

Mécanique Quantique

1 Introduction au monde quantique

1.1 Principes et limites de la mécanique classique

Jusqu'aux environs de 1870, deux disciplines dominaient le monde de la physique :

- La mécanique classique expliquait tous les phénomènes relatifs à la matière, dont on ne connaissait que l'aspect corpusculaire.
- L'électromagnétisme de Maxwell expliquait tous les phénomènes relatifs au rayonnement, dont on ne connaissait que l'aspect ondulatoire.

L'interaction entre matière et rayonnement s'expliquait bien par la force de Lorentz :

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

Vers la fin du 19^{ème} siècle, certains phénomènes nouveaux n'ont pas pu être expliqués dans le cadre de la physique classique, et notamment :

Le rayonnement du corps noir ; L'effet photoélectrique ; l'effet Compton et le spectre des atomes.

D'où l'apparition de deux nouvelles théories qui remettent en question la théorie classique en des points différents :

- 1905 : la relativité d'Einstein (v proche de c).
- 1900-1927 : la Mécanique Quantique (échelle atomique).

Néanmoins, la théorie classique reste une bonne approximation de ces deux théories dans le cas où la vitesse $v \ll c$,

ou bien dans le cas où l'échelle serait macroscopique.

1.2 Aspect corpusculaire du rayonnement

1.2.1 Rayonnement du corps noir

Expérience Un corps porté à haute température, par exemple un four ou une lampe à incandescence. A 600°C, il est rouge sombre. A 1200°C sa couleur devient plus claire et plus vive, à 2500°C émet une lumière blanche intense.

L'analyse spectrale de la lumière émise révèle un spectre continu où toutes les fréquences ν sont représentées.

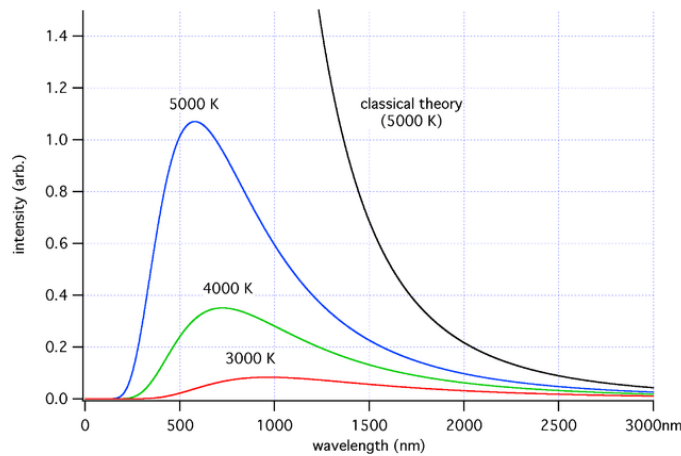
Le profil de la densité d'énergie lumineuse est représenté sur la figure 1, $u_\nu d\nu$ est la quantité d'énergie émise par unité de volume, par les fréquences situées entre ν et $\nu + d\nu$.

Interprétation classique En représentant le rayonnement comme une onde placée dans le cadre d'un aspect ondulatoire, Rayleigh et Jeans ont montré que :

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2$$

où $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ est la constante de Boltzmann et c la célérité de la lumière.

La théorie de R-J comme le montre la figure 1, n'expliquait que le début de la courbe, elle n'expliquait pas le maximum, ni la décroissance exponentielle aux fréquences élevées. De plus,



la densité totale de l'énergie émise est infinie :

$$u(T) = \int_0^\infty u_\nu d\nu \longrightarrow \infty \quad \text{catastrophe de l'UV}$$

Ce qui est contraire à la nature où tout est fini quel que soit sa grandeur

-Hypothèse de Planck (1900) Afin d'expliquer le rayonnement du corps noir, Planck émet l'hypothèse suivante :

La surface du corps noir est formée d'atomes et que chaque atome est un petit oscillateur de fréquence ν tel que l'énergie de l'atome oscillant s'exprime sous la forme : $E = nh\nu$ où n est un entier et h est la constante de Planck : $h = 6.6210^{-34} J.s$

La matière et le rayonnement de fréquence ν ne peuvent échanger que des quantités d'énergie égales à $h\nu$ ou à un de ses multiples. $h\nu$ est appelé "quantum" d'énergie. L'hypothèse de Planck associée aux méthodes de la thermodynamique statistique conduit à la formule dite de Planck :

$$u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Si ν tend vers zéro retrouver le modèle de R-J.

La densité totale d'énergie émise à une température T est :

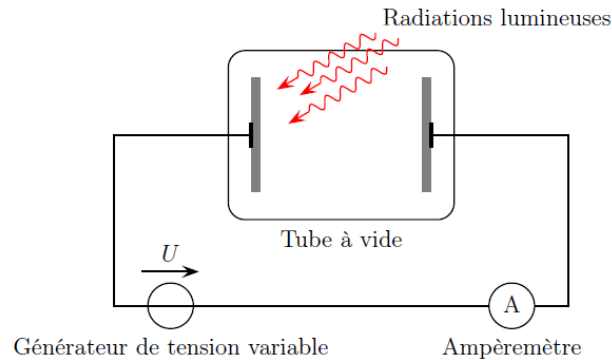
$u(T) = \int_0^\infty u_\nu d\nu = \sigma T^4$ Cette loi est connue sous le nom de : loi de Stefan , elle est bien vérifiée expérimentalement.

Si λ_m est la longueur d'onde correspondant au maximum de densité d'énergie à la température T ; on obtient : $\lambda_m T = cte$. Cette relation est connue sous le nom de : loi de Wien.

conclusion : On a pu expliquer les lois principales du rayonnement du corps noir en supposant que l'échange d'énergie entre la matière et le rayonnement s'opère, non plus continûment comme dans la théorie classique, mais sous forme discontinue.

1.2.2 -Effet photoélectrique

Expérience La cathode portée à un potentiel V_C reçoit un rayonnement excitateur de fréquence ν et de puissance P . L'anode portée à un potentiel V_A recueille les électrons émis par la cathode



L'expérience consiste à mesurer l'intensité du courant qui traverse la cellule photoélectrique en fonction des trois paramètres expérimentaux :

- La puissance P du rayonnement incident, c'est à dire la quantité d'énergie apportée par la lumière à la cathode par unité de temps.
- La fréquence ν du rayonnement incident,
- $V = V_A - V_C$: la différence de potentielle entre l'anode et la cathode

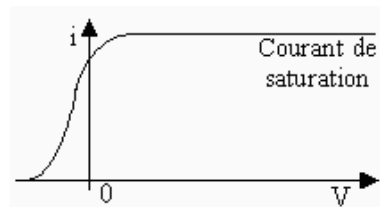


fig 1

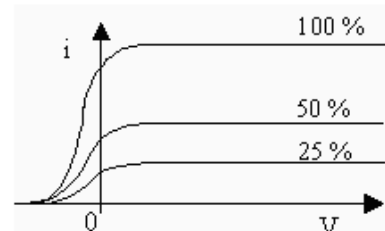


fig.2 effet de la longueur d'onde

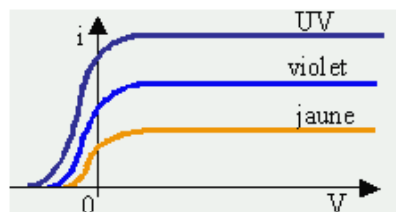


fig.3 effet de l'intensité lumineuse

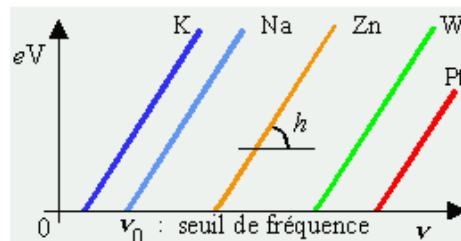


fig.4 effet de la tension accélératrice

Interprétation quantique Pour V suffisamment élevée, I atteint une valeur de saturation I_s proportionnelle à P .

Pour $V < V_0 < 0$, aucun courant ne passe. V_0 , appelée contre tension maximale ou potentiel d'arrêt, est indépendante de la puissance du rayonnement incident.

Il existe entre V_0 et le domaine de saturation, une région intermédiaire où I croît progressivement avec V .

Si la fréquence ν est inférieure à une fréquence ν_s appelée fréquence de seuil, aucun courant ne traverse la cellule photoélectrique, $\forall P$.

- Si $\nu > \nu_s$ le courant passe et la contre tension maximale varie linéairement avec la fréquence ν .

On change la nature de la cathode, en remplaçant le zinc par du sodium puis du nickel. La fréquence de seuil ν_s varie mais la pente de $|V_0|$ en fonction de ν se trouve être indépendante de la nature du métal.

On mesure le temps qui s'écoule entre le début de l'éclairement et le passage du courant. Il est inférieur à $10^{-9}s$. Le phénomène est instantané.

Interprétation de l'effet photoélectrique

Certains aspects des expériences s'interprètent aisément dans le cadre de la théorie classique de l'électromagnétisme.

Le phénomène de passage du courant :

L'onde électromagnétique transporte de l'énergie. Elle la communique aux électrons de la cathode et les en éjecte. Les électrons accélérés dans le champ électrique régnant entre la cathode et l'anode atteignent cette dernière et assurent le passage du courant

Saturation du courant et son évolution avant saturation

Le régime qui précède la saturation s'explique par ce qu'on appelle classiquement les charges d'espace.

Les électrons sont éjectés de la cathode et accélérés dans le champ électrique. Ils sont rapidement évacués si le champ électrique, et donc V est fort. Ils sont évacués peu rapidement si V est faible. Dans ce dernier cas de nombreux électrons se trouvent en permanence entre l'anode et la cathode, repoussent les nouveaux électrons émis et contribuent à une limitation du courant électrique.

Si V est assez fort, tous les électrons émis par la cathode atteignent l'anode, c'est le régime de saturation. Il ne sert plus à rien d'augmenter encore la différence de potentiel.

Il est par contre impossible d'expliquer la fréquence de seuil ν_s et la contre tension maximale V_0 par les lois classiques de l'électromagnétisme. Comment en effet comprendre qu'un rayonnement de très grande puissance P , apportant une très grande quantité d'énergie par unité de temps, mais de fréquence $\nu < \nu_s$, ne puissent pas arracher les électrons. Alors qu'un rayonnement de fréquence $\nu > \nu_s$ mais de très faible puissance peut le faire instantanément ? Comment se fait-il que l'accumulation d'énergie d'un rayonnement $\nu < \nu_s$ soit inefficace ?

Interprétation quantique :

La théorie correcte de l'effet photoélectrique a été formulée par Einstein.

Il va plus loin que Planck en supposant que non seulement les échanges d'énergie entre lumière et matière se font par « quantum » indivisible $h\nu$, mais que la lumière est formée de grains d'énergie qu'on appelle « photons » ; l'énergie du photon est $h\nu$, sa vitesse est c .

On peut alors considérer, l'effet photoélectrique comme un problème de choc photon-électron, avec annihilation du photon (il s'agit d'un choc inélastique).

En écrivant la conservation de l'énergie dans ce choc, on obtient :

$h\nu = W_s + E_c$ Où W_s est le travail de sortie du métal irradié (énergie d'extraction de l'électron).

Ainsi, l'énergie du photon se sépare en deux parties :

W_s qui est absorbée par le métal pour libérer l'électron.

L'excédent $h\nu - W_s = E_c$ qui est communiquée à l'électron sous forme d'énergie cinétique.

Essayons de vérifier quelques lois de l'effet photoélectrique en utilisant cette théorie : - Si on pose $h\nu_s = W_s$; l'électron sera émis avec une énergie cinétique ?

$E_c = h\nu - h\nu_s$ et comme $E_c \geq 0$:

$\nu < \nu_s$: $I = 0$ (pas d'effet photoélectrique)

$\nu > \nu_s : I \neq 0$ $\nu = \nu_s$: (l'énergie du photon permet juste d'extraire l'électron)

On montre en utilisant le théorème de l'énergie cinétique qu'il existe un potentiel d'arrêt V_0

($I = 0$) tel que : $V_0 = \frac{h}{e}(\nu - \nu_s)$

En conclusion :

L'effet photoélectrique montre que la lumière de fréquence ν est formée de grains, les « photons » qui ont une énergie $h\nu$.

1.2.3 Effet Compton (1923)

Expérience L'hypothèse des photons a reçu une confirmation spectaculaire avec la découverte de l'effet Compton.

Un faisceau de rayons X de longueur d'onde λ , est envoyé sur une substance (contenant un certain nombre d'électrons libres (Calcite, Aluminium)), qui le renvoie dans toutes les directions :

Interprétation théorique Interprétation classique :

La théorie ondulatoire de la lumière prévoit une diffusion identique dans toutes les directions sans variation de la longueur d'onde ; soit $\lambda = \lambda'$, ce qui est en contradiction avec l'expérience. La diffusion est assimilée à un choc élastique, il y a donc conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie totale.

sachant que : $E = \sqrt{(p^2 c^2 + m^2 c^2)}$ montrer que :

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta)$$

$\lambda_c = \frac{h}{mc} = 242.6 \text{ nm}$; λ_c est la longueur d'onde Compton.

L'ordre de grandeur de cette quantité montre que l'effet ne sera relativement visible que dans le domaine des faibles longueurs d'ondes (de l'ordre de $1 \text{ \AA}$) : c'est pourquoi l'on parle de diffusion Compton essentiellement pour les rayons X.

L'effet Compton vérifie expérimentalement que le photon possède une impulsion $p = \frac{h\nu}{c}$.

Il est remarquable que tous les résultats expérimentaux soient parfaitement interprétés par la formule ci dessus, justifiant ainsi l'existence d'un caractère corpusculaire du rayonnement.

1.3 Aspect ondulatoire de la matière

1.3.1 Hypothèse de De Broglie

Un caractère ondulatoire pouvait-être associé à des particules matérielles en plus de leur caractère corpusculaire.

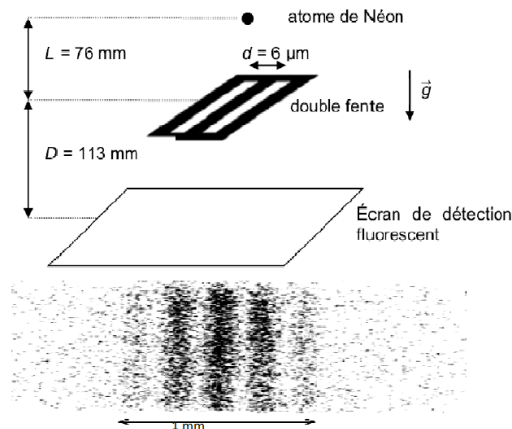
Donc à chaque particule, on associe une onde de longueur d'onde définie par :

$\lambda = \frac{h}{p}$ avec $p = m.v$ (pour une particule non relativiste).

Si λ est de l'ordre de grandeur de la taille de la particule, l'étude quantique est indispensable.

Si $\lambda \ll$ l'ordre de grandeur de la taille de la particule, l'étude quantique est indispensable.

1.3.2 Interférences par des atomes



1.3.3 Quantification de la matière (atome d'hydrogène)

Modèle classique (Rutherford 1911)

Modèle semi quantique Le moment cinétique de l'électron est quantifié .

Démontrer que : $\nu_{n-p} = R_{Rud} \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right)$

Cette relation vérifie bien l'expérience, notamment les expériences de Balmer (1885), la lumière émise par un tube rempli d'hydrogène gazeux et soumis à une décharge électrique, constitue un spectre de raies, les fréquences observées correspondantes sont bien représentées par la formule ci- dessus ($p = 2$ et $n > 2$). Le spectre d'émission des atomes est donc un spectre de raies.

1.4 Dualité onde-particule pour la lumière et la matière

le rayonnement comme la matière présente un double aspect : ondulatoire et corpusculaire (C'est la dualité onde- corpuscule).

Ces deux aspects sont liés entre eux par les relations de Planck-Einstein :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \text{ et } E = \hbar \omega$$

1.5 Principe d'incertitude de Heisenberg

Si on cherche à mesurer la position avec une grande précision (incertitude très petite), il serait impossible de définir sa vitesse avec une incertitude définie. Cette impossibilité n'est pas technique mais fondamentale et constitue le principe d'incertitude d'Heisenberg (1927).

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

On remarque que si Δx tend vers 0 alors Δp_x tend vers l'infini et réciproquement si Δp_x tend

vers 0 alors Δx tend vers l'infini.

Cette inégalité montre qu'un état quantique ne donne pas une connaissance parfaite de cet état du point de vue classique. La notion de trajectoire disparaît en mécanique quantique.

2 Equation de Schrödinger

2.1 Fonction d'onde

La description d'un système est plus compliquée : L'état dynamique d'une particule quantique, à un instant donné, est caractérisé par la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ (d'après De Broglie).

On remplace la notion de trajectoire d'une particule quantique par la notion de probabilité de présence dp de trouver la particule à un instant donné dans un élément de volume $d\tau$ entourant le point M.

$$dp(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$$

. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ est interprétée comme une **densité de probabilité de présence**.

$\Psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une **amplitude de probabilité de présence**. Elle contient toutes les informations qu'il est possible d'avoir sur une particule.

Condition de normalisation :

2.2 Équation de Schrödinger à une dimension

La fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ vérifie l'équation aux dérivées partielles appelée équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

à une dimension :

2.3 États stationnaires de l'équation de Schrödinger

C'est le cas où l'énergie potentielle de la particule est indépendante du temps :

On pose : $\Psi(x, t) = f(x).g(t)$ Déterminer l'équation de Schrödinger dans le cas stationnaire ;

3 Particule libre

3.1 Fonction d'onde d'une particule libre non localisée

3.2 Vitesse de phase et vitesse de groupe

3.3 Densité de courant de probabilité

4 États stationnaires d'une particule dans des potentiels constants par morceaux

4.1 États stationnaires d'une particule dans le cas d'une marche de potentiel

4.1.1 Cas $E > V$

4.1.2 Cas $E < V$

4.2 Barrière de potentiel et effet tunnel

4.3 États stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel infini

5 États non stationnaires d'une particule