Première partie Base de la Physique Quantique

Chapitre 1

Principe d'incertitude d'Heisenberg

1.1 La relation d'Incertitude

Pour commencer ce cours, il est important de souligner le fait qu'en Mécanique Quantique (MQ), l'on ne peut plus considérer le résultat d'une mesure comme en mécanique classique. Une manière de représenter cela est d'introduire le principe d'incertitude de Heisenberg. Concrètement, ce principe nous dit que : empiriquement, il est impossible de déterminer simultanément par une mesure la position x et l'impulsion p d'une particule au delà d'une certaine précision limitée par :

$$\Delta x \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{1.1}$$

οù

- Δx et Δp sont les **écart-types** de la mesure des grandeurs liées, x et p
- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ avec $h = 6,626 \times 10^{-34}$ J.s où h est la constante de Planck.

Cette inéquation représente ce qu'on appelle la relation d'incertitude ou encore la relation d'Heisenberg. Nous avons donc que pour tout état quantique, x et p sont incertains : leurs incertitude obéissent à la relation 1.1.

Remarque : les états quantiques

Qu'entend-on par **état quantique**? De manière plus générale, on peut définir un état, en physique, par l'ensemble des aspects qui caractérisent un système, de sorte à ce que l'on puisse prévoir les résultats d'une expérience, d'une mesure sur ce système.

En mécanique quantique, la notion d'état reste présente : on parle alors d'état quantique. Cependant, cette notion s'élargit dans un monde **probabiliste**. On va donc attribuer à tout état quantique d'un corpuscule une fonction d'onde $\psi(\vec{r},t)$, de sorte que son module au carré sera interprété comme une densité de probabilité de présence à un endroit \vec{r} à un instant t. Nous reviendrons sur les détails plus tard.

Notons également la différence entre un état dans la physique classique et dans la physique quantique. L'état dans la physique classique permet de déterminer un résultat d'une mesure de manière absolue, tandis que celui dans la physique quantique permet seulement de prévoir des probabilités aux résultats d'une mesure.

1.1.1 Origine de l'incertitude sur x et sur p

L'incertitude sur l'impulsion et sur la position peut trouver ses intuitions physiques des raisonnements suivants :

- 1. Cela est lié au caractère **probabiliste** de la Mécanique Quantique : chaque résultat d'une mesure est aléatoire. Cela fera l'objet de la discussion d'un postulat très important en MQ.
- 2. Cela est également lié à la longueur d'onde de Broglie. En effet, la relation qui fait intervenir cette longueur d'onde est un résultat en conséquence du fait que l'on associe une longueur d'onde à un une particule; c'est ce qu'on appelle la dualité onde-corpuscule.

On note cette relation par:

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{1.2}$$

On peut donc facilement voir que la longueur d'onde correspondant à une particule de masse m et de vitesse v est d'autant plus grande que m et v sont petits. Ainsi, on peut considérer l'existence d'une limite pour la masse et pour la vitesse à partir de laquelle la longueur d'onde associée devient négligeable, c'est-à-dire une limite à partir de laquelle nous nous retrouvons en physique classique. Autrement dit, les propriétés ondulatoires de la matière est impossible à mettre en évidence dans le domaine macroscopique.

Remarque : relations de De Broglie

- $E = h\nu$ (Energie d'un photon)
- $\lambda = \frac{h}{p}$ (Longueur d'onde de Broglie)

Ces deux relations restent valables dans le cas relativiste.

Rappelons rapidement l'expression de l'énergie d'une particule, de masse au repos m_0 , d'impulsion p, dans le cas relativiste : $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

1.2 Applications du Principe d'Incertitude

Nous allons voir ici quelques différentes applications du principe que nous venons de voir.

Notons également que ce qui importe ici sera de déterminer des ordres de grandeurs plutôt que des valeurs précises. Nous pouvons dès lors ne pas prêter attention au facteur $\frac{1}{2}$ qui apparaît dans la relation d'Heisenberg 1.1.

1.2.1 Application à l'atome d'Hydrogène

Le but ici est de comprendre la stabilité des atomes et de retrouver l'ordre de grandeur de l'énergie de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental.

En effet, l'énergie mécanique totale d'un atome d'hydrogène peut s'écrire comme la somme de son énergie

cinétique (mouvement de l'électron) et de son énergie potentiel (coulombien) :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$= \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Longrightarrow E = \frac{p^2}{2m} - \frac{\mathcal{E}^2}{r}$$
(1.3)

où $\mathcal{E}^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

Or, on peut considérer que l'électron de l'atome est confiné dans une zone de rayon r du à l'attraction coulombienne. Dès lors, en utilisant la relation d'Heisenberg 1.1, nous avons que $\Delta p \approx \frac{\hbar}{r}$. Ainsi :

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{\mathcal{E}^2}{r} \tag{1.4}$$

A présent, déterminons les valeurs de r pour lesquelles l'énergie est minimale. Pour ce faire, calculons les racines de la dérivée de l'énergie :

$$\frac{dE}{dr} = \frac{d}{dr} \left(\frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{\mathcal{E}^2}{r} \right)$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{2mr^3} + \frac{\mathcal{E}^2}{r^2}$$

$$= \frac{1}{r^2} \left(\mathcal{E}^2 - \frac{\hbar^2}{mr} \right) = 0$$

$$\iff r = \frac{\hbar^2}{m\mathcal{E}^2} \tag{1.5}$$

Nous avons donc trouvé un rayon r pour lequel l'énergie de l'atome d'Hydrogène est minimale, et cette énergie minimale vaut alors, en combinant 1.5 et 1.4:

$$E_{min} = -\frac{m\mathcal{E}^4}{2\hbar^2} \tag{1.6}$$

En fait, le rayon r donné par la relation 1.5 et l'énergie minimale qui lui est associée en 1.6 correspondent respectivement au rayon du modèle de Bohr a_0 (où $a_0 = \frac{\hbar^2}{m\mathcal{E}^2} \equiv$ la distance séparant, dans l'atome d'hydrogène, le proton de l'électron) et à l'énergie de Rydberg R_y (où $R_y = \frac{m\mathcal{E}^4}{2\hbar^2} \equiv$ l'énergie de liaison de l'atome d'Hydrogène).

Plus particulièrement, il est possible de trouver l'énergie des états liés, qui est en fait un multiple de l'énergie de Rydberg :

$$E_n = -R_y \frac{1}{n^2} \tag{1.7}$$

où $n = 1, 2, 3, \dots$

Remarque : les états liés

Nous pouvons brièvement définir un état lié comme un état étant piégé entre le minimum et le maximum d'un potentiel, mais nous verrons cela plus tard dans les problèmes à une dimension.

1.2.2 Application à l'Oscillateur Harmonique (Quantique)

Rappelons avant tout qu'en général, on définit un **oscillateur** comme un système qui évolue périodiquement dans le temps, et l'on dit qu'il est en plus harmonique lorsque cette évolution est une fonction sinusoïdale ¹. Nous allons à nouveau faire appel au principe d'incertitude afin de déterminer l'énergie de l'oscillateur harmonique.

Remarque : l'importance de l'oscillateur harmonique quantique

Il est important de savoir que l'oscillateur harmonique joue un rôle fondamentale en physique; il est à la base d'un très grand nombre d'applications et de théorie. Gardez cela bien en tête car nous y reviendrons plus tard dans le cours, et vous le rencontrerez certainement plusieurs fois dans le reste de votre parcours en physique!

Un petit exemple d'application parmi tant d'autres en MQ serait d'utiliser l'oscillateur harmonique pour décrire le mouvement oscillatoire d'une particule autour de sa position d'équilibre. Nous allons alors procéder comme précédemment; écrivons l'énergie mécanique totale, de manière classique, de l'oscillateur harmonique :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \tag{1.8}$$

Posons $w = \sqrt{k/m}$, la fréquence angulaire.

Notons $\Delta x \equiv$ l'étendue de l'oscillateur harmonique dans son état fondamental.

Utilisant la relation d'Heisenberg, on trouve dès lors que l'impulsion est donnée par $\Delta p \approx \hbar/\Delta x$ En partant de ces hypothèses, on trouve que l'énergie de l'état fondamental est donnée par :

$$E(\Delta x) = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} + \frac{1}{2}k\Delta x^2 \tag{1.9}$$

Ensuite, nous pouvons trouver, en déterminant les racines de la dérivée de cette dernière équation, que l'énergie est minimale en

$$\Delta x \approx \frac{\hbar^{1/2}}{(mk)^{1/4}} \ .$$

En réinjectant l'expression de l'étendue Δx pour laquelle l'énergie est minimale, dans l'expression de l'énergie de l'oscillateur même, on trouve ainsi l'énergie minimale :

$$E_{min} \approx \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\approx \hbar \omega \tag{1.10}$$

^{1.} de fréquence et d'amplitude constantes.

De cette expression, nous pouvons en tirer une conclusion très importante qui est que l'énergie à l'état fondamental de l'oscillateur harmonique est non nul, contrairement aux résultats prédits par la physique classique.

Lorsque nous aurons les outils nécessaires pour aborder l'oscillateur harmonique quantique (OHQ) en détail, nous verrons que les valeurs que peuvent prendre l'énergie de l'OHQ sont quantifiés et vérifient la relation suivante :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \; ; \; n \in \mathbb{N}$$
 (1.11)

De cette expression 1.11, nous observons que :

- D'une part, le spectre des énergies est discrets; ainsi une certaine quantité d'énergie définie doit être fournie au système afin de passer d'un état n à un état supérieur (et à l'inverse, le système doit "perdre" une certaine quantité d'énergie pour passer à un état inférieur);
- D'autre part, l'énergie fondamentale, pour n=0, vaut

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

On l'appelle également **Energie de point zéro** (venant de l'anglais, "zero point energy", et est bien non nulle.

L'expression que l'on a obtenu en utilisant le principe d'incertitude concorde donc bien, en terme d'ordre de grandeur (puisque l'on avait la même expression à un facteur $\frac{1}{2}$ près seulement).

1.2.3 Principe d'incertitude dans le cas relativiste

Il se trouve que la relation d'Heisenberg est encore valable dans un cadre relativiste ; or nous savons que dans ce cadre, l'impulsion d'une particule libre relativiste est exprimée dans la relation :

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2 (1.12)$$

Supposons en plus que l'on "confine" un électron dans une boîte de taille $\approx \frac{\hbar}{mc}$, de sorte que l'incertitude sur sa position $\Delta x \approx \frac{\hbar}{mc}$; autrement dit, cela revient à vouloir déterminer la position de l'électron de manière très précise (en considérant que $\frac{\hbar}{mc}$ est très petit).

Ainsi, le principe d'Heisenberg contraint l'incertitude de l'impulsion à être plus grande ou égale à environ mc; $\Delta p \ge mc$.

En effet, nous pouvons alors remarquer que :

- Cela autorise la particule à être relativiste
- En utilisant l'équation 1.12, l'incertitude sur l'énergie vérifie alors la relation
 ΔE ≥ mc². Dans le cas où elle excède mc², il y a suffisamment d'énergie que pour donner naissance à
 une paire : l'électron avec son positron associé. C'est ainsi que la notion de "une particule" perd son
 sens dans la mécanique quantique relativiste. On ne peut pas parler d'"une particule" car l'incertitude
 d'Heisenberg fait qu'il peut y avoir une paire créée à tout moment (car l'énergie est incertaine au point
 de créer une particule identique).

Fixons à présent $\Delta p = mc$, de sorte que, par la relation d'Heisenberg, on a que $\Delta x \geqslant \frac{\hbar}{2mc}$. Alors une grandeur qui caractérise cette limitation à la mesure de la position d'une particule, lorsque l'on combine mécanique quantique à la relativité restreinte, est ce qu'on appelle la longueur d'onde de Compton λ_C . Cette longueur se définit comme :

$$\lambda_C = \frac{h}{mc} \tag{1.13}$$

Ainsi, cela signifie qu'en terme d'ordre de grandeur, l'incertitude de la position est minorée par longueur de Compton λ_C .

1.2.4 La Masse de Planck

Considérons une particule de masse M confinée dans une boule de rayon R. Nous avons alors 2 longueurs qui caractérisent la particule :

- 1. Première longueur caractéristique : La longueur de Compton : $\lambda_C = \frac{\hbar}{Mc}$.
- 2. Seconde longueur caractéristique. Le rayon de Schwarzschild : $R_s = \frac{2GM}{c^2}$ Ce rayon caractérise le fait que, si le rayon d'un objet de masse M est inférieur ou égal à son rayon de Schwarzschild, alors cet objet est en fait un trou noir, dont l'horizon est ce rayon R_s même. Nous avons ici :
 - $G \equiv$ la constante universelle de gravitation
 - $c \equiv$ la vitesse de la lumière dans le vide, qui représente aussi la vitesse de libération

Autrement dit, R_s caractérise le rayon d'une sphère à partir duquel aucun objet, pas même la lumière, ne peut s'échapper puisqu'il lui faudrait une vitesse plus grande que celle de la lumière c.

Avec ces 2 grandeurs, Planck s'est rendu compte qu'il était possible de faire un jeu d'unités fondamentales $(\hbar, c \text{ et } G)$ définissant une limitation sur la masse d'une particule ponctuelle. En effet, nous pouvons constater que la masse pour laquelle la longueur d'onde de Compton réduite (c'est-à-dire la longueur d'onde de Compton en utilisant la constante de Planck réduite $\lambda_C = \hbar/(Mc)$) est égale à la moitié du Rayon de Schwarzschild vaut :

$$\frac{\hbar}{Mc} = \frac{GM}{c^2}$$

$$\iff M \equiv M_p \text{ (Masse de Planck)} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}}$$
(1.14)

Pour un objet de la dimension d'une particule élémentaire, cette masse représente une masse critique qui permet de classifier l'objet de la manière suivante :

- Si M $< M_p$, alors $\lambda_C > R_s$: nous avons une particule élémentaire.
- Si M > M_p , alors $\lambda_C < R_s$: c'est un trou noir.
- Si M $\approx M_{Pl}$: inconnu nous ne connaissons pas la nature de l'objet.

Remarque: Notons que nous avons fixé la taille de l'objet avant de comparer sa masse afin de raisonner en terme de **densité** d'énergie. En effet, nous ne pourrions pas conclure que la Terre soit un trou noir, car bien que sa masse soit bien plus importante que la masse de Planck, sa densité d'énergie est faible.

1.2.5 Application à la Masse des étoiles

Considérons N atomes d'hydrogène dans une boule de rayon R, soumis à l'attraction gravitationelle, et notons les approximations suivantes :

- Ordre de grandeur du volume par atome $\approx \frac{R^3}{N}$;
- On en tire le rayon de confinement de chaque électron et proton : $\Delta x_e = \frac{R}{N^{1/3}} = \Delta x_p$;
- Et enfin, on en déduit, par la relation d'Heisenberg, les incertitudes de leur impulsions : $\Delta p_e = \frac{\hbar N^{1/3}}{R} = \Delta p_p$

De ces relations, écrivons l'énergie totale de la particule E, en exprimant d'une part l'énergie cinétique de ces particules, et d'autre part l'énergie potentielle qui est due au fait que les particules sont soumises à une attraction gravitationnelle :

- Energie cinétique (non-relativiste) : $N\left(m_ec^2 + \frac{\Delta P_e^2}{2m_e} + m_pc^2 + \frac{\Delta P_p^2}{2m_p}\right)$ Nous pouvons négliger le dernier terme de cette expression du fait que l'on peut considérer que $m_p >> m_e$
- Energie potentielle de gravitation : $-G\frac{(Nm_p)^2}{R}$

Dès lors, l'énergie totale sera donnée par :

$$E(R) \approx -G\frac{(Nm_p)^2}{R} + Nm_e c^2 + Nm_p c^2 + \frac{N}{2m_e} \frac{\hbar^2 N^{2/3}}{R^2}$$
(1.15)

Nous pouvons à présent déterminer un rayon R pour lequel l'énergie est minimale, en extrémisant cette fonction de l'énergie E dépendant de R:

$$\frac{d}{dR}E(R^*) = 0$$

$$\iff R^* = \frac{\hbar^2}{Gm_p^2 m_e N^{1/3}}$$
(1.16)

On remarque que le rayon \mathbb{R}^* diminue lorsque le nombre de particules N augmente.

Or nous avons vu dans la section ?? qui traite du principe d'incertitude dans le cadre relativiste, qu'il est possible d'avoir des particules relativistes ($\Delta p = mc$) lorsqu'elles sont confinées dans une région suffisamment petites. Il est alors naturelle de se poser la question; à partir de combien de particules N est-ce que les électrons deviennent relativistes? Autrement dit, le rayon étant relié à N, nous allons simplement chercher le nombre N, tel que le rayon R^* nous permet d'obtenir une incertitude de l'impulsion de l'ordre de mc.

En effet nous avons que:

$$\begin{cases}
\Delta p_e = cm_e \\
\Delta p_e = \frac{\hbar N^{1/3}}{R^*} = \frac{N^{2/3}Gm_e m_p^2}{\hbar}
\end{cases}$$

$$\implies cm_e = \frac{N^{2/3}Gm_e m_p^2}{\hbar}$$

$$\iff N^{2/3} = \frac{\hbar c}{G} \frac{1}{m_p^2} = \frac{M_p^2}{m_p^2}$$

$$\iff N = \left(\frac{M_p}{m_p}\right)^3$$
(1.17)

Remarquons que nous n'avons considéré que l'impulsion des électrons; en fait celle des protons importe peu car c'est lorsque les électrons sont relativistes que des réactions nucléaires deviennent possibles. Ainsi, lorsque l'on a cet ordre de grandeur du nombre d'atomes d'Hydrogène N confiné dans une boule de rayon R^* , les réactions suivantes peuvent avoir lieu:

$$e^- + p^+ \longrightarrow n$$

 $n + p^+ \longrightarrow d^+$
 $d^+ + d^+ \longrightarrow He^{++}$

où d signifie ici deutérium.

Lors de la fusion nucléaire, il y a une libération d'énergie et d'une très grande quantité de chaleur, ce qui permet d'avoir une stabilité au sein de la boule; une étoile s'est ainsi formée.

La masse des étoiles étant approximativement donnée par $M \approx Nm_p$, on a que

$$M \approx m_p \left(\frac{M_p}{m_p}\right)^3 \tag{1.18}$$

En terme de valeur, cela donne environ:

$$\begin{cases} M_p \approx 10^{19} \text{ GeV.c}^{-2} \\ m_p \approx 1 \text{ GeV.c}^{-2} \end{cases}$$

 $\implies N \approx 10^{57}$ (et la valeur exacte pour notre soleil est de $1,04 \times 10^{57}$ e⁻); Ainsi, la masse d'une étoile est environ de l'ordre de $M \approx 10^{30}$ kg.

Remarque:

- Notre soleil est environ de cette valeur $(M_{\odot} \approx 2 \times 10^{30} \text{ kg})$;
- Les plus petites étoiles ont une masse $M \approx 0,08 M_{\odot}$;
- Les plus grandes ont une masse $M \approx 100 M_{\odot}$;
- Dans les étoiles, le dégagement de chaleur fait que la température est élevée et que sa densité est faible. Cela implique que le rayon R^* pour lequel l'énergie est minimale, n'est pas la même que le rayon R de l'étoile même, et même en générale, $R >> R^*$. Ceci est du au fait que dans les étoiles, une fois que les réactions thermonucléaires commencent, l'intérieur de l'étoile chauffe, la pression augmente, la masse volumique diminue, et le rayon devient (beaucoup) plus grand que R^* . C'est le cas par exemple du soleil.

Il existe des étoiles pour lesquelles R est proche de R^* , mais il faudrait plus de connaissances approfondies en astrophysique pour comprendre cela.

1.2.6 La Masse de Chandrasekhar

Reprenons E(R) pour N atomes d'hydrogènes dans une boule de rayon R et à température nulle. La raison pour laquelle nous nous plaçons sous ces hypothèses est la suivante : comme on l'a dit précédemment, la fusion thermonucléaire dégage de l'énergie, et augmente la température et la pression au centre de l'étoile. Par conséquent, la masse volumique est faible. Or si l'on se met à température nulle, ou du moins suffisamment faible pour qu'elle ne change pas la masse volumique, on peut considérer la limite de Chandrasekhar que nous discuterons ici.

En tenant compte à présent des effets relativistes, l'expression de l'énergie du système E(R) donne lieu à :

$$E(R) \approx -\frac{GN^2m_p^2}{R} + Nm_pc^2 + N\sqrt{m_e^2c^4 + \frac{\hbar^2N^{2/3}}{R^2}c^2}$$
 (1.19)

Selon la valeur de N, la manière dont se comporte E(R) peut différer; tantôt E(R) peut décroître en 1/R, tantôt il est possible de trouver une valeur critique $N = N^*$ tel que E(R) s'annule à la limite où R tend vers 0. Déterminons cette valeur critique N^* :

$$\lim_{R \to 0} E(R) = \lim_{R \to 0} \frac{-GN^2 m_p^2 + RN m_p c^2 + \sqrt{N^2 m_e^2 c^4 R^2 + \hbar^2 N^{2/3} c^2}}{R}$$

$$= \lim_{R \to 0} -\frac{GN^2 m_p^2}{R} + \frac{\hbar N^{4/3} c}{R} = 0$$

$$\iff N^{2/3} = \frac{\hbar c}{Gm^2 p}$$

$$\iff N = \left(\frac{\hbar c}{G}\right)^{3/2} \frac{1}{m_p^3} = \frac{M_p^3}{m_p^3}$$

$$\implies N = N^* = \left(\frac{M_p}{m_p}\right)^3$$
(1.20)

Comment pouvons-nous interpréter cette valeur critique?

A tempéature nulle, si $N > N^*$, alors la boule ne peut pas résister à son attraction gravitationnelle : il y a alors ce qu'on appelle un effondrement gravitationnel, qui fait que la boule se transforme en un trou noir. La masse de Chandrasekhar représente en fait cette limite à partir de laquelle il peut y avoir un effondrement gravitationnel, et vaut approximativement $1,4M_{\odot}$.

En particulier, une fois que les réactions nucléaires ont terminé de transformer le noyau d'une étoile massive en un noyau inerte (le plus souvent constitué de fer), d'autres réactions continues d'apporter des éléments inertes sur le noyau, ce dernier accumule donc de la masse; enfin, si le noyau passe à la limite de Chandrasekhar en ayant accumulé de la matière, il s'effondre et provoque une supernova de type II (ce qui donne soit un trou noir soit une étoile à neutron).

L'hypothèse à température nulle était donc nécessaire pour considérer le cas où il n'y a plus d'augmentation conséquente de la masse volumique à cause des réactions nucléaires ayant lieu dans le noyau de l'étoile.