Mécanique quantique

C. Lacpatia

Aug 03, 2023

CONTENTS

CHAPTER

ONE

DUALITÉ ONDE-CORPUSCULE

1.1 Ondes et corpuscules en mécanique classique

1.1: Bilan

On se propose ici de faire rapidement un bilan sur les concepts d'ondes et de corpuscule en mécanique classique.

- Rappeler brièvement les propriétés physiques qu'on associe à un corpuscule.
- Rappeler brièvement les propriétés physiques qu'on associe à une onde.
- Classer les objets physiques ci-après suivant qu'ils soient des corpuscules ou des ondes **dans la théorie classique.**
  - Electrons
  - Atomes
  - Lumière

Important 1.1

A retenir…

On retiendra qu'en mécanique classique, les objets physiques sont soit des corpuscules, soit des ondes.

Attention, cela n'empêche pas l'interaction entre les deux types d'objets. Ainsi, la théorie classique prévoit l'interaction entre la matière et la lumière

1.2 Expériences importantes

1.2.1 Effet photoélectrique

Observer la vidéo suivante appelée "Effet photoélectrique - Présentation" dans la partie mécanique quantique.

Effet photoélectrique - Présentation.

```
<IPython.core.display.Video object>
```

1.2: Analyse de l'expérience

1. Pourquoi les électrons ne peut aller sans éclairage de l'armature négative vers l'armature positive ? Traduire cela en traçant **l'allure** de l'énergie potentielle des électrons d'une armature à l'autre .
2. Que faut-il simplement pour que les électrons franchissent la barrière de potentiel mise en évidence à la question précédente ? Comment est-ce réalisé ici ? Expliquer ainsi ce qu'est l'effet photoélectrique .
3. Du point de vue classique (ondulatoire) de la lumière, peut-on expliquer l'effet photoélectrique présenté

dans la vidéo de présentation.

1. Regarder maintenant les deux vidéos suivantes appelées “Effet photoélectrique - Effet de seuil” et “Effet photoélectrique - Effet de seuil et intensité”. Expliquer pourquoi de telles observations sont contradictoires avec la vision classique de la lumière .
2. Dans la vision quantique, la lumière est **aussi** composée corpusculaire, c’est à dire composée de quantas de lumière appelés photons dont l’énergie dépend de la fréquence ν du rayonnement : $E_{photon} = h\nu$ (relation de Planck-Einstein) où h est la constante dite de Planck ($h = 6,63 \times 10^{-34}$J.s. Interprêter l’effet photoélectrique grâce à la notion de photon .
3. Expliquer pourquoi cette vision corpusculaire permet d’expliquer l’existence d’un effet de seuil.

4. On donne le potentiel d’extraction du Sodium, c’est-à-dire l’énergie minimale nécessaire pour libérer des électrons de l’armature. $W_S = 2.5eV$. Comparer la fréquence seuil des photons associées avec celle observée dans la vidéo “Effet photoélectrique - Influence du matériau”. A l’inverse, estimer le potentiel d’extraction du Zinc et du Calcium.

Effet photoélectrique - Effet de seuil.

```
<IPython.core.display.Video object>
```

Effet photoélectrique - Effet de seuil et intensité.

```
<IPython.core.display.Video object>
```

Effet photoélectrique - Influence du matériau.

```
<IPython.core.display.Video object>
```

Important 1.2

Le photon
On retiendra que le modèle corpusculaire de la lumière décrit la décrit comme un ensemble de “quantas de lumière” appelée photons. Ces derniers ont les caractéristiques suivantes :

- Leur énergie est (relation de Planck-Einstein) : $E = h\nu$ où h est la constante de Planck et ν la fréquence du rayonnement .
- Leur charge électrique est nulle* Leur masse est nulle* Leur vitesse est toujours la vitesse de la lumière : ce sont des particules relativistes .
- Leur quantité de mouvement est $\vec{p} = \frac{h}{\lambda}\vec{u} = \hbar\vec{k}$ où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $\vec{u}$ est un vecteur unitaire dans la direction et le sens de propagation de la lumière et $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{u}$.

1.2.2 Diffraction et interférences de la matière

1.3: Analyse d’expérience

En 1927 Thomson de son côté et Davisson et Gerner du leur réalisent un expérience de diffraction d’un faisceau d’électrons par une fente fine ou un cristal. Depuis, des expériences de diffraction pour des atomes et molécules ont été réalisées.
Depuis 1989, on a aussi réalisé des expériences d’interférences de matière (électron 1989, Hélium 1991, fullerènes 1999). Il s’agit de la ” classique ” expérience des fentes d’Young. Notons néanmoins que sa réalisation pratique pour de la matière est plus complexe que pour la lumière.

1. Si l’on considère que les électrons sont uniquement des corpuscules (vision classique), expliquez pourquoi on ne peut obtenir de figure d’interférences (Remarque: ces observations expliquent aussi pourquoi le modèle

purement corpusculaire de la lumière n'est pas valable) .

2. Dans leur expérience, Davisson et Gerner bombardèrent du nickel (paramètre de maille $a = 0.215nm$) avec des électrons. La formule de Bragg permet de relier l'angle de diffraction aux paramètres de l'expérience: $2a\sin\theta = \lambda$. Ils mesurèrent un angle de $50°$. Estimer ainsi la longueur d'onde des électrons puis leur énergie .
3. En réalité, l'énergie des électrons était de 54eV. Expliquer les causes possibles de cet écart.

Important 1.3

Dualité onde-corpuscule de la matière.
On retiendra que d'un point de vue quantique, on peut associer un caractère corpusculaire associé à une énergie E et une quantité de mouvement $\vec{p}$ ET un caractère ondulatoire associé à une longueur d'onde λ (ou de vecteur d'onde) et une fréquence f (ou une pulsation ω). Les deux aspects de la particule sont reliées par la relation de de Broglie:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{\lambda}\vec{u}$$

où $\vec{u}$ est la direction de propagation de la lumière.

1.3 La dualité onde-corpuscule

1.3.1 Interférences électrons à électrons.

1.4: Analyse de l'expérience

Observer la vidéo suivante sur une expérience d'interférences électrons par électrons expliquer l'aspect dual de l'interprétation ondes-corpuscules de la matière.

```
<IPython.core.display.Video object>
```

1.3.2 Critères quantiques

Important 1.4

Crtière sur la longueur d'onde
Par analogie avec l'approximation de l'optique géométrique, on peut considérer que l'approche de la mécanique classique reste valable tant que les dimensions du corps considéré sont grandes devant la longueur d'onde de de Broglie associé au système.

Important 1.5

Critère sur l'action
Le traitement classique reste valable tant que l'action caractéristique S du système est grande devant la constante de Planck.

1.3.3 Méthode - Utilisation du critère quantique

1.5: Exercice

1. En utilisant le critère sur la longueur d'onde, expliquer pourquoi un homme qui marche ne nécessite pas un traitement quantique .
2. En utilisant le critère sur l'action, justifier qu'une planète gravitant autour d'un Soleil ne nécessite pas un traitement quantique mais qu'un électron autour d'un noyau le nécessite.

1.4 Entrainement

1.6: Ordres de grandeur

1. Estimer la quantité de photons reçus par seconde par une photo-cathode de surface $S = 1\text{cm}^2$ exposée au rayonnement d'un lampe au sodium ($\lambda = 589\text{nm}$) ponctuelle émettant avec une puissance $P = 15\text{W}$ à une distance $d = 1\text{m}$.
2. Estimer la quantité de photons reçus par seconde par la pupille dilatée d'un humain regardant une étoile de rayon $R = 10^5\text{km}$ émettant principalement dans le rouge comme un corps noir et située à une distance de 20 années lumières. On sait que:
   - Pour un corps noir, la puissance rayonnée par unité de surface du corps noir **à sa surface** est $P_S = \sigma T^4$ avec $\sigma = 5.7 \times 10^{-8}\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$ est la constante de Stefan.
   - La longueur d'onde correspondant au maximum d'émission est reliée à la température du corps noir par la loi de déplacement de Wien: $\lambda_{max} T = cste = 0.2898\text{K.cm}$
3. Commenter la difficulté d'obtenir une éclairement "un photon par un photon".

Point utile pour cet exercice

- $\Longrightarrow$ *Relation de Planck-Einstein.*

1.7: Pression de radiation

Soit un faisceau monochromatique de puissance surfacique P_S et de longueur d'onde λ se réfléchissant sur un miroir parfait avec un angle θ. Par un bilan de quantité de mouvement sur les photons, déterminer la pression (appelée pression de radiation) exercée par le faisceau lumineux sur le miroir. On supposera le milieu environnant assimilable au vide.

Point utile pour cet exercice

- $\Longrightarrow$ *Relation de Planck-Einstein.*
- $\Longrightarrow$ *Pression cinétique.*

CHAPTER

TWO

FONCTION D'ONDE

2.1 Fonction d'onde

2.1.1 Définition

Important 2.1

Fonction d'onde
La connaissance de l'état d'un système donnée à un instant donné est entièrement contenu dans une fonction appelée fonction d'onde $\Psi(M, t)$. Cette fonction doit posséder les caractéristiques suivantes (entre autre):

- Elle est de carré sommable (sur $\mathbb{R}^3$, cf *suite* (page 5)) .
- Elle est complexe par nature.

2.1.2 Fonction d'onde - Probabilité

Nous avons dit que la fonction d'onde définissait complètement les caractéristiques d'un système. Il convient maintenant de remonter à des grandeurs qu'on peut interpréter à notre échelle. Il ne s'agit pas ici de présenter complètement la théorie quantique (qui nécessite notamment une bonne connaissance d'algèbre linéaire) mais de présenter un point particulier: la notion de probabilité de présence.

Important 2.2

Probabilité de présence
La probabilité dP de détecter une particule dans un petit volume $\delta\tau$ autour du point M à un instant t est donné par:

$$dP = A|\Psi^2(M, t)|d\tau$$

où $|\Psi^2(M, t)|$ est le module au carré de la fonction d'onde. $\Psi^2(M, t)$ est appelée densité de probabilité de présence.
A est un facteur de normalisation de sorte que la probabilité totale sur tout l'espace soit 1.

2.1.3 Interprétation de l'expérience d'interférence

2.1: Exemple

On considère le cas des interférences au moyen d'un dispositif des trous d'Young pour des électrons.
Sachant qu'on peut alors appliquer un "pseudo" principe de superposition à la fonction d'onde associé à l'électron, expliquer, calcul à l'appui, pourquoi cette dernière est cohérente avec le principe d'une répartition des électrons n'étant pas la somme des faisceaux issus des deux fentes.

2.1.4 Remarques (en ligne)

Attention

C'est important de ne pas confondre la fonction d'onde associé à une particule (ou plus généralement à un système) et l'amplitude complexe d'une onde classique.

2.2 Quantification des états liés

La quantification des états liés est fondamentale en mécanique quantique. Elle est une conséquence directement du caractère ondulatoire de la matière. Pour simplifier l'explication ce phénomène nous allons nous ramener à traiter la fonction d'onde comme une onde classique. Il faut néanmoins garder en mémoire toutes les précautions mise en évidence ci-dessus. C'est un point important qu'il faut comprendre associé à la notion de complémentarité. La description de tel ou tel phénomène quantique passe par le choix d'une représentation ondulatoire ou corpusculaire. Souvent dans ce choix, on " oublie " momentanément l'autre aspect qui existe bel et bien.

2.2.1 Principe

Important 2.3

Le phénomène de quantification
La quantification des états de la matière correspond au caractère quantifié des états accessible, c'est-à-dire que certaines caractéristiques (énergie, moment cinétique…) ne peuvent prendre que des valeurs discrètes.

2.2.2 Méthode - Etude du puits de potentiel infini

2.2: Exercice

Soit un système Σ (potentiellement un électron, un atome…) On considère un puits de potentiel infini:

$$\begin{cases} E_p(0 < x < L) = 0 \\ E_p(x < 0 OU x > L) = \infty \end{cases}$$

On admet que les zones où l'énergie potentielle est infinie impose une probabilité de présence nulle soit $\Psi(M,t) = 0$.

On veut chercher ici les états stationnaires, c'est-à-dire les états dont la fonction d'onde s'écrit: $\Psi(x,t) = Psi_x(x) \times Psi_t(t)$. On admet que dans ces conditions, la fonction d'onde peut s'écrire:

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\phi(x)$$

où E est l'énergie de l'état du système considéré et ϕ est une fonction sinusoïdale $\phi(x) = A\sin(\frac{2\pi}{\lambda}x + \alpha)$.

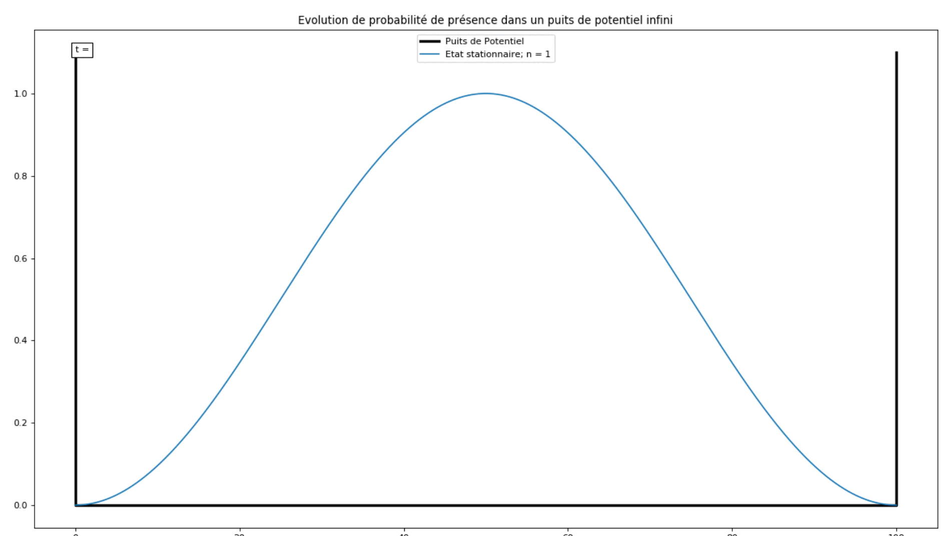
1. Calculer la densité de probabilité de présence d'un état stationnaire si $\phi(x)$ est réelle. Trouver une explication au terme "stationnaire" .
2. Donner un possible sens (sans justification) à λ .
3. Montrer qu'avec les conditions aux limites imposées, λ ne peut prendre que des valeurs discrètes qu'on notera $\lambda_n 1$. Exprimer l'énergie E_n d'un état associé à λ_n. Conclure quant à la quantification des états d'énergie .
4. Que vaut l'énergie minimale du système? Comparer au cas classique .
5. Déterminer l'écart relatif $\frac{\Delta E}{E}$? Expliquer dans ce cas pourquoi on parle de "limite classique aux grands nombres quantiques" (ou de "continuum" d'énergie).

Important 2.4

A retenir

On retiendra:

- que les états stationnaires dans un puits de potentiel infini ont des énergies quantifiées .
- la méthode (forme mathématique initiale admise) pour démontrer la quantification de la longueur d'onde puis de l'énergie .
- Le fait que l'énergie minimale du système ne correspond plus à l'énergie potentielle minimale .
- Le fait qu'au grand nombre quantique (n grand), les états quantifiés sont **relativement** proches de sorte qu'on puissent parler d'un continuum.



2.2.3 Etude du puits de potentiel infini - Approfondissement

2.3: Exercice

Soit un système Σ (potentiellement un électron, un atome…) On considère un puits de potentiel infini:

$$\begin{cases} E_p(0 < x < L) = 0 \\ E_p(x < 0OUx > L) = \infty \end{cases}$$

On rappelle que la fonction d'onde des états stationnaires prend la forme:

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\phi(x)$$

et que l'énergie E et la longueur d'onde λ sont quantifiés:

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$
$$E_n = n^2\frac{h^2}{8mL^2}$$

On se propose de calculer quelques ordre de grandeurs et d'interprétation le passage du quantique au classique. On considère une balle (tennis par exemple) glissant sans frottements dans une pièce. Les rebonds sur les murs sont supposés élastiques de sorte que l'allure du potentiel proposés en préambule puisse être considéré comme acceptable.

1. Estimer l'énergie minimale de balle dans une approche quantique puis la vitesse minimale associée. La distinction entre énergie potentielle minimale et énergie minimale dans ce cadre a-t-elle encore un sens?1. En considérant une vitesse acceptable pour une balle de tennis et une incertitude acceptable sur cette vitesse, justifier qu'on puisse considérer que l'état de la balle n'est pas un état stationnaire mais une superposition d'état stationnaire dont on déterminera approximativement le nombre quantique moyen n_{moy} (à commenter) et l'intervalle Δn d'états autour de n_{moy} qui se superposent.
2. Observer la vidéo ci-après correspondant à une simulation d'un puits de potentiel infini avec un système dont la fonction d'onde est une superposition d'état quantique stationnaires (on a pris des états entre $n_{moy} - \Delta n$ et $n_{moy} + \Delta n$ et on a sommé les fonctions d'onde). Commenter l'allure obtenue de la probabilité de présence .
3. Observer les deux vidéos de comparaison de densité de probabilité de présence et commenter ce qu'on obtient on commentera notamment ce qu'on obtiendrait avec la balle de tennis.

Superposition d'états quantique

```
<IPython.core.display.Video object>
```

Influence de n moyen

```
<IPython.core.display.Video object>
```

Influence de Δn moyen

```
<IPython.core.display.Video object>
```

Important 2.5

A retenir

On retiendra:

- que les états réels sont souvent des superpositions d'état stationnaire. On pourra par la suite mettre cela en lien avec le principe d'indétermination d'Heisenberg .
- que les nombres quantiques mis en jeu et le nombre d'états superposés dans le cas de système macroscopique serait gigantesque. Si la modélisation même du système est discutable, cette étude montre que les interprétations quantiques ne sont pas complètement incohérentes avec la vision classique qu'on retrouve aux aux nombres quantiques: continuum, localisation de la particule.

2.2.4 Bilan

Important 2.6

Généralisation (admise)
Considérons un système Σ dont l'énergie potentielle est $E_p(x)$. On admet que lorsque des état liés peuvent exister, il s'établit alors une quantification des états liés: l'énergie de ces états ne peut prendre qu'une valeur discrète. L'exemple de puits carrés finis sera vus en seconde année (PC).

Attention

Nous parlons ici uniquement des états liés. Les états de diffusion n'impose pas de condition de quantification.

2.4: Note:

Exemple : Cas de l'oscillateur harmonique
L'oscillateur harmonique est un système soumis au potentiel:

$$E_p = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$$

Tous les états possibles sont des états liées. Il vient que tous les états de l'oscillateur harmonique sont liés. On peut montrer (en utilisant l'équation de Schrödinger) que l'énergie des états liés est:

$$E_n = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$$

On observe que l'état fondamental (de plus basse énergie) n'est PAS (comme pour le puits quantique) l'énergie nulle (qui correspondrait à un état d'équilibre). C'est un point fondamental qu'on pourra associer par la suite aux inégalités d'Heisenberg.

2.3 Inégalités d'Heisenberg

2.3.1 Enoncé

Important 2.7

Enoncé
Considérons un système suivant une évolution unidimensionnelle suivant un axe x. On associe sa position à une grandeur x et sa quantité de mouvement àune grandeur p_x. L'indétermination Δx sur la position x et l'indétermination Δp_x sur l'impulsion p_x sont reliés par la relation:
\begin{align*} \Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}

2.3.2 Interprétation de la diffraction

2.5: Exercice

On considère un faisceau de particules matérielles de longueur d'onde λ se propageant dans la direction Ox. On place un écran percé d'un trou de largeur a de manière à réduire la taille du faisceau.

1. Rappeler ce qu'il va se passer si l'on réduite trop la taille du trou .
2. Estimer dans ces condition une indétermination sur la position transverse z de la particule .
3. En déduire une indétermination minimale sur la quantité de mouvement p_z .
4. En déduire une estimation de l'élargissement du faisceau en sortie en calculant l'ouverture angulaire du faisceau $\sin u$. Commenter ce qu'on observe.

Important 2.8

A retenir
On retiendra que les inégalités d'Heisenberg permettent d'expliquer simplement plusieurs effets quantiques. Mais attention, **il ne s'agit QUE d'estimation d'ordre de grandeur car ce ne sont pas de vrais calculs des indétermination.**

2.3.3 Ordre de grandeur

2.6: Exercice

Il est important de savoir estimer si les inégalités d'Heisenberg sont contraignantes ou non pour l'étude de tel ou tel système. Si elles sont contraignantes, cela signifie que la mécanique classique est sûrement mise en défaut.

1. Pour une balle de Tennis ($m = 60$g) frappée à 100km.h^{-1}. Estimer l'indétermination minimale sur la position de la balle si l'on peut mesurer sa vitesse à 0.1km.h^{-1}. Le principe d'indétermination a-il une influence a priori sur l'étude du mouvement d'une balle de Tennis?
2. Pour un électron orbitant autour d'un atome estimer l'indétermination sur la position Δx. En déduire l'indétermination sur la vitesse v_x. Commenter.

2.3.4 Contraintes sur l'énergie minimale.

2.7: Exercice

Le principe d'indétermination permet aussi d'expliquer pour l'énergie minimale d'un système ne petu être égale au minimum d'énergie contrairement au cas classique.

1. Généralités: On considère un système mécanique possédant une position d'équilibre stable, donc un minimum d'énergie potentielle. Si le système est dans cet état, que peut-on dire de l'indétermination sur la position? En déduire l'indétermination minimale sur la quantité de mouvement. Commenter.

Cas de l'oscillateur harmonique. On reprendre le cas de l'oscillateur harmonique. On rappelle que les états stationnaires sont quantifiés et que:

$$E_n = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$$

1. En considérant le mouvement d'un oscillateur d'un point de vue classique, justifier que l'énergie mécanique du système puisse s'écrire sous la forme: $E = \frac{p_{x,m}^2}{4m} + \frac{kx_m^2}{4}$ où p_m et x_m sont respectivement les amplitudes d'oscillations des grandeurs respectives p_x et$x$.
2. En considérant le mouvement de l'oscillateur, proposer une relation simple entre $p_{x,m}$ et l'indétermination Δp_x et de même entre x_m et l'indétermination Δx

3. En utilisant les relations de Heisenberg, montrer que l'énergie mécanique possède un minorant qui est une fonction de $E_{\text{min}}(\Delta x)$.
4. En étudiant la fonction $E_{\text{min}}(\Delta x)$, trouver la valeur minimale que peut prendre l'énergie du système. La comparer avec l'énergie minimale de l'oscillateur harmonique quantique.

Attention

Cette méthode de raisonnement est à savoir faire sur d'autres systèmes mais attention, il s'agit d'une étude en ordre de grandeur et le résultat trouvé à la fin ne pourrait être utilisé en tant que valeur minimale précise.

2.4 Entrainement

2.4.1 Energie minimale d'un atome

2.8: Exercice

1. On considère le mouvement des électrons comme des orbites circulaires de rayons R autour du noyau. Utiliser les inégalités Heisenberg pour justifier l'existence d'une orbite de rayon minimal* Toujours sous l'hypothèse d'un mouvement circulaire, montrer que l'hypothèse de la quantification du moment cinétique $\overrightarrow{L} = n\hbar\overrightarrow{e_z}$ conduit à montrer la quantification de l'énergie de l'atome. On précisera l'expression des niveaux d'énergie.

Point utile pour cet exercice

- $\Longrightarrow$ *Inégalités d'Heisenberg.*
- $\Longrightarrow$ *Energie mécanique.*
- $\Longrightarrow$ *Moment cinétique.*

2.4.2 Etude de l'oscillateur harmonique

2.9: Exercice

On se propose d'aller plus loin dans l'étude de l'oscillateur harmonique.

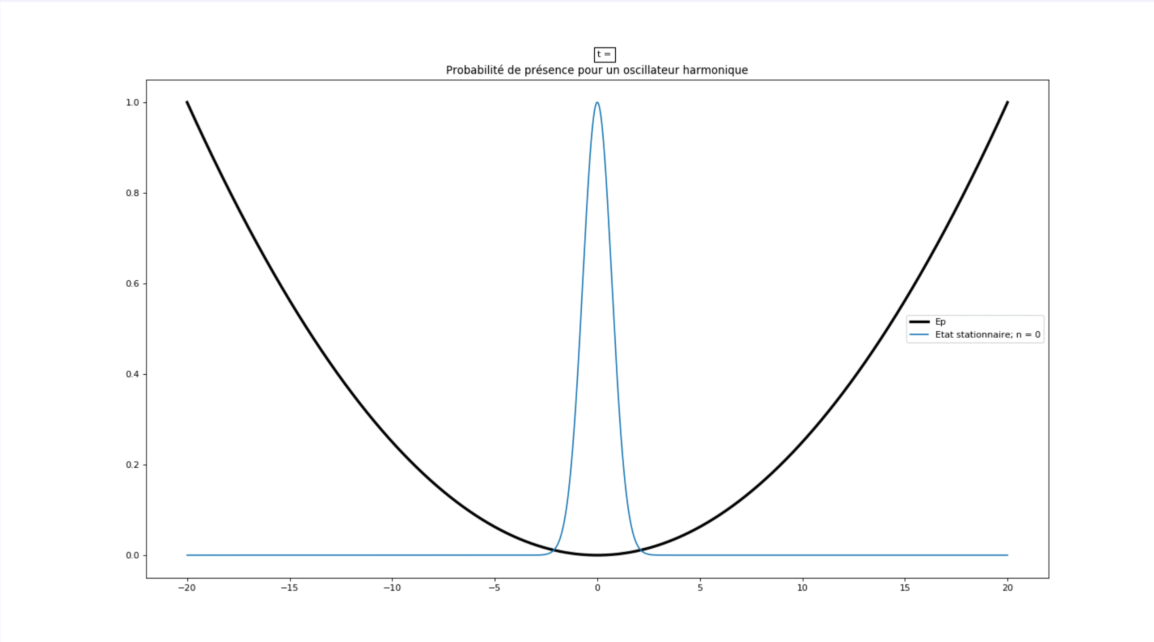
1. On considère un pendule simple macroscopique utilisable en salle de TP. Estimer au moyen des formules du cours l'énergie de l'état fondamdental $n = 1$. Déterminer l'amplitude des oscillations associées. Est-il raisonnable de le distinguer de l'état $E_{p,min} = 0$?* Estimer pour le même pendule l'écart entre deux niveau d'énergie et lui associer l'écart entre deux l'amplitude d'oscillation des deux états. Peut-on parler de continuum?

On s'intéresse maintenant à un oscillateur quelconque (possiblement microscopique) et à la fonction d'onde.

1. Observer l'animation ci-après et commenter brièvement la densité de probabilité en fonction du nombre quantique. On s'intéressera notamment à interprêter les variations aux nombres quantiques ainsi que l'annulation de la densité de probabilité en certains points .
2. On considère le modèle classique d'un oscillateur harmonique possédant une énergie mécanique E. Rappeler l'expression de $v(t)$.
3. L'oscillateur est dans le noir est on prend aléatoirement une photo (avec flash) du montage pour situer le mobile. Expliquer, grâce à $v(t)$ si la probabilité de présence de l'oscillateur sur la photo serra plus plus grande au centre ou sur les côtés .
4. On s'intéresse maintenant à l'oscillateur quantique. Comparer la probabilité de présence pour $n = 1$ avec

le cas classique .

5. Faire la même comparaison pour un grand nombre quantique. Commenter.



Point utile pour cet exercice

- $\Longrightarrow$ *Energie mécanique.*
- $\Longrightarrow$ *Oscillateur harmonique classique.*