = 0, \forall z \in \mathbf{F} \Leftrightarrow \langle x \mid z \rangle = \langle y \mid z \rangle, \forall z \in \mathbf{F}. \quad (1.33)$$

On dira alors que l'application  $\mathbf{P}_{\mathbf{F}}$  de  $\mathbf{E}$  dans  $\mathbf{E}$  est la projection orthogonale sur  $\mathbf{F}$ .

### Corollaire 1.1.1

Soit  $\mathbf{H}$  un espace de Hilbert et  $\mathbf{F}$  un sous-espace vectoriel de  $\mathbf{H}$ . Pour que  $\mathbf{F}$  soit dense dans  $\mathbf{H}$ , il faut et il suffit que l'orthogonal de  $\mathbf{F}$  soit réduit au vecteur nul i.e.  $\mathbf{F}^\perp = \{0\}$ .

### Proposition 1.1.4

Soit  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien et  $\mathbf{F}$  un sous-espace vectoriel complet de  $\mathbf{E}$  (non réduit au vecteur nul). Alors on a

(i)  $\mathbf{E} = \mathbf{F} \oplus \mathbf{F}^\perp$  et  $\mathbf{P}_{\mathbf{F}}$  est la projection sur  $\mathbf{F}$  parallèlement à  $\mathbf{F}^\perp$ .

(ii) L'opérateur de projection orthogonale

$$\mathbf{P}_{\mathbf{F}} : x \in \mathbf{E} \mapsto \mathbf{P}_{\mathbf{F}}x \in \mathbf{F}, \quad (1.34)$$

est continu et vérifie

$$\|\mathbf{P}_{\mathbf{F}}x\| \leq \|x\|, \quad \forall x \in \mathbf{E}. \quad (1.35)$$

(iii)  $(\mathbf{F}^\perp)^\perp = \mathbf{F}$ .

### Démonstration 1.1.7

Voir [3].

**Théorème 1.1.7** (*Théorème de Riesz*)

Soient  $\mathbf{H}$  un espace de Hilbert et  $\varphi$  une forme linéaire continue sur  $\mathbf{H}$ . Il existe un vecteur  $a \in \mathbf{H}$ , et un seul, tel qu'on ait

$$\langle \varphi, x \rangle = \langle a | x \rangle, \quad \forall x \in \mathbf{H}. \quad (1.36)$$

Où on a noté  $\varphi(x) = \langle \varphi, x \rangle$  et on entend par  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  le produit de dualité entre  $\mathbf{H}$  et son dual  $\mathbf{H}'$ .

**Démonstration 1.1.8**

Voir [3].

## 1.1.2 Système orthogonal et base hilbertienne

**Définition 1.1.8**

Soit  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien. La suite  $(e_n)$  de vecteurs de  $\mathbf{E}$  constitue un système orthogonal si, on a :

$$\langle e_i | e_j \rangle = 0 \quad \text{si } i \neq j ; \quad (1.37)$$

et on dit que la suite  $(e_n)$  constitue un système orthonormal si, quels que soient les indices  $i$  et  $j$ , on a :

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} . \quad (1.38)$$

Si  $x$  est un vecteur de  $\mathbf{E}$  on appelle  $n$  – ième coefficient de  $x$  par rapport au système  $(e_n)$  le nombre :

$$c_n(x) = \langle e_n | x \rangle . \quad (1.39)$$

**Remarque 1.1.3**

*Tout système orthogonal est libre.*

**Théorème 1.1.8 ( Inégalité de Bessel )**

*Soient  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien,  $(e_n)$  un système orthonormal de  $\mathbf{E}$  et  $x$  est un vecteur de  $\mathbf{E}$ ; on a :*

$$\sum_n |c_n(x)|^2 \leq \|x\|^2. \quad (1.40)$$

**Démonstration 1.1.9**

*Voir [3].*

**Définition 1.1.9**

*Un système orthonormal  $(e_n)$  d'un espace préhilbertien  $\mathbf{E}$  est dit complet ou total si l'ensemble des combinaisons linéaire finies des vecteurs du système orthonormal  $(e_n)$  est partout dense dans  $\mathbf{E}$ . Un système orthonormal  $(e_n)$  complet est appelé une base hilbertienne.*

**Théorème 1.1.9 (égalité de Parseval)**

*Soit  $(e_n)$  un système orthogonal de l'espace préhilbertien  $\mathbf{E}$ ; pour que ce système constitue une base hilbertienne il faut et il suffit que,  $\forall x \in \mathbf{E}$ , on ait :*

$$\|x\|^2 = \sum_n |c_n(x)|^2. \quad (1.41)$$

**Démonstration 1.1.10**

*Voir [3].*

**Corollaire 1.1.2**

Si  $(e_n)$  est une base hilbertienne de l'espace préhilbertien  $\mathbf{E}$  et si  $x$  et  $y \in \mathbf{E}$ .

On a :

$$\begin{aligned}\langle x | y \rangle &= \sum_n \overline{\langle e_n | x \rangle} \langle e_n | y \rangle \\ &= \sum_n \langle x | e_n \rangle \langle e_n | y \rangle.\end{aligned}\tag{1.42}$$

**Démonstration 1.1.11**

Voir [3].

**Corollaire 1.1.3**

Si  $(e_n)$  est une base hilbertienne de l'espace préhilbertien  $\mathbf{E}$  si  $x \in \mathbf{E}$ . La série  $\sum_n \langle e_n | x \rangle e_n$  est convergente et de somme  $x$ . i.e.  $x = \sum_n \langle e_n | x \rangle e_n$ .

**Démonstration 1.1.12**

Voir [3].

**Corollaire 1.1.4**

Soit  $\mathbf{E}$  un espace préhilbertien ; pour que le système orthonormal  $(e_n)$  soit total il faut et il suffit que les relations

$$\langle e_n | x \rangle = 0, \forall n \Rightarrow x = 0.\tag{1.43}$$

**Démonstration 1.1.13**

Voir [3].

## 1.2 Les opérateurs linéaires

### Définition 1.2.1

Soient  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{F}$  deux espaces de Banach. On appelle opérateur linéaire de  $\mathbf{E}$  dans  $\mathbf{F}$  toute application linéaire

$$\mathbf{A} : \mathbf{D}(\mathbf{A}) \subset \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{F}$$

définie sur un sous-espace vectoriel  $\mathbf{D}(\mathbf{A}) \subset \mathbf{E}$ , à valeur dans  $\mathbf{F}$ .  $\mathbf{D}(\mathbf{A})$  est le domaine de  $\mathbf{A}$ .

Précisons quelques notations et définitions importantes

$$\text{Graphe de } \mathbf{A} = \mathbf{Gr}(\mathbf{A}) = \{(x, \mathbf{A}x) / x \in \mathbf{D}(\mathbf{A})\} \subset \mathbf{E} \times \mathbf{F}.$$

$$\text{Image de } \mathbf{A} = \mathbf{Im}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{A}x / x \in \mathbf{D}(\mathbf{A})\} \subset \mathbf{F}.$$

$$\text{Noyau de } \mathbf{A} = \mathbf{N}(\mathbf{A}) = \{x \in \mathbf{D}(\mathbf{A}) ; \mathbf{A}x = 0\} \subset \mathbf{E}.$$

### Définition 1.2.2

On dit qu'un opérateur  $\mathbf{A}$  est fermé si son graphe  $\mathbf{Gr}(\mathbf{A})$  est fermé dans  $\mathbf{E} \times \mathbf{F}$ .

### Remarque 1.2.1

Pour prouver qu'un opérateur  $\mathbf{A}$  est fermé on procède en général de la manière suivante. On prend une suite  $(x_n)$  dans  $\mathbf{D}(\mathbf{A})$  telle que  $x_n \rightarrow x$  dans  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{A}x_n \rightarrow y$  dans  $\mathbf{F}$ . Il s'agit ensuite de vérifier que

$$(i) \quad x \in \mathbf{D}(\mathbf{A}) \quad \text{et} \quad (ii) \quad \mathbf{A}x = y. \quad (1.44)$$

### Remarque 1.2.2

Il est facile de vérifier que si l'opérateur  $\mathbf{A}$  est fermé, alors  $\mathbf{N}(\mathbf{A})$  est fermé.

### Définition 1.2.3 (L'adjoint d'un opérateur linéaire)

Soit  $\mathbf{A} : \mathbf{D}(\mathbf{A}) \subset \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{F}$  un opérateur linéaire à domaine dense, i.e  $\overline{\mathbf{D}(\mathbf{A})} = \mathbf{E}$ . On va définir un opérateur  $\mathbf{A}^* : \mathbf{D}(\mathbf{A}^*) \subset \mathbf{F}' \rightarrow \mathbf{E}'$  comme suit. on pose

$$\mathbf{D}(\mathbf{A}^*) = \{f \in \mathbf{F}' , \exists c \geq 0 \text{ tel que } |\langle f | \mathbf{A}x \rangle| \leq c \|x\| \ \forall x \in \mathbf{D}(\mathbf{A})\}. \quad (1.45)$$

Il est clair que  $\mathbf{D}(\mathbf{A}^*)$  est un sous-espace vectoriel de  $\mathbf{F}'$ . on va maintenant définir  $\mathbf{A}^*f$  pour  $f \in \mathbf{D}(\mathbf{A}^*)$ . Etant donné  $f \in \mathbf{D}(\mathbf{A}^*)$  considérons l'application  $g : \mathbf{D}(\mathbf{A}) \rightarrow \mathbb{k}$  ( $\mathbb{k}$  est  $\mathbb{R}$  ou  $\mathbb{C}$ ) définie par

$$g(x) = \langle f | \mathbf{A}x \rangle \quad \forall x \in \mathbf{D}(\mathbf{A}). \quad (1.46)$$

On a alors

$$|g(x)| \leq c \|x\| \quad \forall x \in \mathbf{D}(\mathbf{A}). \quad (1.47)$$

Grâce au théorème de *Hahn – Banach* (ou le théorème du prolongement par continuité car  $\mathbf{D}(\mathbf{A})$  est dense dans  $\mathbf{E}$ ) on sait que  $g$  peut être prolongée en une application linéaire  $\tilde{g} : \mathbf{E} \rightarrow \mathbb{k}$  telle que

$$|\tilde{g}(x)| \leq c \|x\| \quad \forall x \in \mathbf{D}(\mathbf{A}). \quad (1.48)$$

Par suite  $\tilde{g} \in \mathbf{E}'$ . Il faut bien remarquer que le prolongement de  $g$  est unique puisque  $\tilde{g}$  est continue sur  $\mathbf{E}$  et que  $\mathbf{D}(\mathbf{A})$  est dense.

On pose

$$\mathbf{A}^* f = \tilde{g}. \quad (1.49)$$

Il est clair que  $\mathbf{A}^*$  est un opérateur linéaire. L'opérateur  $\mathbf{A}^*: \mathbf{D}(\mathbf{A}^*) \subset \mathbf{F}' \rightarrow \mathbf{E}'$  est appelé l'adjoint de l'opérateur  $\mathbf{A}$ .

On a alors la relation fondamentale suivante qui lie  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{A}^*$  :

$$\langle f | \mathbf{A}x \rangle_{\mathbf{F}', \mathbf{F}} = \langle \mathbf{A}^* f | x \rangle_{\mathbf{E}', \mathbf{E}} \quad \forall x \in \mathbf{D}(\mathbf{A}), \forall f \in \mathbf{D}(\mathbf{A}^*). \quad (1.50)$$

### **Théorème 1.2.1**

*Si  $\mathbf{A}^*$  est l'adjoint de l'opérateur linéaire  $\mathbf{A}$ , alors  $\mathbf{A}^*$  est opérateur fermé.*

### **Démonstration 1.2.1**

Voir [4].

### **Définition 1.2.4 ( opérateur hermitien)**

(i) *Un opérateur linéaire  $\mathbf{A}$  défini dans un espace de Hilbert est dit symétrique si, quels que soient  $x$  et  $y \in \mathbf{D}(\mathbf{A})$ , on a*

$$\langle y | \mathbf{A}x \rangle = \langle \mathbf{A}y | x \rangle. \quad (1.51)$$

*i.e.  $\mathbf{A} \subset \mathbf{A}^*$ .*

(ii) *Un opérateur linéaire  $\mathbf{A}$ , défini dans un espace de Hilbert complexe  $\mathbf{H}$ , est dit hermitien (ou hermitique) si*

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^*. \quad (1.52)$$

*Dans le cas où l'espace de Hilbert  $\mathbf{H}$  est réel on dit que  $\mathbf{A}$  est auto-adjoint.*

### 1.2.1 Ensemble résolvant et spectre d'un opérateur linéaire

Soit  $\mathbf{E}$  un espace de Banach. Considérons un opérateur linéaire  $\mathbf{A}$  dans  $\mathbf{E}$  défini sur un sous-espace  $D(\mathbf{A})$  dense dans  $\mathbf{E}$ . Considérons ensuite l'opérateur  $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$ , où  $\lambda$  est un scalaire et  $\mathbf{I}$  l'opérateur unité dans  $\mathcal{L}(\mathbf{E})$ , l'espace des opérateurs linéaires continus sur  $\mathbf{E}$ .

**Définition 1.2.5** (*L'ensemble résolvant*)

Un point  $\lambda$  s'appelle point régulier de  $\mathbf{A}$  si l'opérateur  $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$  est continûment inversible, i.e.  $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1}$  existe et  $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1} \in \mathcal{L}(\mathbf{E})$ . L'ensemble des points réguliers de l'opérateur  $\mathbf{A}$  s'appelle ensemble résolvant de  $\mathbf{A}$  et se note  $\rho(\mathbf{A})$ . Si  $\lambda \in \rho(\mathbf{A})$ , l'opérateur linéaire  $R_\lambda(\mathbf{A}) = (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1} \in \mathcal{L}(\mathbf{E})$  s'appelle résolvante de  $\mathbf{A}$ .

**Théorème 1.2.2**

*L'ensemble résolvant  $\rho(\mathbf{A})$  est toujours un ensemble ouvert.*

**Démonstration 1.2.2**

*Voir [12].*

**Définition 1.2.6** (*Le spectre*)

*Le complémentaire de  $\rho(\mathbf{A})$  s'appelle spectre de  $\mathbf{A}$  et se note  $\sigma(\mathbf{A})$ .*

**Définition 1.2.7**

Un scalaire  $\lambda$  s'appelle valeur propre de l'opérateur  $\mathbf{A}$  s'il existe un vecteur  $x \neq 0$ ,  $x \in D(\mathbf{A})$ , tel que

$$\mathbf{A}x = \lambda x. \quad (1.53)$$

Ce vecteur  $x$  s'appelle vecteur propre de  $\mathbf{A}$  associé à la valeur propre  $\lambda$ .

**Remarque 1.2.3**

Il est clair que toute valeur propre  $\lambda$  de l'opérateur  $\mathbf{A}$  est une valeur spectrale de  $\mathbf{A}$ , i.e.  $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ , car  $\mathbf{N}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) \neq \{0\}$  donc  $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$  n'est pas injectif.

**Définition 1.2.8**

On appelle l'ensemble des valeurs propres de  $\mathbf{A}$  le spectre discret (ou ponctuel) de  $\mathbf{A}$ , et on le note

$$\sigma_d(\mathbf{A}) \subset \sigma(\mathbf{A}).$$

**Remarque 1.2.4**

On peut facilement montrer que l'ensemble des vecteurs propres associé à une même valeur propre  $\lambda$  devient, après l'adjonction du vecteur nul  $0$ , un sous-espace vectoriel dans  $\mathbf{E}$ , à savoir : le sous-espace vectoriel propre associée à  $\lambda$ .

**Théorème 1.2.3**

Les vecteurs propres d'un opérateur linéaire associés à ses différentes valeurs propres forment une famille libre.

**Démonstration 1.2.3**

Voir [12].

### **Théorème 1.2.4**

*Soit  $\mathbf{A}$  un opérateur linéaire hermitien défini dans un espace de Hilbert  $\mathbf{H}$ . Alors on a*

- (i) Ses valeurs propres sont réelles.*
- (ii) Les vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.*

### **Démonstration 1.2.4**

*Voir [3].*

Pour plus de détails concernant toutes les notions données dans ce chapitre voir [[3], [4], [5], [7], [12]].

# Chapitre 2

## Equation de schrödinger en mécanique quantique

Dans ce chapitre, nous présenterons l'équation de Schrödinger en mécanique quantique, nous donnerons un aperçu de la mécanique quantique et nous essayerons de trouver une solution générale à cette équation à l'aide de certaines méthodes mathématiques, que nous verrons dans la suite.

### 2.1 La mécanique classique

La mécanique newtonienne (*Isaac Newton* 1642 – 1727), en s'appuyant sur les notions de la cinématique (position, vitesse, accélération,...) et celle de force, permet de prédire le mouvement des corps solides à l'aide d'un certain nombre de lois universelles : Le principe d'inertie, le principe d'action-réaction, la relation fondamentale de la dynamique reliant l'accélération d'une particule de masse  $m$  à la force  $F$  exercée sur celle-ci. On doit ajouter à ces trois principes une quatrième loi fondant la théorie newtonienne de la gravitation.

La théorie newtonienne a bien connu des grands succès, essentiellement

pour la description du mouvement des corps célestes, culminant avec la découverte de certaines planètes.

La théorie de l'électromagnétisme parallèlement à la théorie du mouvement des corps matériels, les phénomènes de natures électrique et magnétique étaient décrits par un certain nombre de lois unifiées dans ce qui est aujourd'hui appelé l'électromagnétisme. C'est *James Clerk Maxwell* (1831 – 1879) qui donna une vision unifiée de l'ensemble des phénomènes à travers ses fameuses équations qui portent aujourd'hui son nom. Evoquons aussi le rôle important et déterminant de *Heinrich Rudolf Hertz* (1857 – 1894) qui mit en évidence expérimentalement l'existence des ondes électromagnétiques, prédites par les équations de *Maxwell*, et montra que la lumière est une forme de rayonnement électromagnétique.

Bien que ces deux théories ont eu des grands succès et c'est à la fin du *XIXe* siècle, que par un certain nombre de problèmes qui ne trouvaient pas de solution dans ce cadre, elles sont remise en cause (les limites de la mécanique classique), par exemple le rayonnement du corps noir et l'aspect ondulatoire de la matière (fentes de *Young*).

## 2.2 La mécanique quantique

La mécanique quantique est la théorie fondamentale des structures et processus physique à l'échelle microscopique (atomique, moléculaire...). Dans l'état actuel des connaissances scientifiques, la mécanique quantique joue un rôle fondamental pour la description et la compréhension des phénomènes naturels à l'échelle atomique ou moléculaire. Historiquement on peut dire que la physique quantique voit ses premiers jours au début du vingtième siècle, lorsque

*Planck*, proposa une formule simple en parfait accord avec les expériences sur le spectre du rayonnement du corps noir. Puis *Einstein* publie en 1905 son célèbre mémoire sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière, suivi d'une série d'articles fondamentaux où il relève et rectifie certaines incohérences dans les raisonnements de *Planck*. En 1912, *Bohr* propose un modèle de l'atome d'hydrogène convaincant en postulant que l'absorption et l'émission de lumière par la matière se faisait par quantités discrètes. Ce n'est en fait qu'à partir de 1914 que ces idées théoriques vont trouver leur confirmation expérimentale avec les expériences de *Franck et Hertz* qui corroborent parfaitement les prédictions de *Bohr* sur la quantification de l'absorption et l'émission d'énergie lumineuse par les systèmes atomiques ou moléculaires. Plusieurs expériences viennent confirmer cette théorie naissante i.e. la mécanique quantique. Nous allons illustrer ici une expérience qui est celle des fentes de *Young* qui montre l'aspect ondulatoire de la matière.

### 2.2.1 L'expérience des fentes d'Young

L'expérience d'interférences d'ondes optiques, acoustiques ou d'ondulations à la surface d'un liquide, est simple à réaliser. Une onde plane monochromatique de longueur d'onde  $\lambda$  provenant d'une source  $S$  est envoyée perpendiculairement à un écran  $E$  dans lequel sont percées deux fentes parallèles  $S_1$  et  $S_2$ . Ces deux fentes se comportent comme des sources secondaires, et l'intensité recueillie sur un écran à la sortie révèle les interférences des faisceaux issus de ces fentes. Quand les deux fentes  $S_1$  et  $S_2$  sont ouvertes à la fois, on observe sur l'écran un système de franges d'interférence : on constate en particulier que l'intensité  $I(x)$  correspondante n'est pas la somme des intensités produites par

$S_1$  et  $S_2$  séparément :

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x).$$

où  $I_1(x)$  est l'intensité lumineuse dans le point diffraction par  $S_1$ ,  $I_2(x)$  est l'intensité lumineuse dans le point diffraction par  $S_2$ . L'amplitude  $\psi_c$  de l'onde arrivant en un point  $C$  est la somme des amplitudes  $\psi_1$  et  $\psi_2$  issues des deux fentes, et l'intensité  $I_c$  est :

$$I_c = |\psi_c|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2.$$

Cette formule est à la base du phénomène d'interférences. L'intensité  $I_c$  est forte si les amplitudes  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont en phase, elle s'annule si elles sont en opposition de phase.

## 2.3 Postulats de la mécanique quantique

Toute théorie est basée sur un certain nombre de postulats (axiomes) qui doivent obéir à quelques règles, telles que la causalité, la conservation de l'énergie-impulsion d'un système isolé. C'est la confrontation à l'expérience qui permet de valider la pertinence du choix des axiomes.

En mécanique classique, le mouvement d'un système matériel quelconque est déterminé si l'on connaît, en fonction du temps, la position et la vitesse de chacun de ses points.

La description classique d'un système matériel peut donc être résumée de la manière suivante :

1) L'état du système à un instant  $t_0$  fixé est défini par la donnée de sa position et sa vitesse.

2) La valeur, à un instant donné, des diverses grandeurs physiques est parfaitement déterminée lorsqu'on connaît l'état du système à cet instant : on peut prédire de façon certaine, à partir de l'état du système, le résultat d'une mesure quelconque effectuée au temps  $t_0$ .

3) L'évolution dans le temps de l'état du système est donnée par les équations de *Hamilton – Jacobi*. L'état du système à un instant quelconque est déterminé si l'on connaît son état initial.

Nous allons maintenant énoncer les postulats sur lesquels est fondée la description quantique des systèmes physiques. Ces postulats nous donnent une réponse aux questions suivantes (correspondant aux trois points énumérés ci-dessus pour la description classique) :

(i) Comment décrire mathématiquement l'état d'un système quantique à un instant donné ?

(ii) Comment, cet état étant donné, prévoir les résultats de mesure des diverses grandeurs physiques ?

(iii) Comment trouver l'état du système à un instant  $t$  quelconque lorsqu'on connaît cet état à l'instant  $t_0$  ?

### **2.3.1 Description de l'état d'un système**

Nous allons introduire la notion d'état quantique d'une particule, que nous pouvons caractériser à un instant donné par une fonction de carré sommable.

**1er Postulat** :

*A un instant  $t_0$  fixé, l'état d'un système physique isolé est défini par la donnée d'un vecteur  $\psi(t_0)$  appartenant à l'espace des états  $\mathcal{E}$ .*

Il est essentiel ici de noter que, comme l'espace des états  $\mathcal{E}$  est un espace vectoriel, ce premier postulat implique un principe de superposition : i.e. une combinaison linéaire de vecteurs d'état est un vecteur d'état.

### 2.3.2 Description des grandeurs physiques

**2ème Postulat** :

*Toute grandeur physique mesurable  $\mathcal{A}$  est décrite par un opérateur  $\mathbf{A}$  agissant dans  $\mathcal{E}$  ; cet opérateur est une observable.*

*Remarque :*

Contrairement à la mécanique classique, la mécanique quantique décrit de façon fondamentalement différente l'état d'un système et les grandeurs physiques associées : un état est représenté par un vecteur, une grandeur physique par un opérateur.

### 2.3.3 Mesure des grandeurs physiques

**3ème Postulat** :

*La mesure d'une grandeur physique  $\mathcal{A}$  ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres de l'observable  $\mathbf{A}$  correspondante.*

*Remarques :*

(i) Une mesure de  $\mathcal{A}$  donnera toujours une valeur réelle, puisque  $\mathbf{A}$  est par définition hermitique.

(ii) Si le spectre de  $\mathbf{A}$  est discret, les résultats que l'on peut obtenir en mesurant  $\mathcal{A}$  sont quantifiés.

**4ème Postulat :**

*(cas d'un spectre discret non dégénéré) Lorsqu'on mesure la grandeur physique  $\mathcal{A}$  sur un système dans l'état  $\psi$  normé, la probabilité  $P(a_n)$  d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée  $a_n$  de l'observable  $\mathbf{A}$  correspondante est :*

$$P(a_n) = |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 \quad (2.1)$$

*où  $\varphi_n$  est le vecteur propre normé de  $A$  associé à la valeur propre  $a_n$ , et  $\langle \varphi_n | \psi \rangle$  est le produit scalaire entre  $\varphi_n$  et  $\psi$ .*

**5ème Postulat :**

*Si la mesure de la grandeur physique  $\mathcal{A}$  sur le système dans l'état  $\psi$  donne le résultat  $a_n$ , l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée,*

$$\frac{P_n \psi}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad (2.2)$$

*de  $\psi$  sur le sous-espace propre associé à  $a_n$ . On a noté  $\langle \psi | P_n | \psi \rangle = \langle \psi | (P_n \psi) \rangle$ .*

L'état du système aussitôt après la mesure est donc toujours un vecteur propre de  $\mathbf{A}$  de valeur propre  $a_n$ .

### 2.3.4 Evolution des systèmes dans le temps

**6ème Postulat :**

*L'évolution dans le temps du vecteur d'état  $\psi(t)$  est régie par l'équation de Schrödinger :*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \mathbf{H}(t) \psi(t) , \quad (2.3)$$

*où  $\mathbf{H}(t)$  est l'observable associée à l'énergie totale du système.*

$\mathbf{H}$  est appelé l'opérateur *hamiltonien* du système, car on l'obtient à partir de la fonction de *Hamilton* classique.

Pour mettre en oeuvre ces postulats, il faut définir l'espace de *Hilbert*, l'*hamiltonien* et les observables. Dans le cas d'une particule à une dimension, cela donne :

$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ \varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \ / \ \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx < +\infty \right\} . \quad (2.4)$$

$$\hat{x} : \varphi(x) \mapsto x\varphi(x) ; \quad (2.5)$$

$$\hat{p} : \varphi(x) \mapsto -i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx} ; \quad (2.6)$$

$$\mathbf{H} = H_{\text{Classique}}(x = \hat{x} , p = \hat{p}). \quad (2.7)$$

Enfin, pour qu'on puisse comprendre les différences entre mécanique classique et mécanique quantique, il est instructif de comparer leurs postulats comme suit :

1 – *Mécanique Classique* :

- (i) L'état d'un système est défini par deux fonctions  $x(t)$  et  $p(t)$ .
- (ii) Les variables dynamiques sont des fonctions de  $x(t)$  et  $p(t)$  :  $A(x(t), p(t))$ .
- (iii) Si le système est dans l'état défini par  $x$  et  $p$ , la mesure de la variable dynamique  $A$  donne le résultat  $A(x(t), p(t))$ , et l'état du système reste inchangé.
- (iv) L'évolution est décrite par les équations de *Hamilton – Jacobi* :

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} ; \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} , \quad (2.8)$$

où  $H(x(t), p(t))$  est l'*hamiltonien* du système.

2 – *Mécanique Quantique* :

(i) L'état d'un système est défini par un vecteur  $\psi(t)$  d'un espace de Hilbert

(ii) Les quantités physiques sont des opérateurs hermitiques  $\mathbf{A}$  qui ont la même expression en  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  que dans le cas classique, mais  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  sont eux-mêmes des opérateurs.

(iii) On ne peut mesurer que les valeurs propres de  $\mathbf{A}$ . La probabilité de trouver la valeur propre  $a$  est  $|\langle \varphi_a, \psi \rangle|^2$  si  $\mathbf{A}\varphi_a = a \varphi_a$ . Le système est dans l'état  $\varphi_a$  après la mesure.

(iv) L'évolution est décrite par l'équation de *Schrödinger*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \mathbf{H}(t) \psi(t)$$

où  $\mathbf{H}$  est l'opérateur associé à  $H(x(t), p(t))$  l'*hamiltonien* classique du système.

### 2.3.5 Principe de correspondance

En mécanique quantique on doit s'inspirer tout simplement de la mécanique classique en utilisant un principe qui revient à exiger que dans la limite classique, où on ne détecte pas les effets quantiques, on doit retrouver les lois de la mécanique classique. Ce principe s'appelle le **principe de correspondance**, on utilise les correspondances suivantes pour l'énergie, la position et l'impulsion

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \text{ (opérateur énergie) } . \quad (2.9)$$

$$x \rightarrow \hat{x} \text{ (opérateur position) } , \text{ i.e } x_1 \rightarrow \hat{x}_1, \quad x_2 \rightarrow \hat{x}_2 \text{ et } x_3 \rightarrow \hat{x}_3. \quad (2.10)$$

$$p \rightarrow \hat{p} \text{ (opérateur impulsion) ,}$$

$$\text{i.e } p_1 \rightarrow \hat{p}_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} , \quad p_2 \rightarrow \hat{p}_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2} \quad \text{et} \quad p_3 \rightarrow \hat{p}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_3} \quad (2.11)$$

Avec ce principe on peut bien démontrer les relations de commutations entre les opérateurs positions et impulsions, C'est-à-dire :

$$[\hat{x}_k , \hat{x}_l] = 0, \quad [\hat{p}_k , \hat{p}_l] = 0 \quad \text{et} \quad [\hat{x}_k , \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl} I , \quad k, l = 1, 2, 3 ; \quad (2.12)$$

où  $[\mathbf{A} , \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$  est le commutateur des deux opérateurs  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ .

### 2.3.6 Valeur Moyenne et Relation d'Incertitude

Lorsqu'on mesure une observable  $\mathbf{A}$  dans un état  $\psi$ , la probabilité de trouver une valeur propre  $a_m$  associée au vecteur propre  $\varphi_m$  est  $P_m = |\langle \varphi_m | \psi \rangle|^2$ .

Si on suppose que l'on fasse plusieurs mesures sur un système qu'on a préparé dans un même état  $\psi$ . Les mesures successives définissent une distribution de valeurs caractérisée par les grandeurs habituelles :

1. Valeur moyenne :

$$\bar{a} = \sum_m P_m a_m \quad (2.13)$$

2. Variance :

$$\sigma^2 = \sum_m P_m (a_m - \bar{a})^2 \quad (2.14)$$

3. Écart type :

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\sum_m P_m (a_m - \bar{a})^2}$$

Donc si on traduit ces caractéristiques de la distribution dans le langage de la mécanique quantique :

1.

$$\bar{a} = \sum_m a_m |\langle \varphi_m | \psi \rangle|^2 = \sum_m a_m \langle \varphi_m | \psi \rangle \langle \psi | \varphi_m \rangle = \left\langle \psi \left| \sum_m a_m \langle \varphi_m | \psi \rangle \varphi_m \right. \right\rangle.$$

Mais on sait que

$$\mathbf{A}\psi = \sum_m a_m \langle \varphi_m | \psi \rangle \varphi_m$$

et donc

$$\bar{a} = \langle \psi | \mathbf{A}\psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle.$$

C'est-à-dire  $\langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle$  est la valeur moyenne que l'on trouve lors de la mesure répétée de l'observable  $\mathbf{A}$  dans l'état  $\psi$ .

2. La variance peut se réécrire :

$$\sigma^2 = \sum_m P_m (a_m - \bar{a})^2 = \sum_m P_m (a_m^2 - 2a_m \bar{a} + \bar{a}^2) \quad (2.15)$$

$$= \sum_m P_m a_m^2 - 2\bar{a} \sum_m P_m a_m + \bar{a}^2 \sum_m P_m = \sum_m P_m a_m^2 - 2\bar{a}^2 + \bar{a}^2 \quad (2.16)$$

$$= \sum_m P_m a_m^2 - \bar{a}^2 = \sum_m P_m a_m^2 - \left( \sum_m P_m a_m \right)^2. \quad (2.17)$$

Or

$$\sum_m P_m a_m^2 = \sum_m a_m^2 \langle \varphi_m | \psi \rangle \langle \psi | \varphi_m \rangle = \left\langle \psi \left| \sum_m a_m^2 \langle \varphi_m | \psi \rangle \varphi_m \right. \right\rangle \quad (2.18)$$

et puisque

$$\mathbf{A}^2\psi = \sum_m a_m^2 \langle \varphi_m | \psi \rangle \varphi_m \quad (2.19)$$

donc

$$\sum_m P_m a_m^2 = \langle \psi | \mathbf{A}^2\psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A}^2 | \psi \rangle. \quad (2.20)$$

Alors

$$\sigma^2 = \langle \psi | \mathbf{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^2. \quad (2.21)$$

3. On en déduit alors une expression de l'écart type qui sera donné par :

$$\sigma = \sqrt{\langle \psi | \mathbf{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^2}. \quad (2.22)$$

En mécanique quantique, cet écart type est noté

$$\Delta \mathbf{A}_\psi = \sqrt{\langle \psi | \mathbf{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^2}. \quad (2.23)$$

Ce qu'on peut traduire d'après le 3ème *postulat*, si l'on a trouvé la valeur propre  $a_m$  (supposée non dégénérée) lors de la mesure de  $\mathbf{A}$ , le système est dans l'état  $\varphi_m$  après la mesure, et une deuxième mesure donnera  $a_m$  avec une probabilité égale à 1. Cette certitude se traduit par le fait que

$$\Delta \mathbf{A}_{\varphi_m} = 0. \quad (2.24)$$

En effet

$$\langle \varphi_m | \mathbf{A}^2 | \varphi_m \rangle = a_m^2 \langle \varphi_m | \varphi_m \rangle = a_m^2 = \langle \varphi_m | \mathbf{A} | \varphi_m \rangle^2. \quad (2.25)$$

Donc, soient deux observables  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  qui commutent, on peut alors les diagonaliser dans une base commune. Alors on peut préparer le système dans un état propre commun et trouver avec certitude une valeur propre de  $\mathbf{A}$  lors de la mesure de  $\mathbf{A}$  et une valeur propre de  $\mathbf{B}$  lors de la mesure de  $\mathbf{B}$ .

Mais si les deux observables  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  ne commutent pas, on ne peut pas trouver de base commune, et il est en général impossible de préparer le système

dans des états avec une précision arbitrairement grande sur la prédiction de  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ . Cette impossibilité se traduit par la relation d'incertitude de *Heisenberg* généralisée :

$$\Delta\mathbf{A}_\psi\Delta\mathbf{B}_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle| \quad (2.26)$$

*Preuve* : Remarquons d'abord que  $\forall \mathbf{A}, \mathbf{B}$  hermitiques alors  $\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle$  est imaginaire pur.

En effet :

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}]^* = (\mathbf{AB} - \mathbf{BA})^* = \mathbf{B}^*\mathbf{A}^* - \mathbf{A}^*\mathbf{B}^* = \mathbf{BA} - \mathbf{AB} = -[\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (2.27)$$

Alors

$$\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}]^* | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle} = -\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle. \quad (2.28)$$

Définissons maintenant les deux opérateurs hermitiques

$$\mathbf{A}_0 = \mathbf{A} - \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle \mathbf{I}, \quad \mathbf{B}_0 = \mathbf{B} - \langle \psi | \mathbf{B} | \psi \rangle \mathbf{I} \quad (2.29)$$

qui satisfont

$$\langle \psi | \mathbf{A}_0^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^2 = (\Delta\mathbf{A}_\psi)^2; \quad (2.30)$$

$$\langle \psi | \mathbf{B}_0^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{B}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{B} | \psi \rangle^2 = (\Delta\mathbf{B}_\psi)^2; \quad (2.31)$$

$$\mathbf{A}_0 = \mathbf{A}_0^*, \quad \mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_0^* \quad \text{et} \quad [\mathbf{A}_0, \mathbf{B}_0] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (2.32)$$

Considérons alors

$$P(\lambda) = \|(\mathbf{A}_0 + i\lambda \mathbf{B}_0) \psi\|^2 \geq 0 \quad (\forall \lambda \in \mathbb{R}) ; \quad (2.33)$$

mais

$$P(\lambda) = \langle \psi | (\mathbf{A}_0 - i\lambda \mathbf{B}_0) (\mathbf{A}_0 + i\lambda \mathbf{B}_0) | \psi \rangle$$

et donc

$$P(\lambda) = \langle \psi | \mathbf{A}_0^2 | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | \mathbf{B}_0^2 | \psi \rangle + \lambda(i \langle \psi | [\mathbf{A}_0, \mathbf{B}_0] | \psi \rangle). \quad (2.34)$$

Pour que ce polynôme de second degré soit positif  $\forall \lambda$  il faut que son discriminant soit négatif i.e.

$$\Delta = (i \langle \psi | [\mathbf{A}_0, \mathbf{B}_0] | \psi \rangle)^2 - 4 \langle \psi | \mathbf{A}_0^2 | \psi \rangle \langle \psi | \mathbf{B}_0^2 | \psi \rangle \leq 0$$

c'est-à-dire

$$(\Delta \mathbf{A}_\psi)^2 (\Delta \mathbf{B}_\psi)^2 \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle|^2 \quad (2.35)$$

et alors

$$\Delta \mathbf{A}_\psi \Delta \mathbf{B}_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle|. \quad (2.36)$$

On peut donc déduire qu'il est impossible de mesurer simultanément est avec une précision arbitraire deux observables qui ne commutent pas.

Pour les grandeurs position et impulsion  $x$  et  $p$ , on sait que le commutateur  $[\hat{x}, \hat{p}]$  vaut  $i\hbar$  et l'on retrouve bien

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.37)$$

C'est cette relation qui est appelée communément la relation d'incertitude de *Heisenberg*.

## 2.4 L'équation de Schrödinger et fonctions d'onde

### 2.4.1 L'équation de Schrödinger

La mécanique quantique ne permet pas seulement de développer une mécanique des particules de matière mais également une théorie de la lumière. Elle abandonne complètement la séparation matière (corpuscule) et rayonnement (onde) : les deux concepts onde et matière se fondent dans cette dualité décrivant bien matière que lumière. On peut alors se poser la question suivante : Comment cette dualité se manifeste-t-elle dans le formalisme ?

En 1926, le physicien autrichien *Erwin Schrödinger* utilisa les résultats de *Louis De Broglie*, qui affirmaient l'existence d'une onde associée à toute particule matérielle, pour se faire il établissait une équation d'onde régissant l'évolution spatio-temporelle  $\psi(x, t)$  (fonction d'onde) de l'état d'un système physique ; et par laquelle si on connaît l'état du système à un instant donné, on doit connaître l'état à tout instant ultérieur.

Pour obtenir l'équation de *Schrödinger*, pour la particule libre, nous prenons l'onde plane de *Louis de Broglie* :

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (2.38)$$

qui décrit un état de la particule d'énergie  $E = \hbar\omega$  (relation de *Planck – Einstein*) et d'impulsion  $p = \hbar k$  (relation de *Louis de Broglie*), où  $\omega$  est la pulsation et  $k$  est le vecteur d'onde.

On a donc :

$$\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}. \quad (2.39)$$

Nous souhaitons décrire des particules de masse  $m$  non relativistes. On veut que l'équation nous conduit à la relation de dispersion  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ , i.e.  $E = \frac{p^2}{2m}$  ; autrement dit, lorsqu'on injecte dans l'équation d'onde l'onde plane  $\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ , on doit aboutir à

$$\left(E - \frac{p^2}{2m}\right) Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} = 0. \quad (2.40)$$

D'après le principe de correspondance et si on procède aux substitutions  $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  et  $p \rightarrow -i\hbar \nabla$  dans la relation de dispersion (2.40). L'équation d'onde doit être alors :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t), \quad (2.41)$$

c'est l'équation de *Schrödinger* pour la particule libre, et on a l'*hamiltonien* du système pour une particule libre s'écrit :

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (2.42)$$

Généralisons cette construction de l'équation de *Schrödinger* en présence d'un potentiel. Portons l'expression de l'énergie mécanique  $E = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$  et procédons aux substitutions  $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  et  $p \rightarrow -i\hbar \nabla$ . On obtient alors :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, t)\right) \psi(x, t), \quad (2.43)$$

C'est l'équation de *Schrödinger* d'une particule non relativiste de masse  $m$  soumise à un potentiel  $V(x, t)$ , et son *hamiltonien* est

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, t). \quad (2.44)$$

### Remarque 1

D'après ce qui précède, la nature ondulatoire de l'objet mathématique qui décrit l'état du système, i.e la fonction d'onde, nous a conduit à chercher une équation d'onde, où nous avons utilisé d'une part le principe de correspondance, qui assure la transition de la mécanique quantique à la mécanique classique, et d'autre part la dualité onde-corpuscule. Rappelons que cette démarche ne constitue pas une démonstration et que l'équation de *Schrödinger* n'a pas été démontrée; elle visait à formuler le postulat d'évolution(i.e le 6ème *Postulat*) en termes d'évolution spatio-temporelle  $\psi(x, t)$  (fonction d'onde). Comme toute équation de la physique, elle est postulée et il n'y a que ses prédictions, confrontées aux résultats des expériences, confirmeront sa validité.

## 2.4.2 Les fonctions d'onde

Les solutions de l'équation de *Schrödinger* d'un système physique sont appelées des fonctions d'onde. Donc l'état quantique d'un système physique est caractérisé par une fonction d'onde  $\psi(x, t)$ , qui contient toutes les informations qu'il est possible d'obtenir sur le système physique.

Une fonction d'onde  $\psi(x, t)$  est une fonction complexe, qui caractérise l'état  $\psi$  du système physique, et on sait que l'état  $\psi$  appartient à un espace de *Hilbert*  $H$  construit sur le corps des complexes  $\mathbb{C}$  et muni du produit scalaire

$\langle \varphi | \psi \rangle$ . Il s'exprime en terme de fonctions d'onde correspondantes comme suit :

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \overline{\varphi(x)} \psi(x) dx. \quad (2.45)$$

#### 2.4.2.1 Interprétation probabiliste de la fonction d'onde

La fonction d'onde  $\psi(x, t)$  est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence. Etant donné que les positions possibles d'une particule forment un continuum, la probabilité pour que la particule soit trouvée, à l'instant  $t$ , dans un élément de volume  $dx = dx_1 dx_2 dx_3$  situé au point  $x$  doit être proportionnelle à  $dx$  et donc infinitésimale :  $dP(x, t)$ . On interprète alors  $|\psi(x, t)|^2$  comme une amplitude de densité de probabilité correspondante en posant :

$$dP(x, t) = C |\psi(x, t)|^2 dx \quad (2.46)$$

où  $C$  est une constante de normalisation.

Donc la probabilité totale pour trouver la particule n'importe où dans l'espace, à l'instant  $t$ , est égale à 1, i.e. :

$$\int dP(x, t) = 1 \quad (2.47)$$

$dP(x, t)$  étant donné par la formule (2.46), on en conclut que la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  doit être de carré sommable :

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx < \infty \quad (\text{finie}). \quad (2.48)$$

La constante de normalisation  $C$  qui figure dans (2.46) est alors donnée

par la relation :

$$\frac{1}{C} = \int |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (2.49)$$

On utilise souvent des fonctions d'onde normalisées, c'est-à-dire telles que :

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (2.50)$$

Cette interprétation physique montre que les fonctions d'onde  $\psi$  sont des amplitudes de probabilité de présence. Une fonction d'onde ne représente pas une onde classique, et il faut faire attention à ne pas se laisser tromper par l'analogie des mots.

#### 2.4.2.2 Densité et courant de probabilité

On sait l'état quantique d'une particule est décrit par une fonction d'onde  $\psi(x, t)$ , le sens du module carré de la fonction d'onde est celui d'une densité de probabilité :

$$\rho_\psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2. \quad (2.51)$$

A toute densité  $\rho_\psi$  il est naturel d'associer une densité de courant de probabilité  $J_\psi$  afin de caractériser le flo de la probabilité. Les deux quantités doivent satisfaire une équation de conservation

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\psi(x, t) + \text{div} J_\psi(x, t) = 0, \quad (2.52)$$

écriture locale de la conservation de la probabilité ( ou de la conservation du nombre de particules). La question est d'exprimer la densité de courant en

fonction de  $\psi(x, t)$ . Pour cela on calcule

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi} \psi, \quad (2.53)$$

en utilisant l'équation de *Schrodinger*, on peut déduire alors

$$J_\psi = \frac{\hbar}{2mi} (\bar{\psi} \nabla \psi - \psi \nabla \bar{\psi}). \quad (2.54)$$

## 2.5 Equation de Schrödinger stationnaire

On va essayer de résoudre l'équation de *Schrodinger* pour des potentiels indépendants du temps

La fonction d'onde d'une particule dont l'énergie potentielle  $V(x)$  ne dépend pas du temps doit vérifier l'équation de *Schrödinger* :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \psi(x, t). \quad (2.55)$$

### 2.5.1 Etat stationnaire

Cherchons s'il existe des solutions de cette équation de la forme :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \chi(t). \quad (2.56)$$

En remplaçant (2.56) dans (2.55) il vient :

$$i\hbar \varphi(x) \frac{d\chi(t)}{dt} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right] \varphi(x) \chi(t). \quad (2.57)$$

Si nous divisons de part et d'autre par le produit  $\varphi(x)\chi(t)$ , nous obtenons :

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt} = \frac{1}{\varphi(x)} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(x) \right] + V(x). \quad (2.58)$$

Cette équation indique que le membre gauche ne dépend que du temps  $t$ , et est égal au membre droit qui ne dépend que de la variable  $x$ . L'égalité ne peut avoir lieu que si chacun de ces deux membres est en fait une constante que nous poserons égale à  $\hbar\omega$  on obtient :

$$i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt} = \hbar\omega\chi(t); \quad (2.59)$$

Nous obtenons alors pour  $\chi(t)$  une équation différentielle qui s'intègre facilement et qui donne :

$$\chi(t) = Ae^{-i\omega t}. \quad (2.60)$$

De même,  $\varphi(x)$  doit vérifier l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = \hbar\omega\varphi(x). \quad (2.61)$$

Si nous posons  $A = 1$  dans l'équation (2.60), ce qui est toujours possible car on peut l'incorporer par exemple la constante  $A$  dans  $\varphi(x)$ , et on aura alors :

$$\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}, \quad (2.62)$$

est solution de l'équation de *Schrödinger*, à condition que  $\varphi(x)$  soit solution de (2.61). On dit qu'on a séparé les variables de temps et l'espace.

Une fonction d'onde de la forme (2.62) est appelée solution stationnaire de l'équation de *Schrödinger* : elle donne une densité de probabilité

$|\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$  indépendante du temps. Dans une fonction stationnaire apparaît une seule pulsation  $\psi$  ; d'après les relations de *Planck – Einstein*, un état stationnaire est un état d'énergie bien définie  $E = \hbar\psi$  (état propre de l'énergie). En mécanique classique, lorsque l'énergie potentielle est indépendante du temps, l'énergie totale est une constante du mouvement ; en mécanique quantique, il existe des états d'énergie bien déterminée.

L'équation (2.61) peut donc s'écrire :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \right] \varphi(x) = E\varphi(x), \quad (2.63)$$

cette équation s'appelle équation de *Schrödinger* stationnaire, ou encore :

$$\mathbf{H}\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (2.64)$$

$\mathbf{H}$  étant l'opérateur différentiel :

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \quad (2.65)$$

L'équation (2.64) est une équation aux valeurs propres de l'opérateur *hamiltonien*.

Les valeurs propres sont les énergies du système et le spectre de  $\mathbf{H}$  peut être discret si l'on décrit des états liés ou continu pour des états non liés. les fonctions propres de  $\mathbf{H}$  sont les fonctions d'onde qui décrivent les états stationnaires du système appelés encore états propres du système.

L'*hamiltonien* est un opérateur linéaire puisque la multiplication par le potentiel  $V(x)$  ainsi que les dérivations partielles sont des opérateurs linéaires.

On a donc :

$$\mathbf{H}(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2) = \lambda_1\mathbf{H}\varphi_1 + \lambda_2\mathbf{H}\varphi_2$$

Afin de distinguer entre elles les diverses valeurs possibles de l'énergie  $E$  et les fonctions propres  $\varphi(x)$  correspondantes, nous les affectons d'un indice  $n$  ; on a donc :

$$\mathbf{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x).$$

La solution générale de l'équation de *Schrödinger* est une combinaison linéaire de solutions stationnaires. Donc une fois connues les solutions stationnaires, i.e. l'ensemble des couples  $\{E_n, \varphi_n\}$  que nous supposons pouvoir être indicés par un entier  $n$ , nous pouvons écrire la solution générale de l'équation de *Schrödinger* :

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (2.66)$$

où les coefficients  $c_n$  dépendent des conditions initiales. En particulier on a

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x). \quad (2.67)$$

Récapitulons ce qui précède, si on veut résoudre l'équation de *Schrödinger* pour un potentiel indépendant du temps, i.e. l'équation (2.55), on le fait suivant une stratégie bien définie qui peut être décrite par les étapes suivantes :

1- Caractériser la base d'états propres de  $\mathbf{H}$  (les états stationnaires). On note cette base par  $\{\varphi_n\}$  et  $\{E_n\}$  l'ensemble des valeurs propres correspondantes i.e.  $\mathbf{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$ .

2- Décomposer le vecteur d'état  $\psi$  dans cette base :  $\psi = \sum_n c_n(t)\varphi_n$ . On a alors des équations différentielles du premier ordre découplées pour les composantes,  $i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t)$ , qui admettent comme solutions  $c_n(t) = c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$ .

3- Finalement

$$\psi = \sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \varphi_n. \quad (2.68)$$

4- Les coefficients  $c_n(0)$  sont déterminés d'après les conditions initiales :

$$\psi(0) = \sum_n c_n(0) \varphi_n \quad \text{i.e.} \quad c_n(0) = \langle \varphi_n | \psi(0) \rangle . \quad (2.69)$$

Pour plus de détails concernant toutes les notions utilisées dans ce chapitre on peut voir [\[\[6\]](#), [\[8\]](#), [\[10\]](#), [\[11\]](#) .

# Chapitre 3

## Applications

### 3.1 L'équation de Schrödinger pour le champ coulombien

En mécanique quantique le problème du mouvement d'un électron dans un champ de force d'attraction central est l'un des problèmes de base étudié. Car la description du mouvement des électrons de l'atome qui est importante pour le calcul des différentes propriétés des structures atomiques.

La fonction d'onde  $\psi(x)$  d'une particule mobile dans un champ à symétrie centrale  $U(r)$  est la solution de l'équation de *Schrodinger* stationnaire

$$\Delta\psi(x) + \frac{2M}{\hbar^2}(E - U(r))\psi(x) = 0 ; \quad (3.1)$$

où  $\hbar$  est la constant de planck,  $M$  est la masse de la particule et  $U(r)$  est l'énergie potentielle.

Par le changement des variables en coordonnes sphériques  $(r, \theta, \varphi)$  le lapla-

cien sera de la forme :

$$\Delta\psi = \Delta_r\psi + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\psi \quad (3.2)$$

où

$$\Delta_r\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) \text{ "partie radiale",} \quad (3.3)$$

et

$$\Delta_{\theta,\varphi}\psi = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} \text{ "partie angulaire."} \quad (3.4)$$

cherchons des solutions de l'équation (3.1) par séparation des variables en coordonnées sphériques en posant :

$$\psi(x) = F(r)\Phi(\theta, \varphi). \quad (3.5)$$

En remplaçant l'expression de  $\Delta\psi$  et  $\psi$  dans l'équation (3.1) et en multipliant par  $\frac{1}{F\Phi}$ , on obtient :

$$\frac{1}{F\Phi} \left[ \frac{\Phi}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF}{dr} \right) + \frac{1}{r^2} F \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} (E + U(r)) F \Phi \right] = 0, \quad (3.6)$$

donc

$$\frac{1}{r^2 F} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \Phi} \Delta_{\theta,\varphi} \Phi + \frac{2M}{\hbar^2} (E + U(r)) = 0, \quad (3.7)$$

i.e.

$$\frac{1}{F} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF}{dr} \right) + \frac{2Mr^2}{\hbar^2} (E + U(r)) = -\frac{1}{\Phi} \Delta_{\theta,\varphi} \Phi, \quad (3.8)$$

puisque le première membre de l'égalité précédente est indépendant de  $\theta$  et  $\varphi$  et le second membre est aussi indépendant de  $r$ , donc on peut écrire :

$$\frac{1}{F} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF}{dr} \right) + \frac{2Mr^2}{\hbar^2} (E + U(r)) = -\frac{1}{\Phi} \Delta_{\theta,\varphi} \Phi = \lambda, \quad (3.9)$$

où  $\lambda$  est une constante.

Nous obtenons alors les équations suivantes pour  $\Phi$  et  $F(r)$  :

$$-\Delta_{\theta,\varphi}\Phi = \lambda\Phi \quad , \quad (3.10)$$

et

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF}{dr} \right) + \left[ \frac{2M}{\hbar^2} (E + U(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] F = 0 \quad . \quad (3.11)$$

Il est bien connu que si  $\lambda = l(l+1)$ , avec  $l$  entier naturel, l'équation (3.10) n'admet des solutions bornées et univoque sur la sphère unité (i.e.  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ), qui sont appelées les harmoniques sphériques,  $\Phi(\theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi)$ , données par :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta), \quad 0 \leq l < \infty, \quad -l \leq m \leq l, \quad (3.12)$$

où les  $P_l^m$  sont les fonctions de *Legendre* associées d'ordre  $m$ .

Alors pour  $\lambda = l(l+1)$ , où  $l$  est un entier naturel, l'équation (3.11) devient :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF(r)}{dr} \right) + \left[ \frac{2M}{\hbar^2} (E + U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] F(r) = 0 \quad (3.13)$$

Puisque

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dF}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r F),$$

par le changement de variable  $R(r) = rF(r)$ , l'équation (3.13) devient :

$$R''(r) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0. \quad (3.14)$$

Pour les états du spectre discret, la fonction d'onde  $\psi(r)$  doit satisfaire la

condition normalisation

$$\int |\psi|^2 dr d\Omega = 1. \quad (3.15)$$

Puisque

$$\int |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1,$$

la condition de normalisation pour  $R(r)$  s'écrira :

$$\int_0^\infty R^2(r) dr = 1 \quad (3.16)$$

Nous supposons que  $F(r) = \frac{1}{r}R(r)$  est supposée bornée pour  $r \rightarrow 0$ .

Donc si  $U(r) = \frac{-ze^2}{r}$  (le champ *coulombien*), où  $z$  est le numéro atomique et  $e$  est la charge, alors l'équation (3.1) devient :

$$\Delta\psi + \frac{2M}{\hbar^2} \left( E + \frac{ze^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (3.17)$$

Puisque l'énergie potentielle  $U(r)$  est négative et tend vers zéro à l'infini, par des considérations physiques on peut déduire que les états du spectre discret n'auront lieu que pour  $E < 0$ .

Pour les coordonnées sphériques, l'équation pour  $R(r)$  est alors :

$$R''(r) + \left[ \frac{2M}{\hbar^2} \left( E + \frac{ze^2}{r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0. \quad (3.18)$$

Il est bon de passer dans l'équation (3.18) aux variables sans dimension : en utilisant le système d'unités atomique dans lequel les unités de charge, de longueur et d'énergie sont respectivement la charge de l'électron  $e$  ( $e > 0$ ) et

les quantités

$$a_0 = \hbar^2/(Me^2), \quad E_0 = e^2/a_0.$$

L'équation (3.18) devient alors :

$$R''(r) + [2(E + \frac{z}{r}) - \frac{l(l+1)}{r^2}]R(r) = 0. \quad (3.19)$$

On sait que la solution de cette équation pour  $E_{nl} = -\frac{z^2}{2(n+l+1)^2}$ ,  $n = 0, 1, \dots$ , est donnée sous la forme :

$$R_{nl}(r) = C_{nl}e^{-\frac{r}{2}}r^{l+1}L_n^{2l+1}(r) \quad (3.20)$$

où  $L_n^{2l+1}(x)$  sont les polynômes de *Laguerre* associés.

On peut vérifier facilement que les fonctions  $R_{nl}(r)$  satisfont à la condition

$$\int_0^\infty R_{nl}^2(r)dr < \infty$$

La constante  $C_{nl}$  sera déterminée par la condition de normalisation (3.16) , et on obtient :

$$\frac{n+l+1}{2z}C_{nl}^2 \int_0^\infty e^{-r}r^{2l+2}[L_n^{2l+1}(r)]^2 dr = 1 \quad (3.21)$$

L'intégrale dans (3.21) peut être évaluée en utilisant la relation de récurrence pour les polynome de *Laguerre*. Nous avons :

$$xL_n^{2l+1} = 2(n+l+1)L_n^{2l+1} - (n+1)L_{n+1}^{2l+1} - (n+2l+1)L_{n-1}^{2l+1}. \quad (3.22)$$

En vertu de l'orthogonalité des polynôme de *Laguerre*, on obtient :

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} e^{-x} x^{2l+2} [L_n^{2l+1}(x)]^2 dx &= \int_0^{\infty} e^{-x} x^{2l+1} L_n^{2l+1}(x) [2(n+l+1)L_n^{2l+1}(x) + \dots] dx \\
&= 2(n+l+1) \int_0^{\infty} e^{-x} x^{2l+1} [L_n^{2l+1}(x)]^2 dx \\
&= 2(n+l+1) d_n^2,
\end{aligned}$$

où  $d_n^2$  est le carré de la norme de  $L_n^{2l+1}(x)$ , par conséquent :

$$C_{nl}^2 = \frac{z}{(n+l+1)^2 d_n^2} = \frac{zn!}{(n+l+1)^2 (n+2l+1)!}, \quad (3.23)$$

et donc la fonction radiale est

$$R_{nl}(r) = \frac{zn}{(n+l+1)^2 (n+2l+1)!} e^{-\frac{r}{2}} r^{l+1} L_n^{2l+1}(r), \quad (3.24)$$

où  $n, l \in \mathbb{N}$ .

## 3.2 L'oscillateur Harmonique

L'équation de *Schrödinger* stationnaire est sous la forme :

$$\mathbf{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.25)$$

où  $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$ , est l'*hamiltonien* du système.

On va maintenant résoudre cette équation pour l'*oscillateur harmonique*, i.e. pour une particule mobile dans un champ d'énergie potentielle :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (3.26)$$

$m$  étant la masse de la particule,  $x$  son écart de la position d'équilibre et  $\omega$  est la pulsation.

C'est-à-dire on va chercher les valeurs propres de l'énergie  $E$  et les fonctions propres pour l'équation (3.25) dans le cas de l'*oscillateur harmonique*.

Le problème de l'*oscillateur harmonique* joue un rôle fondamental dans le développement de l'électrodynamique ; on en fait appel en étudiant des oscillations de toute nature dans les cristaux et les molécules.

L'équation de *Schrödinger* pour la fonction d'onde  $\psi(x)$  de l'*oscillateur harmonique* s'écrit comme suit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (x \in \mathbb{R}). \quad (3.27)$$

La fonction  $\psi(x)$  doit être bornée et vérifier la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

et s'annule lorsque  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Pour résoudre l'équation (3.27), on effectue le changement de variable  $x = a\xi$ , où  $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , et on pose

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \psi(a\xi) = \varphi(\xi) \\ \frac{d\psi(x)}{dx} &= \frac{d\varphi(\xi)}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{a} \frac{d\varphi(\xi)}{d\xi} \\ \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= \frac{1}{a^2} \frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2}. \end{aligned}$$

On obtient alors

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (2\lambda - \xi^2)\varphi(\xi) = 0, \quad (3.28)$$

où on a posé  $\lambda = \frac{E}{\hbar\omega}$ .

L'équation (3.28) est une équation différentielle de type hypergéométrique et on sait aussi que pour  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ ,  $n = 0, 1, \dots$ , cette équation admet comme solutions :

$$\varphi_n(\xi) = B_n e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}). \quad (3.29)$$

Qui se confondent, à un facteur près, avec les polynômes d'*Hermite*  $H_n(\xi)$ .

Alors la fonction d'onde  $\psi_n(x)$  associée à la valeur propre  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  de l'énergie  $E$  s'écrit sous la forme :

$$\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{x^2}{2a^2}} H_n(x/a). \quad (3.30)$$

La constante  $C_n$  est choisi habituellement de sorte que la fonction  $\psi_n(x)$  soit normée, c'est-à-dire telle que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

la fonction  $\psi_0(x)$  associée au niveau fondamental  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ , s'écrit par exemple :

$$\psi_0(x) = (a\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}.$$

Pour plus de détails concernant les deux problèmes étudiés ainsi que toutes les notions utilisées dans ce chapitre voir [[1], [2], [9]].

# Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté et étudié l'équation de *Schrödinger* en mécanique quantique non relativiste. On a essayé de donner les notions essentielles et les résultats de base pour la solution de cette équation, nous avons défini le cadre mathématique et donné les propriétés physiques de la solution. On a montré, que par considérations mathématiques et surtout des méthodes fonctionnelles, la solution générale de cette équation s'exprime en une combinaison linéaire de solutions stationnaires (fonction d'onde).

Enfin, par des applications bien choisies nous avons pu résoudre l'équation de *Schrödinger* pour deux types de potentiels et donner la forme finale des fonctions d'onde en termes des fonctions d'onde stationnaires. Mais en général le travail est loin d'être terminé pour d'autres types de potentiels et il n'est pas facile de résoudre l'équation de *Schrödinger* pour un potentiel quelconque.

# Bibliographie

- [1] W.W. Bell. *Special functions for scientists and engineers*, D.Van nostrand company LTD, 1967.
- [2] Elie Belorizky. *Outils mathématiques à l'usage des scientifiques et ingénieurs*, EDP sciences, 2007.
- [3] N. Boccara. *Analyse Fonctionnelle une introduction pour physiciens*, Ellipse, Paris, 1984.
- [4] H. Brezis. *Analyse Fonctionnelle*, Paris New york Barcelone Milan Mexico Sao Paulo, 1987.
- [5] F. Hirsch-G. Lacombe. *Éléments d'analyse fonctionnelle*, Dunod, Paris, 1999.
- [6] Jean Hladik - Michel Chrysos *Introduction à la Mécanique quantique*, Dunod, Paris, 2000.
- [7] L. Lusternik - V. Sobolev. *Précis d'analyse fonctionnelle*, Edition Mir, 1989.
- [8] Frédéric Mila. *Physique Quantique I et II (Notes de cours)*, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2010.

- [9] A. Nikiforov - V.Ouvarov. *Fonctions spéciales de la physique mathématique*, Office des publications universitaires, (Traducction Française Editions Mir), 1983.
- [10] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloë . *Mécanique quantique, Tome 1*, EDP Sciences, 2018.
- [11] Christophe Texier. *Mécanique quantique*, Dunod, Paris, 2011.
- [12] V. Trénoguine. *Analyse Fonctionnelle*, Éditions mir, Moscou, 1985.

## Résumé

Dans ce travail de Master 2, spécialité Mathématique Appliquée, nous avons présenté l'équation de Schrödinger en mécanique quantique, avec quelques applications dans le domaine de la physique.

D'abord, nous avons donné des définitions et des propriétés essentielles que nous utilisons dans notre travail.

Ensuite, nous avons étudié profondément l'équation de Schrödinger et nous avons donné les solutions de celle équation qui est représentée par la fonction d'onde.

Enfin, le dernier chapitre de ce mémoire concerne les applications de l'équation de Schrödinger.

## Mots-clés :

Équation de Schrödinger, mécanique quantique, fonction d'onde, opérateur Hamiltonien, opérateur énergie, état stationnaire, valeurs propres.

## Abstract

In this work of Master2, specialty Applied Mathematics, we presented the Schrödinger equation in quantum mechanics, with some applications in the field of physics.

First, we have given definitions and essential properties that we use in our work.

Then, we have studied profoundly the Schrödinger equation and we have given the solutions of that equation which is represented by the wave function.

Finally, the last chapter of this thesis concerns the applications of the Schrödinger equation.

## Keywords:

Schrödinger equation, quantum mechanics, wave function, Hamiltonian operator, energy operator, stationary state, eigenvalues.

## ملخص

في هذا العمل للماستر 2، تخصص الرياضيات التطبيقية، قدمنا معادلة شرودنجر في ميكانيكا الكم، مع بعض التطبيقات في مجال الفيزياء.

أولاً، قدمنا تعريفات وخصائص أساسية نستخدمها في عملنا.

بعد ذلك، درسنا معادلة شرودنجر بعمق وقدمنا حلول تلك المعادلة التي تمثلها الدالة الموجية.

أخيراً، يتعلق الفصل الأخير من هذه الأطروحة بتطبيقات معادلة شرودنجر.

## الكلمات المفتاحية:

معادلة شرودنجر، ميكانيكا الكم، دالة الموجة، عامل هاميلتوني، عامل الطاقة، الحالة الثابتة، القيم الذاتية.