Introduction à la physique quantique

Mécanique classique du point

Définition : Quantité de mouvement

La quantité de mouvement, notée \vec{p} d'un objet de masse m et de vecteur vitesse \vec{v} est le produit :

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

Ondes en mécanique classique

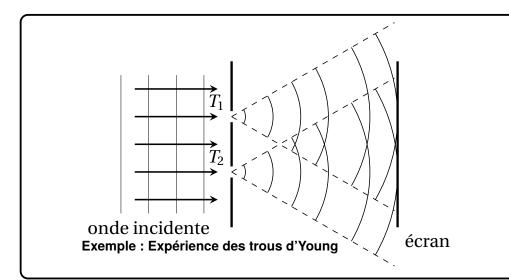
Définition : Vecteur d'onde

On définit le vecteur d'onde, noté k associé à une onde monochromatique de longueur d'onde λ par :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

La phase de l'excitation s'écrit alors $\omega t - kx$.

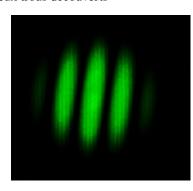
Interactions entre ondes : interférences



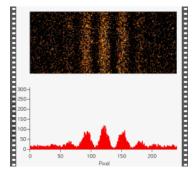
Un trou découvert



Deux trous découverts



«Impacts» de lumière

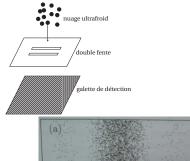


Interprétation

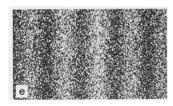
Photon

Les échanges d'énergie entre matière et rayonnement se font par quantités discrètes. On nomme *photon* le quantum d'énergie d'un rayonnement électromagnétique.

Fentes d'Young avec des atomes







avec une fente découverte

avec deux fentes découvertes

Énergie du photon

Définition : Première relation de Planck-Einstein

L'énergie d'un photon associé à une onde monochromatique de fréquence v (de pulsation ω) est :

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

avec $h=6,626\,070\,15\cdot10^{-34}\,\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}$ la *constante de Planck* et $\hbar=h/(2\pi)\simeq1,05\cdot10^{-34}\,\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}$ la constante de Planck *réduite*.

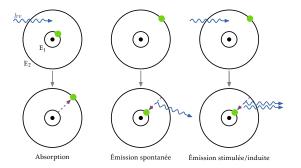
Quantité du mouvement du photon

Définition : Deuxième relation de Planck-Einstein

La *quantité de mouvement* d'un photon associé à une onde plane monochromatique de fréquence v et se propageant dans la direction $\overrightarrow{e_x}$ est :

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{e_x} = \frac{hv}{c} \vec{e_x} = \hbar \vec{k}$$
 avec : $\vec{k} \equiv \vec{e_x}$ et : $k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$.

Interactions atome - rayonnement : 3 processus



Longueur d'onde associée à une particule massive

Définition : Longueur d'onde de de Broglie

On associe à un objet matériel de masse m et de vitesse de norme v la longueur d'onde dite de de Broglie λ_{dB} telle que :

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}.$$

Énergie d'une onde de de Broglie (HP)

Énergie d'une onde de de Broglie

L'énergie associée à un quantum d'onde de matière de quantité de mouvement p est, pour des particules \emph{libres} de masse m :

$$E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Interprétation

Loi de probabilité

Le point d'impact de chaque photon obéit à une loi de probabilité que l'observation d'un grand nombre de photons permet de déterminer.

Fonction d'onde

Définition: Fonction d'onde

La répartition spatiale d'un quanton est décrite en physique quantique par une *fonction* **d'onde** $\Psi(M, t)$ que l'on peut évaluer en tout point M et à chaque instant t.

Lien avec la probabilité de présence

Probabilité de présence

La *probabilité* P(M, t) qu'une mesure de position d'un objet de fonction d'onde $\Psi(M, t)$ donne, à l'instant t la position M est proportionnelle au *module au carré de* $\Psi(M, t)$: $P(M, t) \propto |\Psi(M, t)|^2$

Exemples de fonctions d'ondes (HP)

Définition : Onde plane monochromatique

Une onde plane monochromatique unidimensionnelle de quantité de mouvement $\hbar k \overrightarrow{e_x}$ est décrite par la fonction d'onde :

$$\Psi(x) \propto e^{ikx}$$

Définition : Paquet d'ondes gaussien

Un exemple de paquet d'ondes gaussien unidimensionnel de quantité de *centre* x_0 , de quantité de mouvement $\hbar k_0$ et de *largeur* Δx est donné par la fonction d'onde :

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)}^{1/4} e^{ik_0x} e^{-(x-x_0)^2/(4\Delta_x^2)}$$

La largeur Δx est l'*indétermination* sur la position du quanton.

Généralisation

Interférences entre amplitudes de probabilité

On considère un objet pouvant emprunter, classiquement, plusieurs chemins $\{i=1..N\}$ pour parvenir à un état final. On détermine, pour chaque chemin, les *amplitudes de probabilité* de parvenir à l'état quand seul ce chemin est possible.

L'amplitude de probabilité de parvenir à l'état final donné :

- quand tous les chemins sont possibles,
- et qu'on ne réalise pas de mesure du chemin suivi au cours de l'évolution,

est proportionnelle à la somme des amplitudes individuelles.

Distribution de quantité de mouvement

Distribution de quantité de mouvement

On peut décrire un paquet d'ondes comme une somme d'ondes monochromatiques de vecteurs d'ondes principalement compris dans un intervalle $[k_0 - \Delta k/2; k_0 + \Delta k/2]$.

- $\hbar k_0$ représente la quantité de mouvement moyenne du quanton : son centre se déplace à $\hbar k_0/m$
- $\hbar \Delta k$ représente l'*indétermination* sur la qdm

Cas de la diffraction d'une onde lumineuse

On considère la diffraction d'une onde lumineuse plane monochromatique de longueur d'onde λ_0 en incidence normale sur une fente de largeur a selon x et infinie selon y.

- 1. On considère l'onde en amont de la fente. a. Quels sont son vecteur d'onde, et la quantité de mouvement dans une interprétation en termes de photons? b. Quelles sont ses indéterminations spatiales et en quantité de mouvement :
 - selon x;
 - selon z.
- 2. On considère l'onde juste en aval de la fente. a. Quelle est l'ordre de grandeur de son indétermination spatiale selon x, notée Δx ? b. En utilisant une interprétation en termes

de photons, montrer que ceux-ci acquièrent une quantité de mouvement selon x. Quelle est l'ordre de grandeur de l'indétermination de cette qdm, notée Δp_x . c. Calculer le produit $\Delta x \Delta p_x$ et commenter.

Inégalité de Heisenberg

Inégalité d'indétermination de Heisenberg

On considère la fonction d'onde d'un quanton, pour un système unidimensionnel, caractérisée par :

- une indétermination sur la position Δx ;
- une indétermination sur la quantité de mouvement Δp_x .

Leur produit vérifie l'inégalité :

$$\Delta x \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2},$$

avec $\hbar = h/(2\pi) \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \,\mathrm{J} \cdot \mathrm{s}$ la constate de Planck réduite.

Observations expérimentales

Définition : Spectre d'émission

Les longueurs d'ondes discrètes émises sont nommées *raies*. L'ensemble des raies constitue le *spectre d'émission* de l'atome.



Spectre de H

Modèle planétaire

En physique classique, les orbites circulaires de rayon a d'un électron autour du noyau de l'atome d'hydrogène ont :

- une énergie mécanique : $\mathcal{E}_{\rm m} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a}$
- un moment cinétique $\sigma = \sqrt{\frac{am_e e^2}{4\pi\varepsilon_0}}$

Modèle planétaire de Bohr

Modèle planétaire de Bohr

Dans le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène, on fait l'hypothèse que le *moment cinétique* est *quantifié* : il ne peut prendre que les valeurs discrètes :

$$\sigma_n = n\hbar$$
,

avec $n \in \mathbb{N}^*$.

Cette quantification implique une quantification :

- de *l'énergie* $\mathcal{E}_n = -\frac{E_0}{n^2}$ avec $E_0 = 13,605\,693\,122\,994(26)$ eV l'énergie de Rydberg
- du rayon $a_n = n^2 a_0$, avec $a_0 = 5,29177210903(80) \cdot 10^{-11} \,\mathrm{m} = 0,529177210903(80)$ Å le *rayon de Bohr*.

Modèle planétaire classique

Nombres quantiques de l'atome d'hydrogène (HP)

Introduction à la physique quantique

Nombres quantiques et orbitales atomiques

Un état quantique stationnaire, de l'atome d'hydrogène est complètement décrit par la données de 4 nombres entiers ou demi-entiers.

3 sont relatifs au mouvement orbital de l'électron :

- $n \in \mathbb{N}^*$: nombre quantique principal,
- $\ell \in \mathbb{N} \in [0; n-1]$: nombre quantique secondaire/azimuthal
- $m_{\ell} \in \mathbb{Z} \in [-\ell; \ell]$: nombre quantique magnétique

La donnée du triplet $\{n, \ell, m_l\}$ caractérise complètement une *orbitale atomique*, notée O.A..

Le quatrième est le *nombre de spin* $m_s = \pm \frac{1}{2}$ relatif au moment cinétique intrinsèque de l'électron nommé « spin ».

L'énergie d'un état est donnée par $-\frac{E_0}{n^2}$, sa dégénérescence est $2n^2$ (en comptant les deux états de spin $m_s = \pm \frac{1}{2}$).

Grandeurs quantifiées

À chaque nombre quantique est associée une grandeur quantifiée :

n l'énergie :
$$\mathcal{E}_n = -\frac{E_0}{n^2}$$
,

 ℓ la norme du moment cinétique, noté σ . On a $\sigma = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$,

 m_{ℓ} la projection σ_z de $\overrightarrow{\sigma}$ sur un axe privilégié $\sigma_z = m_{\ell}\hbar$,

 m_s la projection S_z du moment cinétique intrinsèque \overrightarrow{S} (de norme $S = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}\hbar$) sur un axe privilégié $S_z = m_S \hbar$.

Indispensable

- relations de Planck Einstein
- relation de de Broglie
- limites classiques
- amplitude de probabilité et (densité de) probabilité
- inégalité d'indétermination de Heisenberg
- modèle planétaire de Bohr

In dispensable