

Introduction à la physique quantique

« Those who are not shocked when they first come across quantum theory cannot possibly have understood it. »

Niels BOHR, 1952, Copenhague

Sommaire

I Un peu d'histoire	3
II Comportements ondulatoires	4
II/A Diffraction	4
II/B Interférences	5
III Dualité onde-corpuscule	5
III/A Définitions	5
III/B Nature corpusculaire de la lumière	5
III/C La matière : onde et corpuscule.	7
IV Formalisme quantique	9
IV/A Retour sur l'expérience	9
IV/B Notion de fonction d'onde	9
IV/C Inégalité d'HEISENBERG	10
V Modèle semi-classique BOHR	11
V/A Principe	11
V/B Mise en équation	12

Capacités exigibles

- | | |
|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/> Décrire un exemple d'expérience mettant en évidence la nécessité de la notion de photon. <input type="checkbox"/> Décrire un exemple d'expérience mettant en évidence le comportement ondulatoire de la matière. <input type="checkbox"/> Évaluer des ordres de grandeurs typiques intervenant dans des phénomènes quantiques. | <ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/> Interpréter une expérience d'interférences (matière ou lumière) « particule par particule » en termes probabilistes. <input type="checkbox"/> Inégalité de HEISENBERG spatiale : établir par analogie avec la diffraction des ondes lumineuses, l'inégalité en ordre de grandeur : $\Delta p \Delta x \geq \hbar$. <input type="checkbox"/> Modèle de BOHR : exploiter l'hypothèse de quantification du moment cinétique orbital pour obtenir l'expression des niveaux d'énergie électronique de l'atome d'hydrogène. |
|---|---|

✓ L'essentiel

📖 Définitions

- ☐ Diffraction 4
- ☐ Interférence 5
- ☐ Onde et corpuscule 5
- ☐ Photons 6
- ☐ Longueur d'onde de DE BROGLIE 8
- ☐ Fonction d'onde 10

⚙️ Propriétés

- ☐ Transitions atomiques 6
- ☐ Probabilité de présence 9
- ☐ Indétermina^o quantique intrinsèque 11
- ☐ Inégalité de HEISENBERG spatiale 11

» Implications

- ☐ Conséquence de la fonction d'onde 10

🔗 Exemples

- ☐ Fonction d'onde et effondrement . 10

♥ Points importants

- ☐ Fentes d'YOUNG et probabilité . . 9
- ☐ Modèle de BOHR 12

⚠ Erreurs communes

- ☐ Écart-type vs. incertitude 11
-

I Un peu d'histoire

Dans notre vie quotidienne, nous interagissons avec des systèmes à une échelle macroscopique, qu'on modélise assez correctement en physique par un assemblage de systèmes à l'échelle mésoscopique. L'idée de trouver une brique élémentaire à ce qui compose notre monde, qui nous donnerait des clés pour le comprendre en le prédire en totalité, est naturellement une idée ancienne. Le concept premier d'« atome », du grec *atomos*, « insécable », pensé par DÉMOCRITE et ÉPICURE, traduisait cette brique fondamentale hypothétique. Cependant, l'accès expérimental à cette potentielle réalité physique est resté difficile pendant de nombreux siècles.

En attendant, la majeure partie du monde physico-chimique tel qu'on le concevait a été étudié et décrit : la mécanique des solides et la mécanique des fluides, la thermodynamique et la thermochimie, les ondes sonores et l'optique géométrique... mais les questions sur la nature profonde de certains phénomènes restent ouvertes, et de vifs débats enflamment les plus grands esprits.

Au début du XX^e siècle, la lumière échappe à cette compréhension profonde. Les outils existant sont ceux de la mécanique de NEWTON (fin du XVII^e siècle) et l'électromagnétisme de MAXWELL (milieu et fin du XIX^e siècle) : c'est la physique **classique**, description du monde alors très robuste et complètement déterministe, donnant une raison infiniment claire à toute observation du monde réel. Cependant, quelques expériences les mettent en défaut :

- ◇ **L'effet photoélectrique** : exposer une plaque métallique exposée à de la lumière permet d'en arracher des électrons. Cependant, et ce **peu importe l'intensité du faisceau**, aucun électron n'est arraché si la lumière en question est au-dessus d'une certaine longueur d'onde (couleur) : l'éjection **n'apparaît qu'en-dessous d'une longueur d'onde seuil λ_0** , ce que la physique classique n'explique alors pas encore.

Une proposition de résolution proposée par EINSTEIN est le modèle du photon (voir plus loin), **quantifiant l'énergie** en « grains », avec \mathcal{E} **proportionnelle à leur fréquence**, et en supposant qu'un électron ne peut absorber *qu'un photon à la fois*. Ainsi, augmenter l'intensité du faisceau ne fait qu'augmenter le nombre, mais pas l'énergie individuelle.

FIGURE 1.1 – Éjection des électrons d'un métal sous l'effet d'un faisceau lumineux.

- ◇ **Raies atomiques** : en excitant un gaz d'un élément unique (comme l'hydrogène ou le néon) avec une tension électrique, le milieu dégage de la lumière. En la décomposant par un prisme, on obtient alors des raies très définies, à l'opposé des spectres continus qu'on observe généralement comme celui du soleil par exemple. Cette précision de longueur d'onde émise échappe à la physique classique.

Spectre d'émission de H :

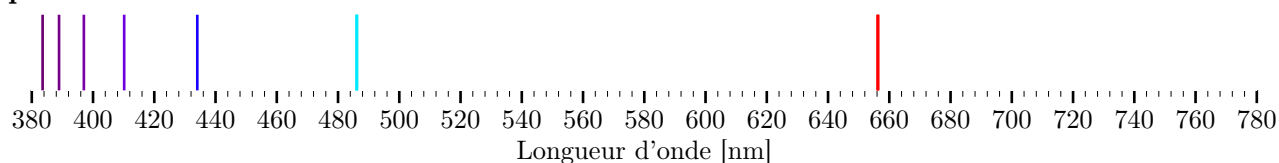


FIGURE 1.2 – Spectre *discret* d'émission des raies de l'hydrogène.

La résolution de ces incompréhensions va mener à la naissance de la mécanique **quantique**, issu du latin *quanta*, qui permet une description des phénomènes physiques non pas comme un ensemble de phénomènes continus, mais comme un ensemble de phénomènes **quantifiés**, notamment *via* des états d'énergie discrets et définis. Par exemple, c'est comme si on pouvait aller à 50 **ou** 70 km·h⁻¹ en voiture, mais pas à une valeur intermédiaire.

Cette nouvelle approche du monde va bouleverser la façon de comprendre certains phénomènes, et est à l'origine d'innombrables applications : le laser, l'énergie nucléaire, l'IRM, les semi-conducteurs et donc de toute l'électronique, mais aussi toute la matière plus généralement et donc les interactions chimiques.

II Comportements ondulatoires

II/A Diffraction

Une goutte d'eau seule ne fait pas une marée : c'est la collection d'objets tangibles qui se meuvent de manière cohérente qui crée les vagues. On étudie alors la vague comme un ensemble mais dont on comprend l'origine individuelle. Une onde présente des propriétés particulières, dont une dont on a déjà parlé au début de l'année : la **diffraction**.

♥ Définition 1.1 : Diffraction

Lorsqu'une onde progressive rencontre un obstacle dont les dimensions sont de l'ordre de la longueur d'onde, la partie de l'onde qui la passe subit un **étalement circulaire**, qu'on appelle **diffraction**.

Une onde plane de longueur d'onde λ arrivant sur une fente de taille $a \lesssim \lambda$ est diffractée *majoritairement* dans un cône, de demi-angle d'ouverture

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{a}$$

soit, pour des petits angles **en radians**,

$$\theta \underset{\theta \ll 1}{\sim} \frac{\lambda}{a}$$

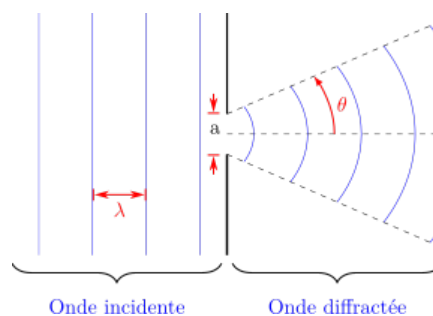


FIGURE 1.3 – Diffraction par une fente. Les traits bleus représentent les maxima de l'onde.

Ce comportement décrit très bien les ondes de matière comme les ondes sonores ou les vagues arrivant dans un port, mais correspond également à ce que subit la lumière en passant dans une fente :

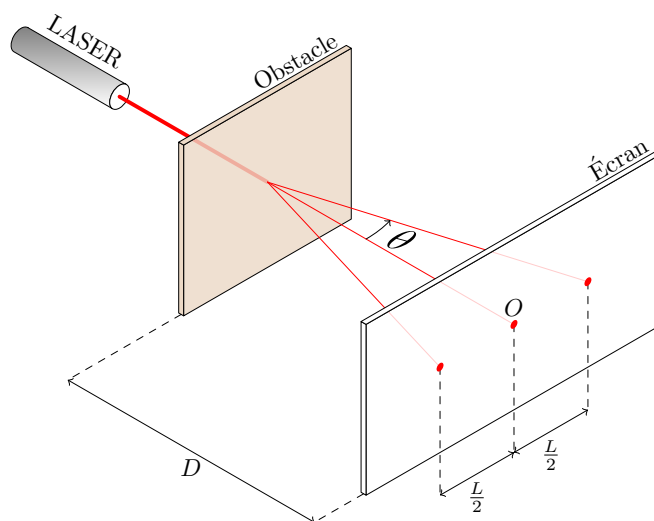


FIGURE 1.4 – Diffraction d'un faisceau laser par une fente fine.

II/B Interférences

Une autre particularité des ondes est le phénomène d'interférences :

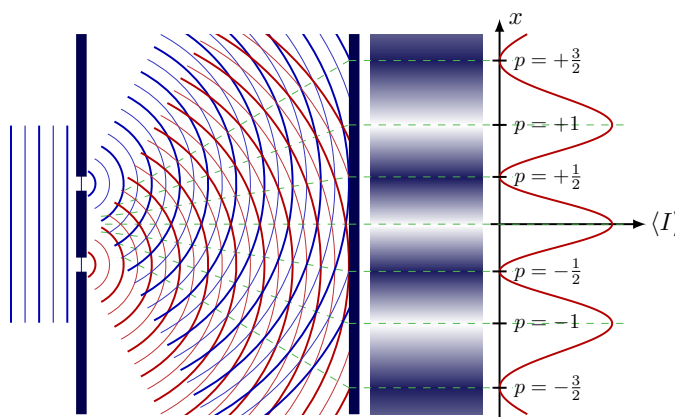
♥ Définition 1.2 : Interférence

Deux ondes de même nature se rencontrant en un point M se superposent en **sommant leurs signaux**.

Nous avons également décrit ce phénomène plus tôt dans l'année, par l'expérience des **fentes d'YOUNG**.

La zone de l'espace où les faisceaux se superposent est appelé **champ d'interférences**. Sur un écran, on observe alors la figure ci-contre, avec des variations d'intensité lumineuse :

- ◇ au milieu des zones claires (**maximum** local d'intensité) on a des **interférences constructives** ;
- ◇ au milieu des zones sombres (**minimum** local d'intensité) on a des **interférences destructives**.



Conclusion

Ainsi, il est clair que la lumière a un comportement ondulatoire. On peut donc songer que ce comportement est issu d'une collection d'objets individuels qui la composerait, des « corpuscules » de lumière : les photons.

III Dualité onde-corpuscule

III/A Définitions

En physique classique (au XIX^e), le mouvement d'un corpuscule et d'une onde sont très différents :

♥ Définition 1.3 : Onde et corpuscule

- ◇ Un **corpuscule** est **localisé**, est soumis à des forces, et obéit aux lois de NEWTON ;
- ◇ Une **onde** n'est **pas localisée** mais est **étendue** dans l'espace, peut être diffractée et interférer.

III/B Nature corpusculaire de la lumière

En 1900, Max PLANCK, pour expliquer le spectre des corps chauffés, puis EINSTEIN, en 1905, pour expliquer l'effet photoélectrique, font émerger l'hypothèse que la lumière est composée de petits grains de lumière : les photons. Le plus petit paquet d'énergie échangé avec une radiation de fréquence ν vaut $\Delta E = h\nu$ où h est la constante de PLANCK.

III/B) 1 Photons

♥ Définition 1.4 : Photons

La lumière correspond au déplacement de particules appelées **photons** qui :

- ◇ sont **sans masse** : $m_{\text{photon}} = 0$;
- ◇ se déplacent à la célérité de la lumière (c dans le vide, c/n sinon) ;
- ◇ transportent **chacun** une énergie :
- ◇ ont comme quantité de mouvement

Application 1.1 : Énergie d'un photon

Calculer l'énergie transportée par un photon « bleu », puis un photon « rouge ».

- ◇
- ◇

♥ Définition 1.5 : Électron-volt

Plutôt que de parler en Joules, les unités étant petites, on exprime les énergies en **électron-volt**, correspondant à l'énergie cinétique gagnée par une particule de charge élémentaire lorsqu'elle est accélérée par une tension de 1 V. On a alors

Pour l'application précédente, on trouve $\mathcal{E}_{\text{bleu}} = 3,10 \text{ eV}$ et $\mathcal{E}_{\text{rouge}} = 1,91 \text{ eV}$.

III/B) 2 Transitions atomiques

Introduction Pour expliquer l'effet photoélectrique, il faut encore justifier l'absorption quantifiée. Pour cela, on établit (et ici on admet) le modèle suivant :

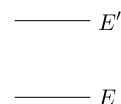
♥ Propriété 1.1 : Transitions atomiques

L'énergie des électrons autour d'un atome ne peut prendre que certaines valeurs précises et est **quantifiée** en niveaux, entre le **fondamental** quand il est au repos et les niveaux **excités** sinon.



Échanges d'énergie Il existe alors plusieurs modes d'échange d'énergie entre lumière et matière.

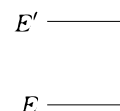
- ◇ **Absorption** : un photon d'énergie $h\nu$ arrive sur un atome dont un électron est sur le niveau d'énergie \mathcal{E} . Le photon peut alors être absorbé **seulement** s'il existe un autre niveau d'énergie \mathcal{E}' tel que



auquel l'électron se retrouve alors.

Ainsi, **seules certaines longueurs d'ondes** peuvent être absorbées, dépendant des composition atomiques.

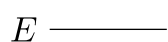
- ◇ **Émission spontanée** : à l'inverse, un électron dans un état excité \mathcal{E}' peut se **désexciter en émettant un photon**, en arrivant à l'état d'énergie \mathcal{E} . Le photon émis vérifie alors



Ici aussi, il n'y a que **certaines longueurs d'ondes** pouvant être émises.

- ◇ **Émission stimulée** : dans certains cas, un électron à un niveau excité \mathcal{E}' peut **recevoir un photon et en émettre deux identiques**, en descendant l'électron à un niveau \mathcal{E} .

C'est l'origine du LASER ¹.



III/C La matière : onde et corpuscule.

III/C) 1 Présentation

Nous venons de voir que la lumière présentait un comportement à la fois ondulatoire et à la fois corpusculaire. Cette dualité onde-corpuscule peut aussi être étendue à la matière. Il est en effet possible d'observer avec des électrons ou des petites molécules des franges d'interférences.

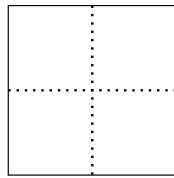
Exemple 1.1 : Vidéo

Une vidéo explicative de qualité est disponible à partir du site <https://toutestquantique.fr/dualite/>. Dans cette vidéo, les particules sont projetées sur une surface composée de deux fentes et on observe une figure d'interférences sur l'écran derrière. Si on bouche un des trous, la figure est radicalement différente, et signe de l'absence d'interférences.

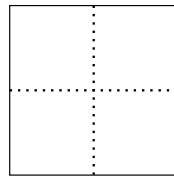
On observe alors que ces interférences n'émergent que si les particules « passent par les deux trous » : ainsi, **la particule sur comporte comme une onde**.

En effet, si on a affaire à une particule matérielle, en laissant les deux fentes ouvertes on devrait observer les deux séries d'impacts. Or, l'expérience montre l'émergence d'impacts correspondants aux interférences :

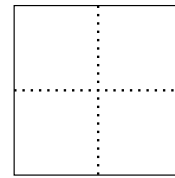
1. *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, ou « amplification de la lumière par émission stimulée de radiation » en français



1 ouverte / 2 fermée



1 et 2 ouvertes



1 fermée / 2 ouverte

« Pire » encore, l'**observation perturbe la mesure** et semble « annuler » les effets quantiques.

III/C) 2 Rappels de mécanique classique

Avant d'entamer la suite, un rapide rappel de mécanique classique s'impose. Dans toutes les théories établies jusque-là², le mouvement d'une particule matérielle ($m \neq 0$ donc électrons, protons, balle de tennis...) est décrit en particulier par :

- 1) Sa quantité de mouvement $\vec{p} = m\vec{v}$;
- 2) son énergie cinétique $\mathcal{E}_c = \frac{1}{2}mv^2$.

III/C) 3 Longueur d'onde de DE BROGLIE

Ainsi, pour quantifier les effets ondulatoires d'une particule de masse m et de vitesse v , on lui associe une longueur d'onde :

♥ Définition 1.6 : Longueur d'onde de DE BROGLIE

Une onde de matière associée à une particule matérielle :

- ◇ se propage à la vitesse v de déplacement de la « particule » ;
- ◇ a pour longueur d'onde la longueur d'onde de DE BROGLIE :

On a alors diffraction de matière possible si la fente est de largeur $a \lesssim \lambda_{\text{DB}}$.

Application 1.2 : Longueur d'onde de matière

- 1) Vérifier l'homogénéité de la formule précédente.
- 2) Calculer la longueur d'onde de DE BROGLIE d'une balle de tennis d'une part, puis d'un électron allant à la vitesse $c/10$ d'autre part. Les effets quantiques peuvent-ils se manifester à ces échelles ?

2. **Attention**, en mécanique **non-relativiste** uniquement : $v < \frac{1}{10}c$.

Il n'y a donc pas d'effet quantique à l'échelle de la balle.

Pour un électron de masse $m \approx 10^{-30}$ kg à cette vitesse, on trouve

$$\lambda_{\text{DB},e} = 20 \text{ pm}$$

Ce qui est tout à fait dans l'ordre de grandeur de la taille d'un atome.

IV Formalisme quantique

IV/A Retour sur l'expérience

Dans l'expérience des fentes d'YOUNG, on peut se poser la question suivante : « détecte-t-on la particule en un point M ? ». On introduit pour cela la **probabilité de présence** :

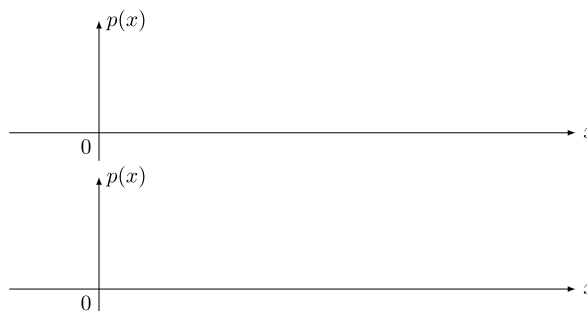
♥ Propriété 1.2 : Probabilité de présence

La probabilité de présence est une quantité mathématique, d'intégrale égale à 1 sur son domaine de définition, telle qu'entre x et $x + dx$ elle s'écrive

avec $p(x)$ la *densité de probabilité de présence* (ou « probabilité ponctuelle »)

Si une fente est fermée Si l'une des fentes est fermée, on observe une densité de probabilité de présence d'une forme pour le passage d'un obstacle :

Si les deux fentes sont ouvertes Il se passe alors quelque chose de phénoménal pour une particule de matière : la densité de probabilité de présence a l'allure suivante :



♥ Important 1.1 : Fentes d'YOUNG et probabilité

Lors du passage d'une particule par deux fentes de faible largeur, **les densités de probabilités de présence ne se somment pas** :

La densité totale semble donc émerger d'une grandeur plus fondamentale.

IV/B Notion de fonction d'onde

La grandeur qui s'additionne lorsque l'on superpose les situations 1 et 2 n'est pas la densité de probabilité, mais la **fonction d'onde**³ :

3. On retrouve la même notion avec les ondes « classiques » : ce ne sont pas les amplitudes qui se somment, mais les signaux.

♥ Définition 1.7 : Fonction d'onde

On associe à une particule quantique une **fonction d'onde**, notée $\psi(M,t)$ de **valeurs complexes** ($\psi \in \mathbb{C}$) ; on a alors

la probabilité de *détecter* la particule au point M et à l'instant t .

♥ Exemple 1.2 : Fonction d'onde et effondrement

$|\Psi(x, t_0)|^2$




FIGURE 1.5 – Avant mesure.

$|\Psi(x, t_0)|^2$




FIGURE 1.6 – Après mesure.

Application 1.3 : Fonction d'onde pour les trous d'YOUNG

Cette définition permet d'interpréter les trous d'YOUNG. Soit $\psi(M,t)$ la fonction d'onde résultant de la situation de superposition des deux fentes seules :

$$\begin{aligned}\psi(M,t) &= \psi_1(M,t) + \psi_2(M,t) \\ \Rightarrow p(M) &= \\ \Leftrightarrow p(M) &= \\ \Leftrightarrow p(M) &= \end{aligned}$$

♥ Implication 1.1 : Conséquence de la fonction d'onde

Depuis l'introduction de cette notion, les débats sur l'interprétation de cet « effondrement » (ou plutôt « réduction du paquet d'onde ») font rage entre les physicien-nes « empiristes » ^a (cf. interprétation de COPENHAGUE) et « rationalistes » (cf. interprétation des « Mondes Multiples »). Pour une approche vulgarisée, voir la vidéo de [Science Étonnante – Le plus gros problème de la mécanique quantique](#).

Quoiqu'il en soit, même loin de cette spécificité-là, la description de la matière par fonction d'onde rend **obsolète l'idée-même de trajectoire**, puisqu'il devient impossible de connaître précisément la position d'une particule quantique.

IV/C Inégalité d'HEISENBERG

Une autre implication majeure et intrinsèque de cette définition réside dans une autre propriété de la mesure quantique :

^a. BOHR, HEISENBERG, BORN, DIRAC...

♥ Propriété 1.3 : Indétermination quantique intrinsèque

La mesure d'une grandeur X sur un système quantique donne *a priori* un résultat aléatoire, pris dans la distribution de la densité de probabilité $p(x)$, caractérisée par son écart quadratique ΔX :



♥ Attention 1.1 : Écart-type vs. incertitude

Il est facile de plonger dans l'interprétation de cet écart comme une limite des instruments, mais ça serait passer à côté de toute la physique quantique. Tout aussi précis soit-il, un instrument mesurant de l'aléatoire plein de fois aura des valeurs aléatoires !

En mécanique quantique, la nécessité de prendre en compte le caractère ondulatoire implique une indétermination sur la position et la quantité de mouvement de la particule (une onde ne peut pas être parfaitement localisée), et ce indépendamment de toute problématique de précision des mesures.

♥ Propriété 1.4 : Inégalité de HEISENBERG spatiale

Soit une particule quantique repérée par sa position x et par sa quantité de mouvement $p_x = mv_x$. Leurs écarts-types respectifs ne sont **pas indépendants**, et vérifient l'**inégalité de HEISENBERG** (dite spatiale) :

La relation est presque vérifiée pour un système quantique.

Remarque 1.1 : Vidéo

Pour un point de vue plus général sur cette inégalité et aller en profondeur sur son origine et les inégalités de HEISENBERG, je vous conseille infiniment vivement la vidéo de [3Blue1Brown – The more general uncertainty principle, regarding Fourier transforms](#)

V | Modèle semi-classique BOHR

V/A Principe

On considère le mouvement d'un électron en orbite, au sens classique du terme, autour d'un atome, mais on suppose que **son moment cinétique est quantifié** :

$$\mathcal{L}_z = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}$$

Hypothèses

- ◇ On néglige le mouvement du proton par rapport à celui de l'électron ($\|\vec{a}_e\|/\|\vec{a}_p\| = m_p/m_e \approx 1800$) ;
- ◇ On néglige la force gravitationnelle devant la force électrostatique ($\|\vec{F}_g\|/\|\vec{F}_e\| = (4\pi\epsilon_0 G m_e m_p)/(e^2) \approx 10^{-40}$) ;
- ◇ on suppose le mouvement circulaire.

V/B Mise en équation

On étudie le mouvement de l'électron, assimilé à un point matériel M dans le référentiel du proton, supposé galiléen. On utilise une base polaire $(\vec{u}_r, \vec{u}_\theta)$ autour du proton.

Le mouvement étant circulaire, on a :

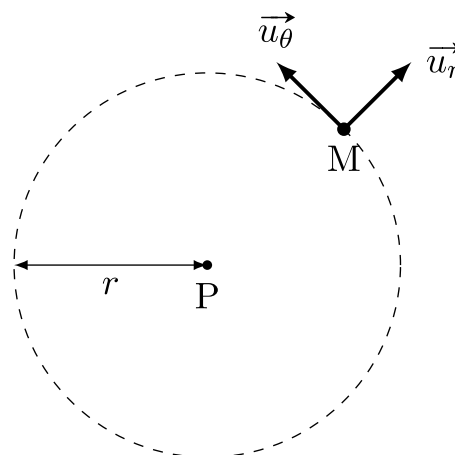
$$\vec{v} =$$

$$\vec{a} =$$

La force subie par l'électron de la part du proton est :

$$\vec{F}_e =$$

D'après le PFD projeté sur la base polaire :



On détermine les orbites accessibles en utilisant l'hypothèse de quantification, $\mathcal{L}_z = n\hbar$. Avec les données, on a

L'énergie correspondante est alors

$$\mathcal{E}_m = \mathcal{E}_c + \mathcal{E}_p$$

$$=$$

$$=$$

$$=$$

$$\Leftrightarrow \mathcal{E}_{m,n} =$$

$$\text{A.N. : } E_{m,n} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

$E \text{ (eV)}$

$$\dot{\theta}^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r^3}$$

On simplifie

Pour $n \in \mathbb{N}$

♥ Important 1.2 : Modèle de BOHR

Même si cette approche a des défauts, elle a le mérite de **redonner le spectre d'absorption de l'hydrogène** entre deux couches m et n , décrites par le physicien Johannes RYDBERG :

Ainsi, une seule quantification permet rapidement de franchir un gap énorme de compréhension sur la structure du monde physico-chimique.