



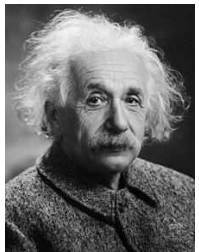






## Introduction à la Physique Quantique

		
Niels Bohr 1885-1962	Arthur Compton 1882-1962	Louis de Broglie 1892-1987
		
Paul Dirac 1902-1984	Albert Einstein 1879-1955	Werner Heisenberg 1901-1976
		
Robert Millikan 1868-1953	Max Planck 1858-1947	Erwin Schrödinger 1887-1961

## I - Introduction

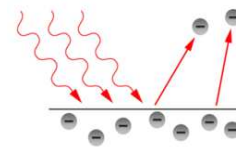
## I-1. Les grands noms

Il s'agit d'une branche "moderne" de la physique, née au début du 20ème siècle, grâce notamment aux travaux de Niels Bohr (danois), de Louis de Broglie (français), de Paul Dirac (britannique), d'Albert Einstein (allemand, suisse, autrichien, américain), de Werner Heisenberg (allemand), de Max Planck (allemand) ou encore d'Erwin Schrödinger (autrichien).

## I-2. Les grandes étapes

La physique quantique est née de l'interprétation d'expériences troublantes que les théories classiques ne parvenaient pas à expliquer, notamment dans le cadre du comportement ondulatoire de la lumière, mis à l'honneur dans les expériences d'interférences et de diffraction, étudiées au 19ème siècle.

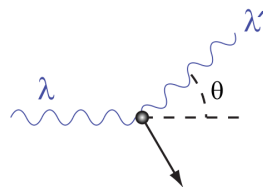
- ① Rayonnement thermique : pour expliquer le rayonnement lumineux émis par un corps chauffé, Max Planck émet l'hypothèse que l'échange énergétique entre matière et rayonnement se fait par multiple d'un **quantum d'énergie** :  $E = h\nu$ .
- ② Effet photoélectrique : un métal éclairé par un rayonnement UV peut émettre des électrons si la fréquence du rayonnement incident dépasse un certain seuil  $\nu_s$ , dont la valeur dépend du métal.



Albert Einstein propose (en 1905) que le rayonnement même est constitué de **quanta de lumière** chacun contenant l'énergie  $E = h\nu$ . Il prévoit ainsi l'existence d'un seuil d'extraction car un seul quantum de lumière peut être absorbé par un électron, l'énergie de ce quantum doit donc être à elle-seule supérieure au travail d'extraction nécessaire ( $E > W$ ).

Cette théorie prévoit non seulement l'existence d'un seuil  $\nu_s = \frac{W}{h}$  mais anticipe également l'énergie cinétique de l'électron ainsi libéré :  $E_c = E - W = h(\nu - \nu_s)$ . Ces prédictions seront confirmées par les expériences de Robert Millikan (américain) et vaudront à Einstein le prix Nobel en 1922 et à Millikan en 1923.

- ③ Diffusion Compton : Jusqu'en 1922, la diffusion était perçue comme la réémission, par la matière soumise à un rayonnement électromagnétique de longueur d'onde  $\lambda$ , de nouvelles ondes électromagnétiques de même longueur d'onde  $\lambda$ , par linéarité du PFD et des équations de Maxwell. En 1922, Arthur Compton (américain) observe la diffusion de rayons X par une cible de carbone. Il observe alors une onde diffusée, de longueur d'onde différente de la longueur d'onde incidente. La mesure confirme le calcul relativiste :  $\lambda' = \lambda + \frac{h}{m_e c}(1 - \cos \theta)$ .



On essaiera ici de donner les grands principes de cette "nouvelle" physique.

## II - Dualité Onde-Corpuscule

### II -1. Particule de lumière : le photon

#### Propriétés :

- ☆ le photon a une masse nulle.
- ☆ le photon se déplace à la vitesse de la lumière dans le vide.
- ☆ Le photon associé à une onde de fréquence  $\nu$ , ou de longueur d'onde  $\lambda = \frac{c}{\nu}$

possède l'énergie  $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ .

☆ Le photon associé à une onde de fréquence  $\nu$  se propageant dans la direction  $\vec{u}$  (unitaire) a une quantité de mouvement  $\vec{p} = \frac{E}{c}\vec{u} = \frac{h\nu}{c}\vec{u} = \frac{h}{\lambda}\vec{u}$ .

On donne les ordres de grandeur suivants :

Rayonnement	$\lambda(\text{m})$	$\nu(\text{Hz})$	$E(\text{eV})$
rayons $\gamma$	$< 2.10^{-11}$	$> 1,5.10^{19}$	$> 60000$
rayons X	$2.10^{-11}$ à $1.10^{-8}$	$3.10^{16}$ à $1,5.10^{19}$	125 à 60000
UV	$1.10^{-8}$ à $4.10^{-7}$	$7,5.10^{14}$ à $3.10^{16}$	3 à 125
visible	$4.10^{-7}$ à $7,5.10^{-7}$	$4.10^{14}$ à $7,5.10^{14}$	1,5 à 3
IR	$7,5.10^{-7}$ à $3.10^{-4}$	$1.10^{12}$ à $4.10^{14}$	$4.10^{-3}$ à 1,5
ondes hertziennes	$> 3.10^{-4}$	$< 1.10^{12}$	$< 4.10^{-3}$

Un laser He-Ne ( $\lambda = 633 \text{ nm}$ ) de puissance  $\mathcal{P} = 1,0 \text{ mW}$  émet environ  $3,2.10^{15}$  photons par seconde, ce qui fait une distance de  $d = 9,4.10^{-8} \text{ m}$  entre deux photons. On sait aujourd'hui, en diminuant la puissance, construire des lasers qui émettent des photons un à un pour réaliser des expériences à photon unique.

### II -2. Onde de matière : longueur d'onde de Broglie

En 1923, Louis de Broglie (prononcer comme "debreuil") étend la dualité onde-corpuscule, énoncée pour la lumière, en postulant l'existence d'une *onde de matière* associée à toute particule.

Une particule de quantité de mouvement  $p$  aura donc une longueur d'onde associée selon la relation de Broglie :  $\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$

On utilise l'expression classique  $p = mv$  pour les particules non relativistes ( $v \ll c$ ) ou l'expression relativiste si nécessaire.

En 1927, une équipe américaine, menée par Davisson et Germer, observe la *diffraction* d'un faisceau d'électrons par un monocristal de nickel, mettant ainsi en évidence la nature ondulatoire de la particule "électron". La diffraction des rayons X par un cristal était déjà connue mais sa mise en évidence avec des particules ouvrit la voie à de nouvelles techniques d'imagerie comme la *microscopie électronique* (des électrons suffisamment accélérés peuvent avoir une longueur

d'onde de Broglie inférieure aux longueurs d'onde optique), ou l'utilisation de la diffusion de neutrons "thermiques", pour lesquels  $\lambda_{dB} \simeq 1,5 \cdot 10^{-10}$  m, échelle atomique.

### III - Fonction d'onde

#### III -1. Critère quantique

En mécanique classique, une particule est *localisée* dans le temps et l'espace, on peut suivre sa *trajectoire*. Pour une onde, la localisation est plus problématique. Pour mesurer (ou définir) une longueur d'onde, il faut que le train d'onde ait une certaine extension spatiale. Si l'onde est trop localisée (impulsion), on aura du mal à lui associer une longueur d'onde (pas de périodicité).

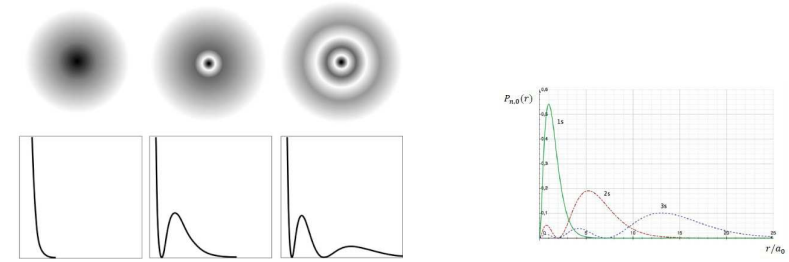
La mécanique quantique abandonne le caractère déterministe (prédictif) et se contente de donner une *probabilité de présence* de la particule. Cela est formalisé par le *principe d'indétermination d'Heisenberg* dont une des formes peut s'écrire :

$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ , où  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  est la constante de Planck réduite. On ne peut dès lors plus connaître la position et la vitesse avec une précision infinie. Les deux incertitudes sur ces mesures sont liées.

Par exemple :

- pour un skieur :  $m = 70$  kg, de vitesse  $v = 15 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  connue à  $\Delta v = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , la précision maximale sur la position est  $\Delta x \geq 1,5 \cdot 10^{-36}$  m, ce qui suffit largement à savoir si la ligne d'arrivée est franchie ou non.
- pour un électron de masse  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg, de vitesse  $v = 2,2 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , connue à  $\Delta v = 0,1 \cdot 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  près, l'incertitude de position est  $\Delta x \geq 1,2 \cdot 10^{-9}$  m, qu'il faut mettre en regard de l'orbite moyenne de l'ordre de  $a_0 = 52,9 \text{ pm}$  (atome d'hydrogène) :  $\Delta x \simeq 20a_0$ .

En conclusion, l'électron est *délocalisé* : (ici les orbitales 1s, 2s et 3s)



#### Exercice 1 : Petites applications directes du cours

#### III -2. Probabilité de présence

On associe dès lors à une particule une *fonction d'onde*  $\psi(M, t)$  à valeurs complexes, solution de l'équation de Schrödinger, qui caractérise l'*état* de la particule.

La *probabilité* de trouver la particule au point  $M$  à l'instant  $t$  est proportionnelle au carré du module de la fonction d'onde :

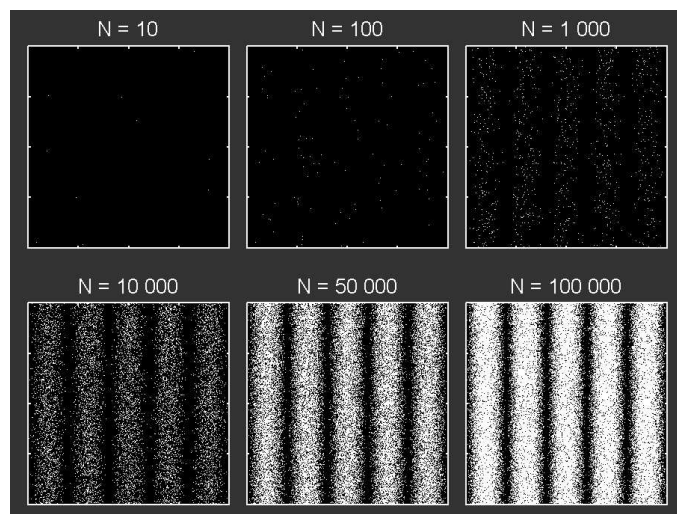
$$\mathcal{P}(M, t) = |\psi(M, t)|^2 = \psi(M, t)\psi^*(M, t)$$

Cela n'est pas sans rappeler l'éclairement lumineux obtenu pour une observation sur un écran.

#### III -3. Interférences : fentes d'Young

L'interprétation ondulatoire des interférences lumineuses est liée à la différence de marche entre deux rayons lumineux, ce qui conduit à un déphasage des ondes entre elles. Si ce déphasage vaut  $2\pi$ , alors on a des interférences constructives et un maximum d'intensité lumineuse.

L'interprétation particulaire repose sur le fait que chaque photon intercepté par l'écran se localise et donne un impact lumineux, mais sa position est aléatoire. Les impacts successifs se répartissent inégalement sur l'écran, en dessinant au fur et à mesure les franges d'interférences :



Si une particule peut être décrite par une onde, alors il doit être possible d'observer avec des particules des phénomènes typiquement ondulatoires, comme des interférences.

La probabilité de présence des particules n'est pas la simple somme des probabilités de présence due à chaque fente :

$$\begin{aligned}
 p &= (\psi_1 + \psi_2) \times (\psi_1^* + \psi_2^*) \\
 p &= \psi_1\psi_1^* + \psi_2\psi_2^* + \psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^* \\
 p &= p_1 + p_2 + (\psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^*)
 \end{aligned}$$

En 1989, un équipe japonaise a réalisé une expérience de fentes d'Young avec des électrons (relativistes).

En 1991, une autre équipe a fait de même avec des atomes d'Hélium.

En 1999, une telle expérience a été réalisée avec des molécules.

Remarquons que lorsqu'on essaie de savoir par quelle fente est passée la particule, on détruit le phénomène d'interférences. Il s'agit du principe de complémentarité, dû à Niels Bohr : "une particule quantique ne peut se comporter simultanément comme une onde et comme une particule".

 Exercice 2 : Interférences d'atomes d'Hélium

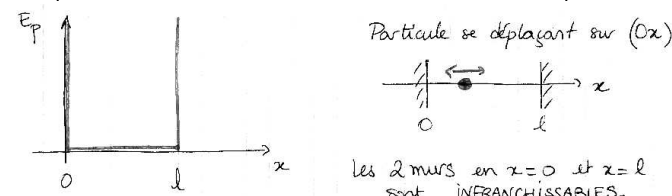
## IV - Confinement dans un puits quantique

Imposer des *conditions aux limites* dans un système siège d'une propagation d'ondes donne lieu à la formation d'*ondes stationnaires*, qui traduit une *quantification* des fréquences admissibles.

Pour une *cavité finie*, il existe des *modes propres de vibration*.

On retrouve le même phénomène lorsqu'on essaye de confiner une particule quantique (caractère ondulatoire) : seules certaines énergies sont admissibles.

On considère un modèle théorique d'énergie potentielle appelé le *puits infini à une dimension*, pour lequel l'énergie potentielle est nulle pour  $x \in [0; \ell]$  et infinie partout ailleurs (particule entre deux murs infranchissables)



### IV -1. États quantiques

À cause du confinement, l'onde associée à l'objet quantique dans le puits est une onde stationnaire. La probabilité de détecter la particule en  $x < 0$  et  $x > \ell$  est nulle, et par continuité, elle l'est également en  $x = 0$  et  $x = \ell$  : l'onde présente un *nœud de vibration* pour ces deux abscisses.

On a donc  $\ell = n \frac{\lambda_{dB}}{2}$ , avec  $n \in \mathbb{N}^*$ .

Les longueurs d'onde possibles pour la particule confinée sont donc  $\lambda_{dB} = \frac{2\ell}{n}$ ,  $n \in \mathbb{N}^*$ .

Chaque mode propre de vibration, associé à chaque longueur d'onde, correspond à un *état quantique* de la particule.

### IV -2. Niveaux d'énergie

Pour la particule à l'intérieur du puits, l'énergie mécanique est donnée par  $E = E_c + E_p$ , avec  $E_p = 0$  et  $E_c = \frac{p^2}{2m}$ , où  $p$  est la quantité de mouvement.

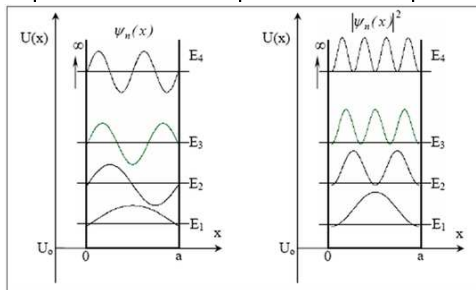
D'après la relation de Broglie,  $p = \frac{h}{\lambda_{dB}}$ , d'où

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_{dB}^2} = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{n}{2\ell} \right)^2$$

Finalement, l'énergie mécanique de la particule quantique est *quantifiée* :

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8m\ell^2}, n \in \mathbb{N}^*$$

La figure suivante représente la fonction d'onde des 4 premiers états quantiques d'un puits infini ainsi que la densité de probabilité de présence associée.



Remarquons qu'en mécanique classique, toutes les énergies mécaniques auraient été accessibles, de façon continue.

On remarque également que l'écart entre deux niveaux successifs est

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1) \frac{h^2}{8m\ell^2},$$

qui augmente avec  $n$ .

Si la largeur  $\ell$  du puits tend vers l'infini, la notion de confinement disparaît, les niveaux d'énergie se resserrent infiniment, et il n'y a plus de quantification.

En revanche, pour un puits de hauteur finie, le confinement persiste et les états quantiques sont bien différenciés mais la probabilité de présence n'est plus nulle en dehors du puits, cela permet l'*effet tunnel* (une particule quantique a une probabilité non nulle de franchir une barrière de potentiel finie). Cet effet tunnel est mis à profit en microscopie (Microscope à Effet Tunnel, inventé en 1981) pour imager des surfaces conductrices à l'échelle atomique, voire subatomique.

#### IV -3. Transition entre deux états quantiques

Une particule peut passer d'un état  $E_n$  à un état  $E_{n'}$  inférieur en émettant un photon,

qui aura pour énergie la différence  $E_n - E_{n'} = (n^2 - n'^2) \frac{h^2}{8m\ell^2} = h\nu_{nn'}$ .

Inversement, elle peut passer de  $E_{n'}$  à  $E_n$  en absorbant un photon de fréquence  $\nu_{nn'}$ .

Exercice 3 : Molécules de colorant : les cyanines

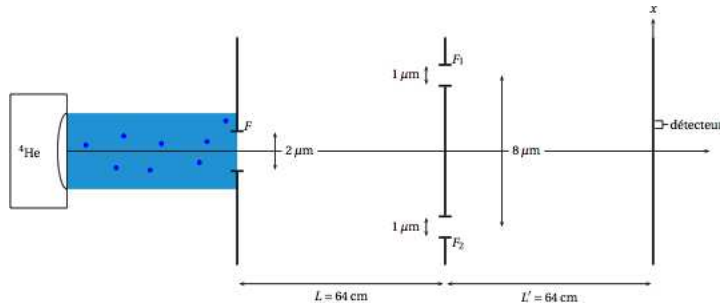
#### Exercices

##### 1 - Petites applications directes du cours

- La lumière d'un faisceau laser est émise par des atomes effectuant une transition entre deux niveaux d'énergie distants de  $2,28 \text{ eV}$ . Quelle est la couleur de ce laser ?
- Calculer la longueur d'onde de Louis de Broglie d'un homme de  $75 \text{ kg}$  marchant à la vitesse de  $5,0 \text{ km.h}^{-1}$ . Comparer à la largeur d'une porte et conclure.
  - Quelle énergie, en électronvolts, doit-on communiquer à des électrons, de masse  $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ , pour que leur longueur d'onde de Louis de Broglie soit égale à  $0,1 \text{ nm}$  ?
  - Calculer les longueurs d'onde de Louis de Broglie pour un électron et un proton, de masse  $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ , dont les énergies cinétiques valent toutes  $100 \text{ eV}$ .
- Quelle est l'indétermination quantique minimale sur la vitesse d'un adénovirus dont la masse est égale à  $2,4 \cdot 10^{-16} \text{ g}$  et dont la position est connue à  $10 \text{ nm}$  près (soit un dixième de sa taille) ?
  - Un radar autoroutier "flashe" une voiture de masse  $m = 1,3 \text{ t}$  roulant à une vitesse de  $150 \text{ km.h}^{-1}$ . L'éclair du flash dure  $0,01 \text{ s}$ . Quelle est l'indétermination sur la position de la voiture ? En déduire une minoration de l'indétermination quantique sur la vitesse. Commenter.

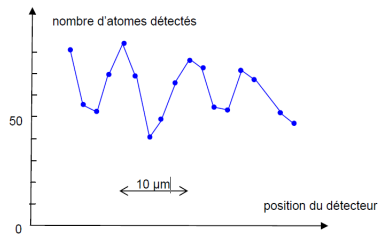
## 2 - Interférences d'atomes d'Hélium (Carnal et Mlynek, 1991)

En 1991, O. Carnal et J. Mlynek ont réalisé une véritable expérience de fentes d'Young avec des atomes d'Hélium. La très grande difficulté de cette expérience tient, entre autres, à la très faible valeur de la longueur d'onde de de Broglie, qui dans ce cas, vaut  $\lambda_{DB} = 0,103 \text{ nm}$ . Les fentes d'Young ont une largeur de  $s_2 = 1 \mu\text{m}$  et leurs centres sont séparés de  $a = 8 \mu\text{m}$ . Dans le cas d'une expérience d'interférences lumineuses, la longueur d'onde est  $10^3$  à  $10^4$  fois plus grande et l'écartement des fentes  $10^3$  fois plus grand. Les dimensions de l'expérience sont adaptées à la longueur d'onde mise en jeu.



Dans l'expérience, le faisceau incident d'atomes d'Hélium est diffracté par une première fente unique  $F$  de largeur  $s_1 = 2 \mu\text{m}$ , puis rencontre deux fentes  $F_1$  et  $F_2$  parallèles, placées à une distance  $L = 64 \text{ cm}$  de la première fente  $F$ . On détecte les atomes d'hélium dans un plan situé à une distance  $L' = 64 \text{ cm}$  derrière la fente double  $F_1 - F_2$ , avec un détecteur de largeur  $\delta = 2 \mu\text{m}$  placé dans la zone de recouvrement des faisceaux issus de  $F_1$  et  $F_2$ .

On obtient les résultats suivants :

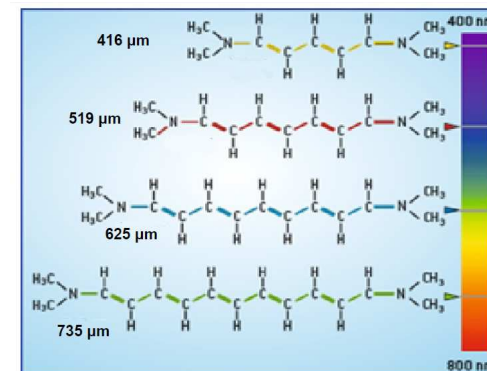


L'interfrange observée est estimée à  $i = 8,4 \mu\text{m} \pm 0,8 \mu\text{m}$ .

1. La masse d'un atome d'hélium est  $m_{He} = 6,70 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ . Quelle est la vitesse des atomes d'Hélium dans cette expérience ? Estimer le temps mis par un atome pour aller de la fente  $F$  au détecteur.
2. Calculer l'angle  $\theta$  de diffraction de l'onde de matière par la fente  $F$ . Vérifier que les fentes  $F_1$  et  $F_2$  reçoivent bien cette onde.
3. Calculer l'angle  $\theta'$  de diffraction de l'onde de matière par la fente  $F_1$  ou  $F_2$ . Calculer la largeur de la zone de recouvrement des deux ondes diffractées par les deux fentes, dans le plan de détection.
4. On détecte en moyenne 65 atomes en 10 minutes, mais une vingtaine correspond au bruit de fond (obtenu en occultant le faisceau incident). Calculer le temps entre deux détectations d'atomes. Comparer avec le temps trouvé à la question (a). Commenter.

## 3 - Molécules de colorant : les cyanines

Les cyanines sont des colorants organiques répandus. On s'intéresse ici aux streptocyanines, molécules représentées dans la figure ci dessous. Elles ont même motif central, et selon le nombre de fois où il est répété, la bande d'absorption se déplace, ce qui confère à ces différentes molécules, différentes "couleurs".



La théorie du puits quantique permet d'interpréter ces propriétés. Il y a en effet sur la molécule à  $p$  motifs,  $p + 1$  doublets d'électrons " $\pi$ " délocalisés (les

électrons des doubles-liaisons chimiques), qui sont libres de se déplacer entre 2 atomes d'azote.

1. En admettant que toutes les liaisons  $C - C$ , ainsi que les deux liaisons  $C - N$  concernées ont la même longueur  $a = 0,139 \text{ nm}$ , exprimer en fonction de  $p$  et  $a$  la longueur  $L$  sur laquelle les électrons sont susceptibles de se déplacer.
2. On suppose que ces électrons sont dans un puits quantique infini de largeur  $L$ . Exprimer les énergies  $E_n$  possibles pour un électron de masse  $m_e$  dans ce puits.
3. Les électrons remplissent les niveaux d'énergie en respectant notamment deux règles (pas plus de 2 électrons par niveau d'énergie et on remplit d'abord les niveaux les plus bas). Montrer que le plus haut niveau d'énergie peuplé est  $E_{p+1}$ .
4. Lorsque la molécule absorbe un photon, un électron passe du niveau d'énergie où il se trouve à un niveau d'énergie supérieur non occupé. La différence entre ces niveaux d'énergie est égale à l'énergie du photon absorbé. Montrer que dans la modélisation proposée ici, la plus grande longueur d'onde que la molécule absorbe est de la forme  $\lambda = \frac{8ma^2c}{h} \cdot \frac{(2p+2)^2}{2p+3}$ .
5. Expérimentalement, on mesure les longueurs d'onde d'absorption suivantes :

p	2	3	4	5
$\lambda \text{ (nm)}$	416	519	625	735

Commenter.

6. Quelle est la couleur de la molécule pour  $p = 2$  ?

### Éléments de réponse

1. 1. vert
2. (a) l'homme n'est pas diffracté ; (b)  $E_c = 150 \text{ eV}$  ; (c)  $\lambda_{DB,p} = 2,89 \text{ pm}$

$$3. \text{ (a) } \Delta v_x = 2,2 \cdot 10^{-8} \text{ m.s}^{-1} ; \text{ (b) } \Delta v_x = 1 \cdot 10^{-37} \text{ m.s}^{-1}$$

$$2. \text{ (1) } \Delta t = 1,3 \cdot 10^{-3} \text{ s} ; \text{ (2) } \theta = 5 \cdot 10^{-5} \text{ rad} ; \text{ (3) } \theta' = 1 \cdot 10^{-4} \text{ rad}$$

$$\text{ (4) } \tau = 0,2 \text{ s}$$

$$3. \text{ 1. } L = 2(p+1)a$$

$$2. E_n = n^2 \frac{h^2}{8m_e L^2}$$

$$4. \lambda_{max} \text{ correspond à } \Delta E_{min} = E_{p+2} - E_{p+1}$$

5. on trouve la bonne évolution, mais pas les bonnes valeurs

6. la molécule absorbe le violet, elle est jaune.