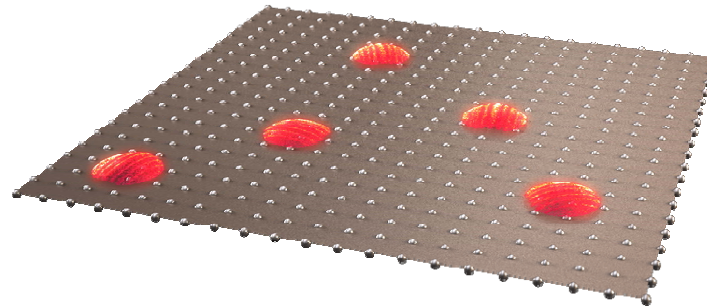


# Phénomènes Quantiques et Statistiques<sup>1</sup>

Application aux électrons dans les solides



**Panagiota MORFOULI**

[Panagiota.morfouli@phelma.grenoble-inp.fr](mailto:Panagiota.morfouli@phelma.grenoble-inp.fr)

IMEP-LAHC  
Tel : 04 56 52 95 55  
Bureau : 432  
Minatec

I. Phénomènes quantiques

II. Puits et barrières de potentiel

III. Physique Statistique et Thermodynamique

IV. Système isolé à l'équilibre

V. Système en équilibre avec un thermostat

VI. Gaz Parfait

VII. Electrons dans les solides

C. Ngô et H. Ngô, *Physique quantique - introduction*, Masson (1991)

C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique*, ed. Hermann Paris (1977)

J.L. Basdevant, *Mécanique quantique - Cours de l'X*, ed. Ellipses Paris (1986)

S. Brandt et H. Dahmen, *The picture book of quantum mechanics*, ed. Springer-Verlag Berlin (1994)

R. Feynmann, *The Feynmann lectures on physics*, ed. Addison-Wesley London (1965)

J.M. Lévy-Leblond et F. Balibar, *Quantique - Rudiments*, ed. CNRS Paris (1994)

F. Mandl, *Quantum mechanics*, ed. Wiley (1992)

E. Belorizky, *Les phénomènes quantiques*, ed. Nathan Paris (1997)

J.L. Rivail, *Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes*, ed. CNRS Paris (1994)

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/fr/>

## Physique Statistique

D.V. Schroeder, *Introduction to thermal physics*, Addison-Wesley (2000)

[C. Ngô et H. Ngô, \*Physique statistique\*, Dunod \(1998\)](#)

R. Feynman, *The Feynman lectures on physics - vol. 3*, Addison-Wesley (1965)

[B. Diu, C. Guthman, D.Lederer et B. Roulet, \*Physique statistique\*, Hermann \(1989\)](#)

C. Kittel, H. Kroemer, *Thermal Physics*, 2<sup>nd</sup> édition, Freeman (1980)

D. Chandler, *Introduction to modern statistical mechanics*, Oxford University Press (1987)

# I. Phénomènes quantiques

## I.1. Introduction

### I.1.1 Historique

### I.1.2 Les dilemmes du début XX<sup>ème</sup> siècle

- \* corps noir
- \* effet photoélectrique
- \* l'instabilité des atomes

## I.2. La dualité onde-corpuscule

### I.2.1. Diffraction par des fentes de Young

- \* Relations d'incertitude d'Heisenberg

### I.2.2. Onde, particule et fonction d'onde

## I.3. Description ondulatoire des particules

### I.3.1. Equation de Schrödinger

### I.3.2. La grandeur physique énergie

## I.4. Le spin - Expérience de Stern et Gerlach

### Une rupture conceptuelle

Compréhension de la structure de la matière - stabilité de la matière (particules, atomes, molécules, solides...), de la nature de la lumière, de l'interaction matière - lumière...

Théorie du comment et non pas du pourquoi !!!!

### Des concepts à la technologie

- Révolution technologique : transistor, circuits intégrés, laser, nanotechnologies (manipulation des atomes) ...
- Vers l'ordinateur quantique (traiter l'information de façon parallèle et non pas séquentielle), la cryptographie ou « camouflage » quantique (la clé de décryptage est transportée par les photons polarisés d'une façon aléatoire et qui changent d'état s'ils sont observés) ...

## I.1.1. Historique

**Jusqu'à la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle**

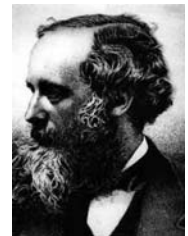
Vision déterministe basée sur la notion de la causalité.



(1642-1727)

Les physiciens disposaient de **2 grandes théories** pour décrire :

- la physique de la matière → Mécanique Newtonnienne ou classique (1687)
- la physique du rayonnement → Equations de Maxwell (1864)



(1831-1879)

**Au début du XX<sup>ème</sup> siècle**

La mécanique classique **ne s'applique pas** aux particules de petite taille

(taille atomique ou subatomique)

- instabilité des atomes prédite par la mécanique classique
- spectre d'émission des atomes discontinu en opposition avec la mécanique classique
- moment cinétique des atomes discontinu ( $L = mvr$ )

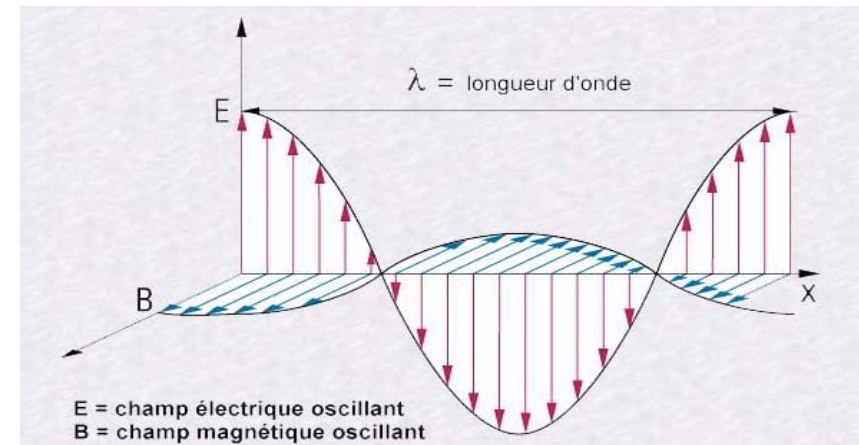
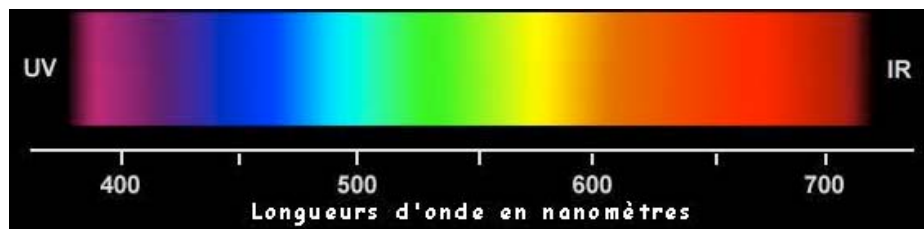
La physique du rayonnement atteint ses limites

- ne permet pas de reproduire le rayonnement du corps noir
- ne permet pas d'expliquer l'effet photoélectrique ...



# Que sait-on à la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle ?

- La lumière (rayons X, ultraviolet, visible, infrarouge) *n'est pas un jet de corpuscules qui rebondissent lors de la réflexion sur un miroir comme il le pensait Newton* mais elle se propage à travers l'espace sous forme d'une onde électromagnétique; car *on observe des phénomènes propres aux ondes, comme la réflexion, la réfraction, les interférences.*
- L'électron et le proton sont connus.
- Le neutron *n'est pas connu*, il ne sera découvert qu'en 1932 par James Chadwick (1891-1974), prix Nobel en 1935.
- La réalité de l'atome est admise, mais sa structure n'est pas connue précisément.

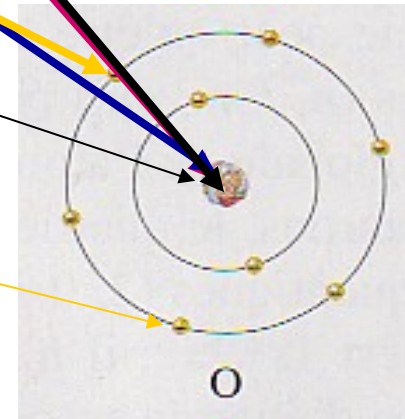
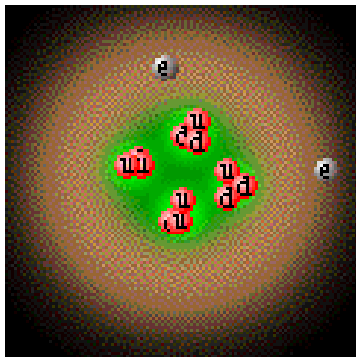


# Quelles sont les idées généralement admises encore aujourd'hui par le grand public au sujet de l'atome ?

10

- L'atome est composé d'un noyau autour duquel tournent des électrons.
- Dans le noyau, il y a des **protons** qui ont une charge électrique positive et des **neutrons** sans charge électrique.
- Les **électrons** qui orbitent autour du noyau ont une charge électrique négative.
- Les **protons** attirent les **électrons** et vice et versa.
- Il y a autant d'**électrons** autour du noyau que de **protons** dans le noyau (l'atome est neutre).
- Selon ces idées, voici l'oxygène : 8 **protons** et 8 **neutrons** dans le noyau et 8 **électrons** qui sont en orbite autour du noyau.

**Mais toutes ces idées méritent d'être corrigées...**



octobre 1900:

résout l'énigme de l'émission radiative  
d'un corps noir

**Max Planck**



A l'époque, l'énigme est appelée la catastrophe  
ultraviolette !

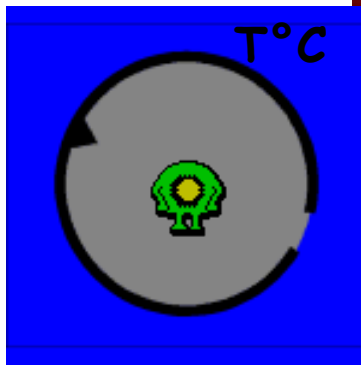
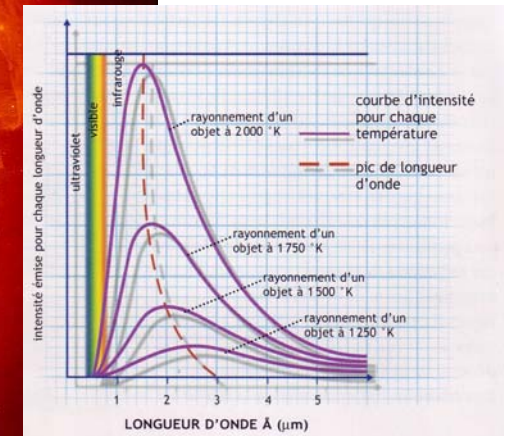


### Qu'est-ce qu'un corps noir ?

C'est un corps  
qui absorbe toute l'énergie  
qu'il reçoit (càd aucune  
réflexion)

L'énergie qu'il émet sous  
forme de rayonnement dépend  
de sa température !

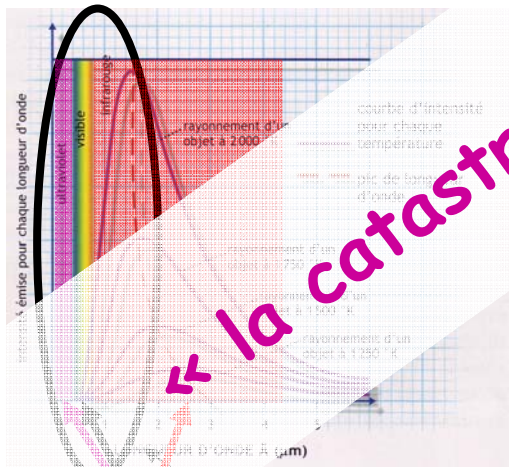
Exemple : Le soleil ! (6000 °K)



# A la fin du 19<sup>ème</sup> siècle ... il y a un sacré problème !!

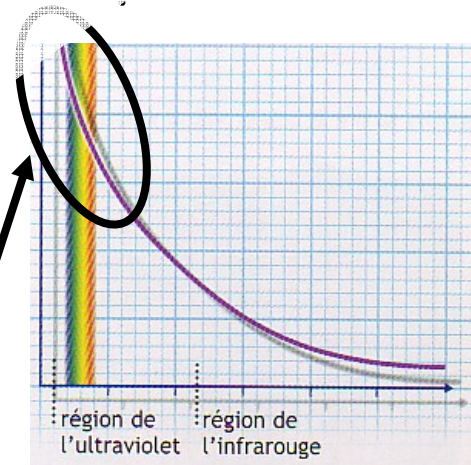
- Les théories classiques en vigueur ne parviennent pas à expliquer les observations faites sur l'émission de l'énergie par un corps noir  
(loi de Stefan :  $U \propto T^4$ , loi de Rayleigh-Jeans :  $U = 8 \pi \nu^2 kT / c^3$ , loi de Wien :  $\lambda_{\max} \propto 1/T$ ).

Les observations:



Domaine des UV  
Or dans les faits, ce  
n'est pas le cas !!

Les prédictions théoriques:



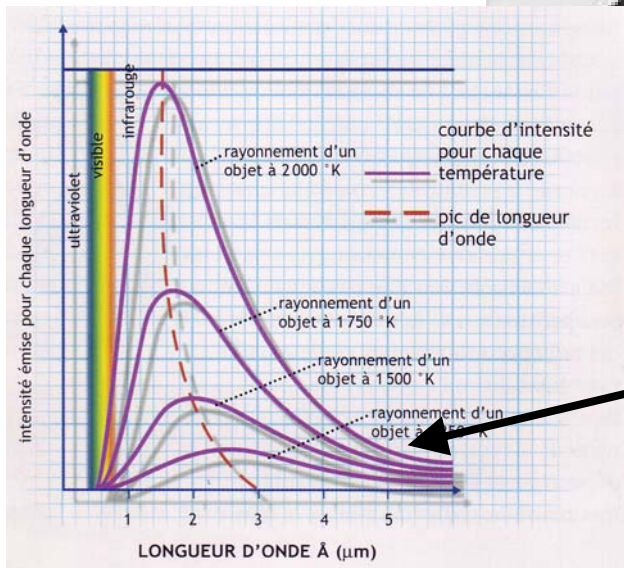
D'après la théorie, l'intensité du rayonnement devrait croître lorsque la longueur d'onde diminue !

Octobre 1900: en s'appuyant sur les travaux de Wien (loi de Wien), Max Planck trouve une **équation** qui rend compte des observations (déduite d'une statistique quantique : la statistique de phonons)

h ???

$$U_{\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} e^{-\left(\frac{hc}{\lambda k_B T} - 1\right)}$$

Loi statistique

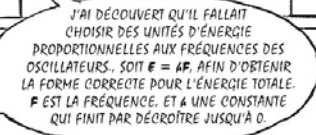




Mais, à une différence très importante

- Pour les interactions matière-rayonnement, il doit considérer des portions d'énergie proportionnelles à la fréquence, Méthode suivie par Boltz

Principes d'équipartition  
à tous les degrés de lib  
L'état le plus probable  
s'obtient avec le plus  
combinaisons différen  
moléculaire.



de « La physique sans  
le J.P. Mc Evoy & O. Zarate

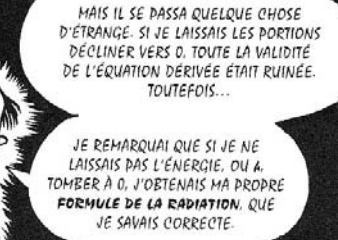


Image tirée de « La physique sans  
aspirine » de J.P. Mc Evoy & O. Zarate

qu'il considère sont proportionnelles à la  
ne peuvent pas être plus petites que la valeur

## h v

avec  $h = 0,000000000000000000000000000000006626 \text{ J s} !!$

---

**h : constante de Planck** déterminée en confrontant l'expérience de rayonnement du corps noir à sa théorie

$$h = 6,62.10^{-34} \text{ J.s}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05.10^{-34} \text{ J.s}$$

**Pour Planck** ceci n'était qu'un artifice mathématique !!!!!  
Son but étant de faire tendre sa valeur vers 0  
(c.à.d revenir vers une description continue)  
mais ...



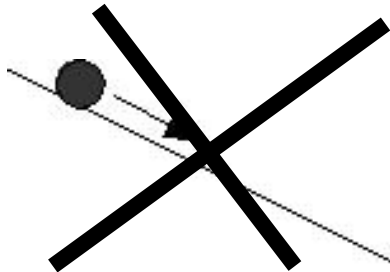
# Résumé : que sait-on de nouveau ?

---

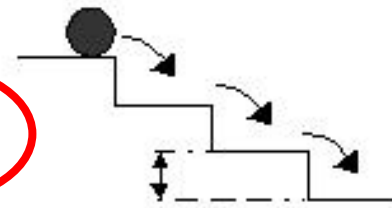
- Un corps noir rayonne son énergie par «bouffées» et non pas de façon continue.
- On peut traduire cela avec l'analogie suivante:

L'émission d'énergie est discontinue et chaque saut d'énergie vaut:

IMPOSSIBLE !



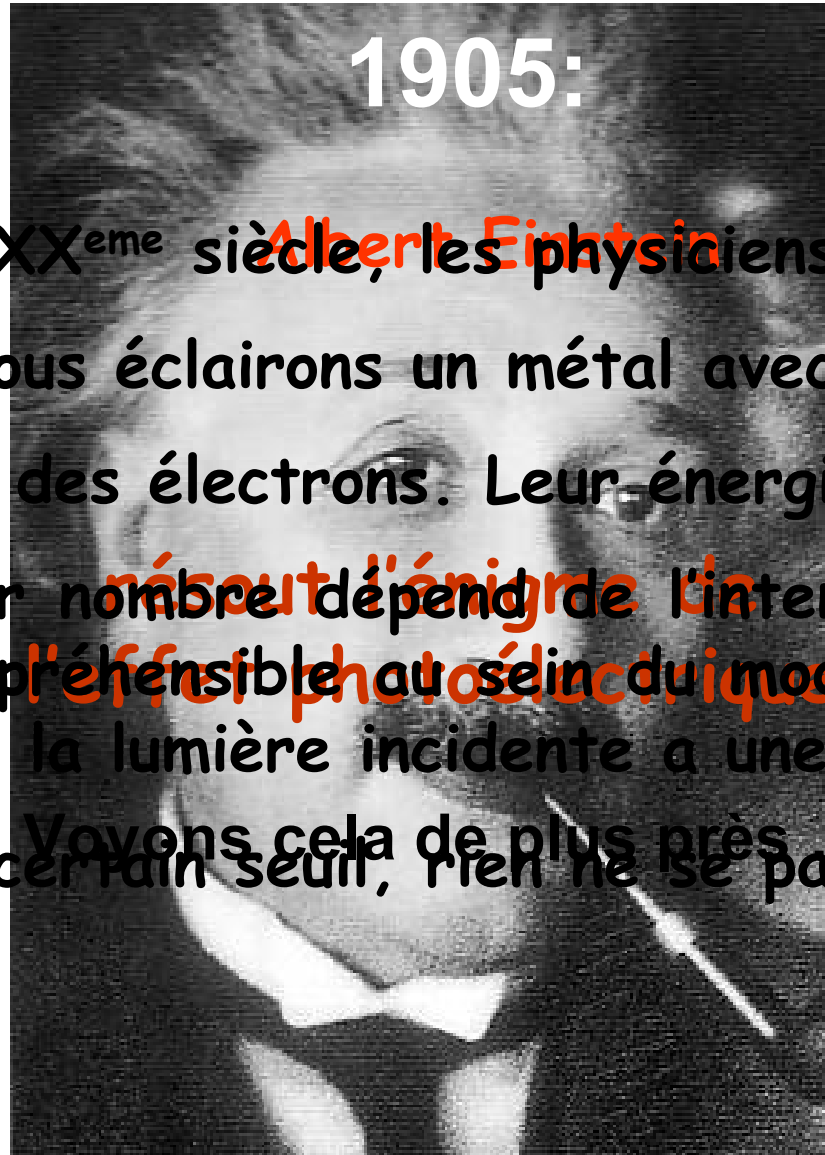
$h \nu$



- Planck pense que ces sauts sont une propriété «interne» des atomes et non pas du rayonnement lui-même.

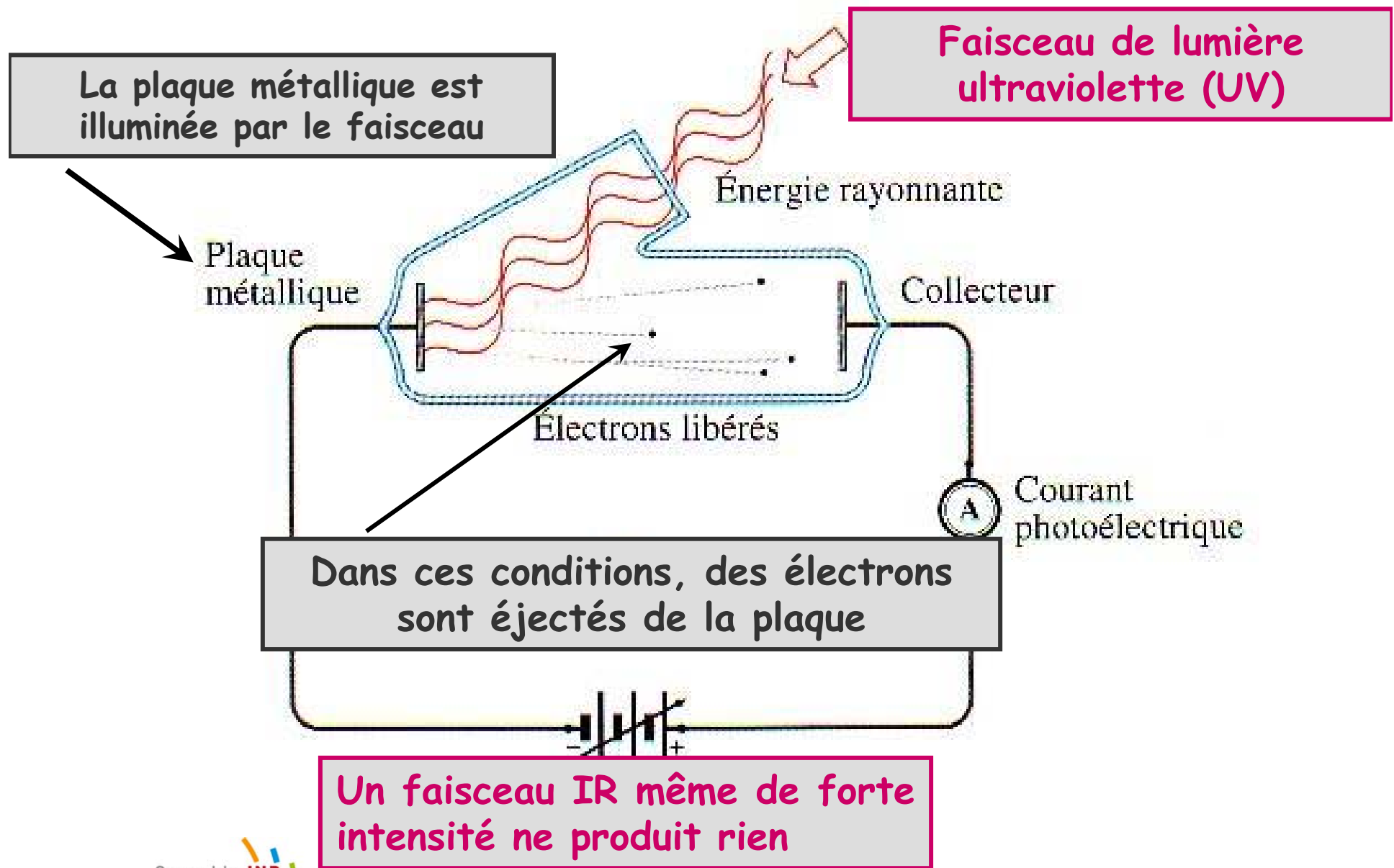
1905:

Au début du XX<sup>ème</sup> siècle, les physiciens ont remarqué que lorsque nous éclairons un métal avec une lumière, celui-ci émet des électrons. Leur énergie dépend de  $\lambda$ , mais seul leur nombre dépend de l'intensité lumineuse, ce qui est incompréhensible au sein du modèle ondulatoire de la lumière. Si la lumière incidente a une fréquence en dessous d'un certain seuil, rien ne se passe.



# Description succincte de l'effet photoélectrique

19



## Et voici ce que montrent les mesures faites avec ce dispositif<sup>70</sup>

- Le nombre d'électrons éjectés croît lorsque l'intensité du faisceau augmente, ce qui n'étonne personne.
- Par contre, quelque chose reste inexpliqué par la théorie :  
**La vitesse d'éjection des électrons ne dépend pas de l'intensité du faisceau**  
Dans le cas d'un faisceau monochromatique, c'est-à-dire composé d'une seule fréquence (par exemple de la lumière ultraviolette)
- Tant que des électrons sont éjectés de la plaque, ils s'en échappent toujours avec la même vitesse, même à très faible intensité de la lumière incidente !
- De plus, **cette vitesse d'éjection ne dépend que de la fréquence du rayonnement monochromatique** ! Si la fréquence augmente, alors la vitesse d'éjection augmente aussi !
- Enfin, **en dessous d'une fréquence minimum aucun électron n'est éjecté** quelle que soit l'intensité du faisceau !

Comment est-ce possible que  
la vitesse d'éjection des  
électrons ne dépende que de la  
fréquence et pas du tout de  
l'intensité ?



J'ai cherché à calculer l'énergie associée à une onde monochromatique de haute fréquence.

J'ai tenu compte des travaux de Wien (loi de Wien valable aux hautes fréquences) et de ceux de Boltzmann (relation statistique basée sur la probabilité d'obtenir un état macroscopique donné).

En suivant cette approche, j'ai obtenu que  $E = n h \nu$ . Ainsi d'un point de vue théorique tout se passe comme si l'énergie contenue dans le faisceau était quantifiée avec la valeur  $h \nu$  !

Je postule donc que toute lumière voyage par paquets d'énergie égaux à  $E = h \nu$ .

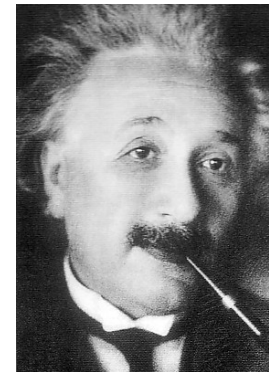
**Le photon de lumière est né !** (prix Nobel en 1921)



Selon Planck :  
les interactions  
matière - rayonnement se  
font par quanta d'énergie.



Selon Einstein :  
la lumière est constituée  
de quanta d'énergie



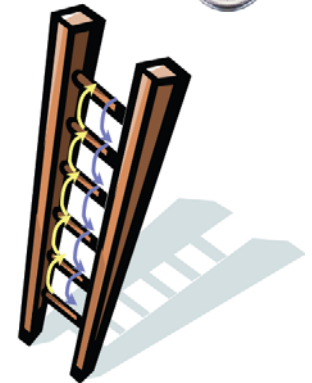


que sait-on de nouveau à la fin de l'année 1905 ?<sup>24</sup>

- La lumière est émise par la matière de façon discontinue.
- La lumière se compose de paquets d'énergie; le mot photon n'apparaît en fait qu'en 1923.
- La lumière est absorbée par la matière de façon discontinue.
- La lumière a donc un comportement MIXTE que l'on peut expliquer très grossièrement comme ceci:
- Lorsqu'elle «voyage», elle se comporte comme une onde.
- Lorsqu'elle interagit avec la matière, elle se comporte comme des particules (= paquets d'énergie).



$h \nu$

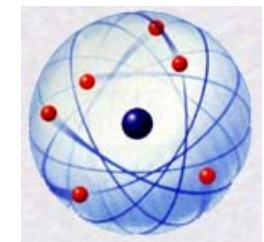
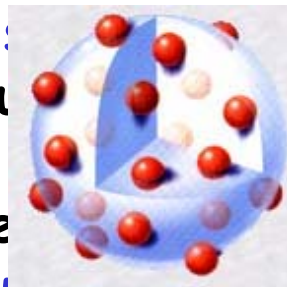
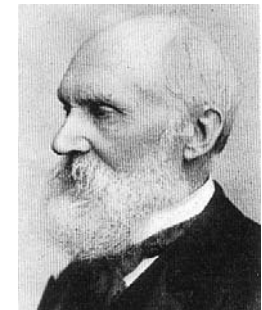
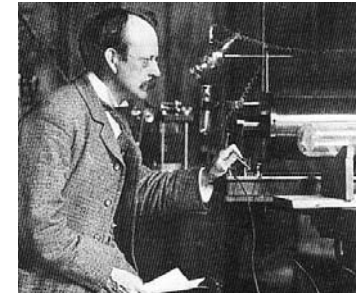


Avec  $h = 0,00000000000000000000000006626 \text{ J s}$

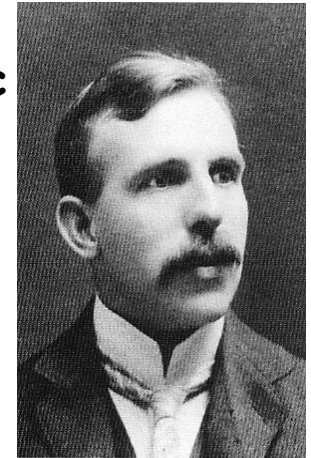


### L'instabilité des atomes

- En 1899, J.J. Thomson, prix Nobel en 1906, parvient à confirmer expérimentalement l'existence de l'électron (mesure du rapport  $e/m$ , 1000 fois supérieur à celui du proton).
- A l'époque le proton est déjà connu, c'est le noyau de l'atome d' $H_2$ .
- Les physiciens cherchent alors à comprendre la structure de l'atome.
- En 1902, Lord Kelvin (1824-1907) propose l'idée d'une sphère de «gelée» positive avec des électrons incrustés à l'intérieur.
- J.J. Thomson pense que les électrons doivent bouger à l'intérieur du modèle en sphère les électrons (modèle : « plum-pudding »).
- En 1910 par une méthode nouvelle, E. Rutherford va condamner le modèle de la «gelée» positive !



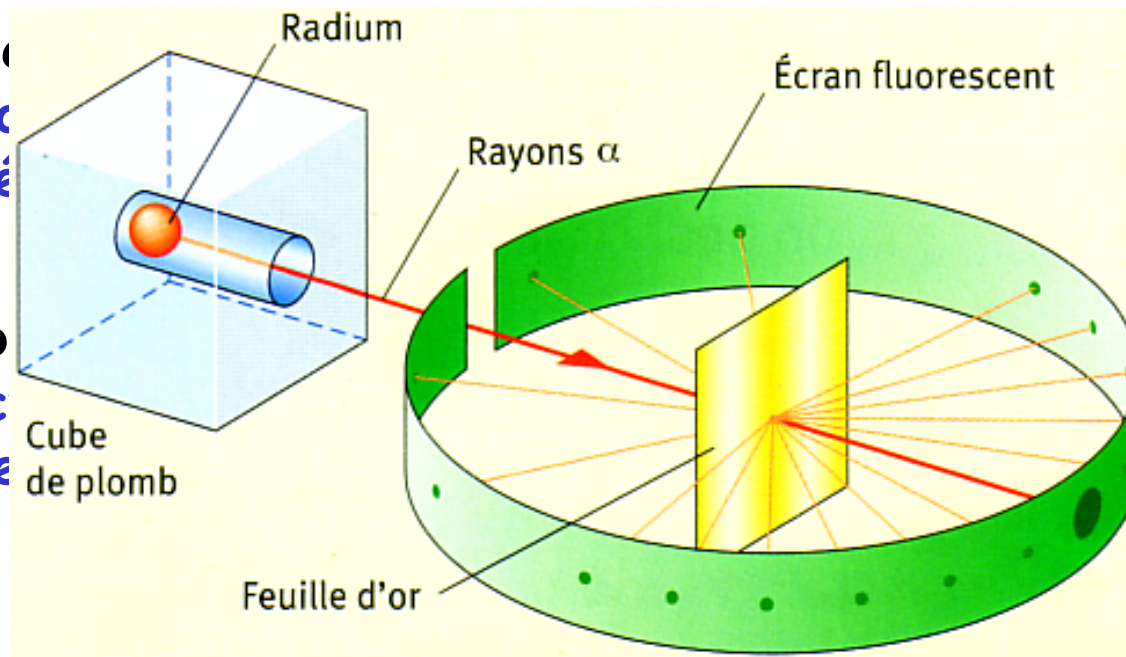
- En 1910, Ernest Rutherford (prix Nobel de chimie en 1908) bombarde une mince feuille d'or (épaisseur environ  $10^{-4}$  mm) avec des particules alpha (il observe sur un écran fluorescent la trajectoire suivie par les particules)



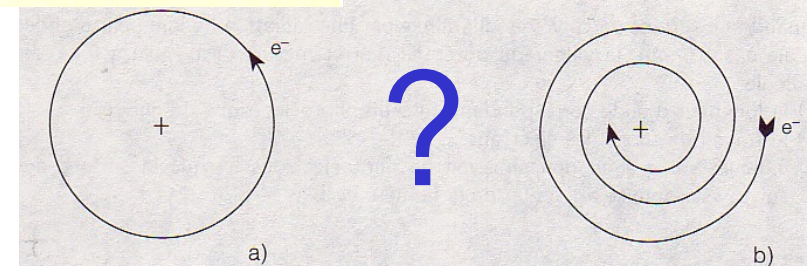
Rutherford

- Avec ce modèle de l'atome, les électrons devraient perdre leur énergie

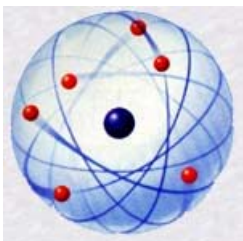
- Le problème est que les électrons devraient perdre leur énergie



En tel modèle, les électrons devraient perdre leur énergie (l'instabilité de l'atome)



Or, ce n'est pas le cas !



1913 - 1920:

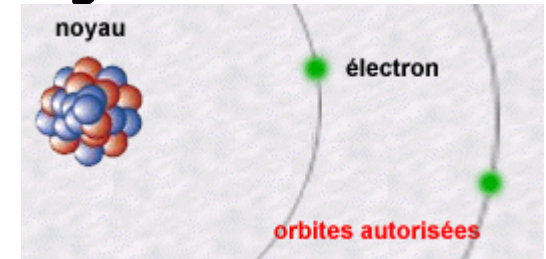
En 1913, Niels Bohr propose un modèle pour l'atome d'hydrogène (noyau formé d'un proton avec un électron en orbite) basé sur le concept de l'énergie quantifiée.

Puis d'autres physiciens (de Broglie, Pauli, Heisenberg, Schrödinger, ...) contribuent à améliorer la compréhension du comportement des électrons atomiques.

# Quelle est l'idée de base de Niels Bohr ?

28

- Il propose de quantifier les orbites sur lesquelles l'unique électron de l'hydrogène peut se trouver selon son état d'énergie.



- Il définit que ces orbites doivent satisfaire au critère suivant:

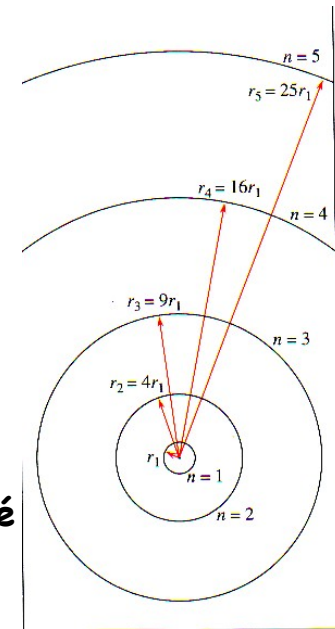
L'électron se trouve sur une orbite dans un état stationnaire lorsque son moment cinétique est un multiple entier d'une constante

$$m v r = \textcolor{red}{n} \hbar / 2\pi = \textcolor{red}{n} \hbar \text{ avec } n = 1, 2, 3, \dots$$

$n$  est le nombre quantique principal.

$$\frac{m v^2}{r} (\text{centripète}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} (\text{coulombienne}) \Rightarrow r = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} = n^2 a \quad r : \text{quantifié}$$

$$n = 1 \rightarrow r_1 = a_1 = 52,9 \text{ pm} : \text{rayon de Bohr}$$



Réf. : Physique de E. Hecht p. 1134

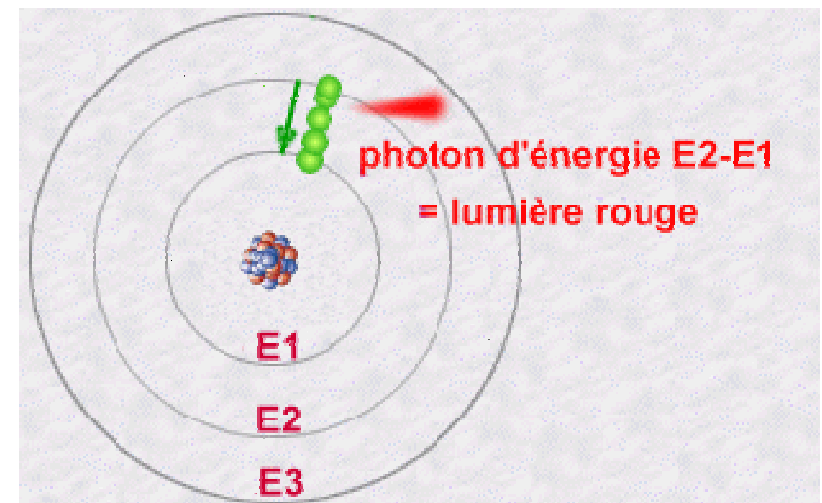
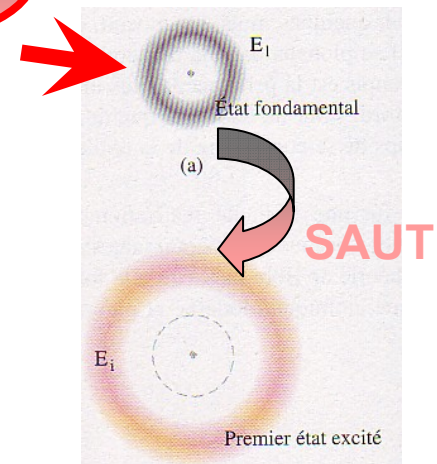


# Quelle est l'idée de base de Niels Bohr ?

29

- Lorsqu'un électron **RECOIT de l'énergie de l'extérieur** (énergie lumineuse, électrique, thermique, ...), il « **saute** » vers une **orbite supérieure**, ce qui correspond à une augmentation du nombre  $n$ .
- Lorsqu'un électron **PERD de l'énergie**, il le fait « **par saut** » et il **émet TOUJOURS un photon** :
- En principe un électron ne reste pas dans un état excité, il retourne donc à un état énergétiquement plus bas en émettant un photon dont la fréquence est définie par l'énergie perdue égale à  $E_2 - E_1 = \Delta n h \nu$

Réf. : Physique de E. Hecht p. 1132



Ce modèle permet de calculer la valeur des sauts d'énergie<sup>30</sup>  
possibles pour l'hydrogène

---

le modèle de Bohr contient une ambiguïté !

- Tant que l'électron reste sur son orbite, il obéit aux lois de Newton (physique classique).
- Mais quand il change d'orbite, il obéit aux lois de Planck et Einstein (physique des quantas) !

# I.1. Introduction

## I.1.1 Historique

## I.1.2 Les dilemmes du début XX<sup>ème</sup> siècle

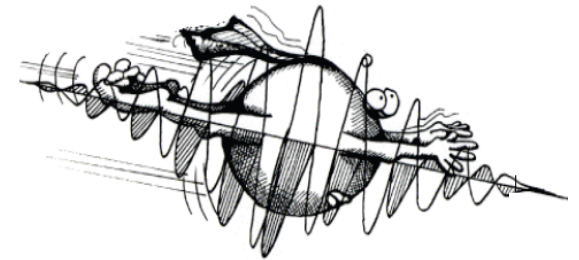
- \* corps noir
- \* effet photoélectrique
- \* l'instabilité des atomes

# I.2. La dualité onde-corpuscule

## I.2.1. Diffraction par des fentes de Young

- \* Relations d'incertitude d'Heisenberg

## I.2.2. Onde, particule et fonction d'onde



# I.3. Description ondulatoire des particules

## I.3.1. Equation de Schrödinger

## I.3.2. La grandeur physique énergie

# I.4. Le spin - Expérience de Stern et Gerlach

## I.2. La dualité onde - corpuscule

---

32

comment un même objet peut apparaître sous deux formes aussi contradictoires



<http://www.upscale.utoronto.ca/GeneralInterest/Harrison/Flash>



## I.2. La dualité onde - corpuscule

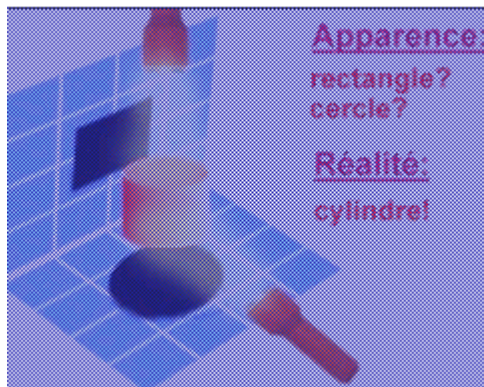
---

33

L'ancienne physique, dite classique, distingue deux sortes d'entités fondamentales:

- **les corpuscules** (billes microscopiques),
- **les ondes**, (propagation dans l'espace un peu comme une vague sur la mer).

La physique quantique considère que les objets ne sont ni des corpuscules, ni des ondes.



**Analogie :**

un cylindre regardé sous deux angles différents apparaît tantôt comme un cercle, tantôt comme un rectangle.

Pourtant il n'est ni l'un ni l'autre.

**Ainsi en est-il de toute particule élémentaire.**



Ce point précis peut poser un problème philosophique très troublant:

La réalité objective (s'il elle existe indépendamment de l'esprit humain) **est-elle accessible ?**

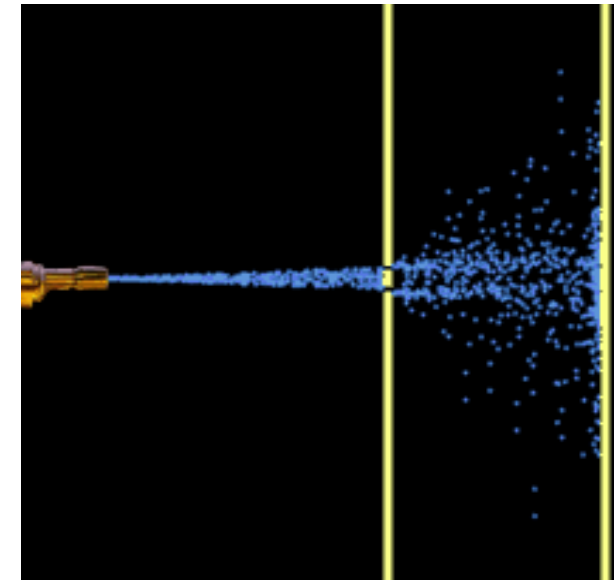
**Ou sommes-nous condamner à n'observer qu'un monde d'apparences trompeuses?**

## I.2.1. Diffraction par les fentes de Young

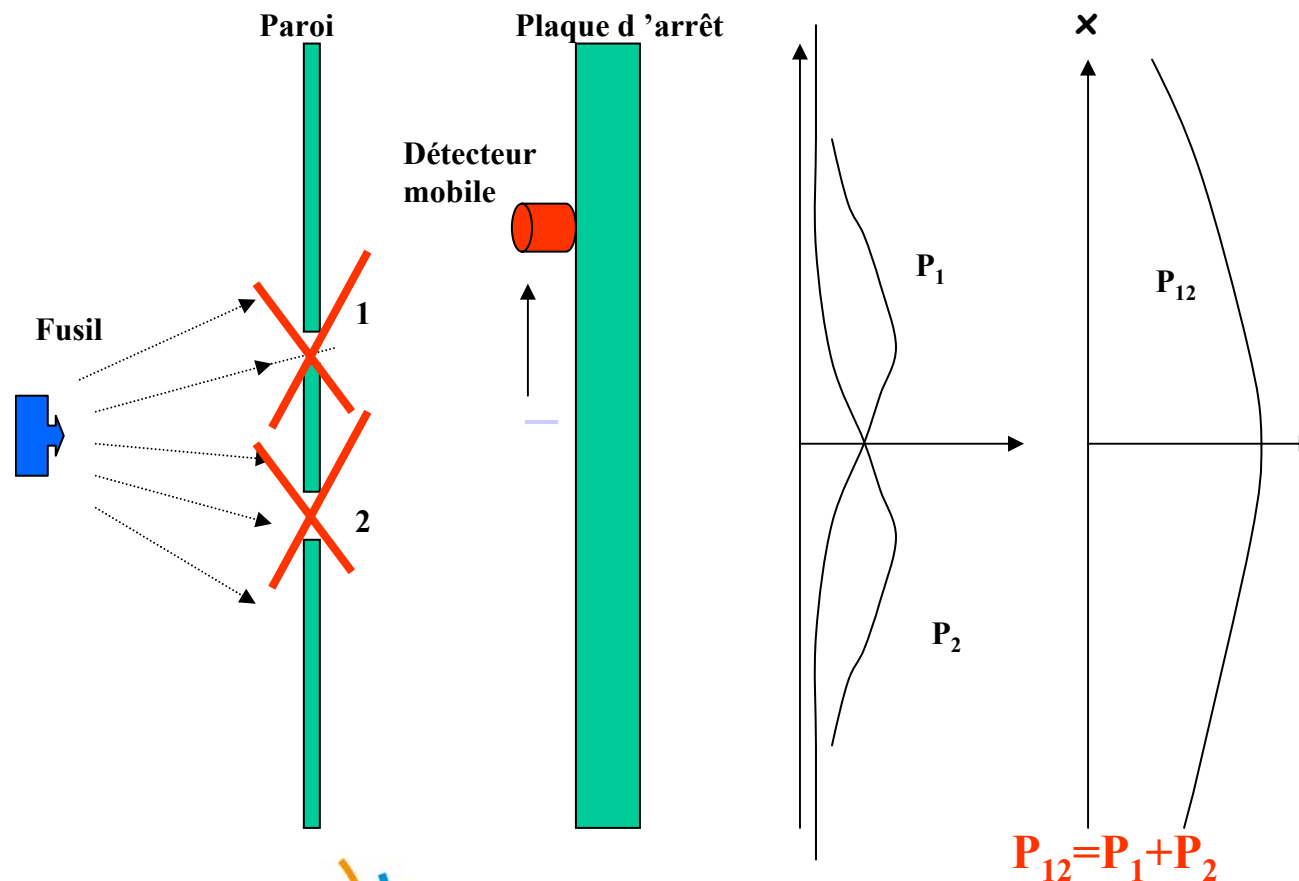
Pour essayer de comprendre le comportement quantique des électrons

### 1<sup>ère</sup> expérience

Un fusil qui tire une série de coups - dispersion aléatoire des balles (l'arme n'est pas de bonne qualité)



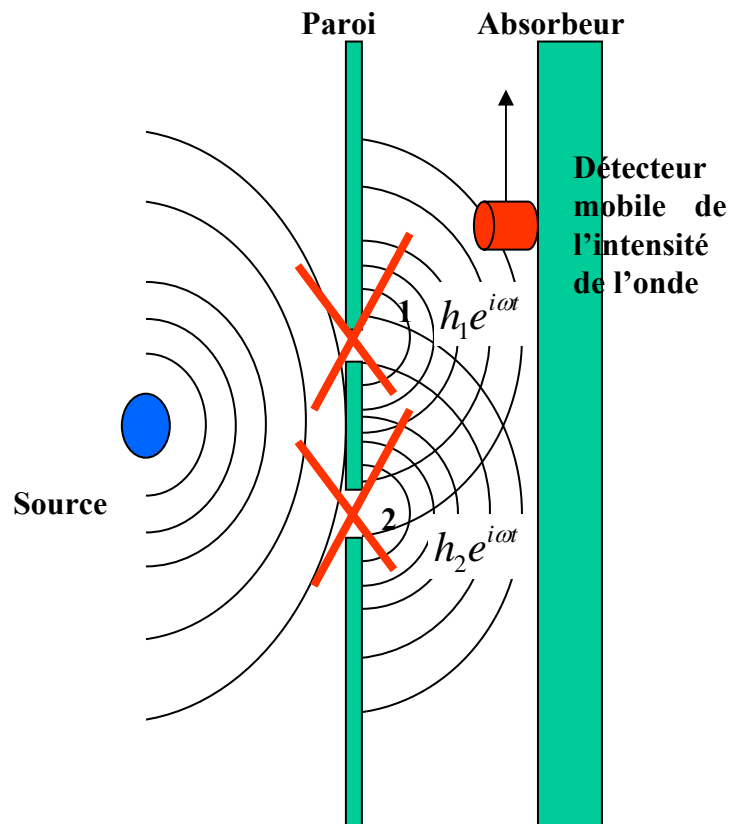
Pour un intervalle de temps donné, quelle est la probabilité pour qu'une balle qui est passée à travers un trou puisse arriver sur la plaque à une distance  $x$  du centre.



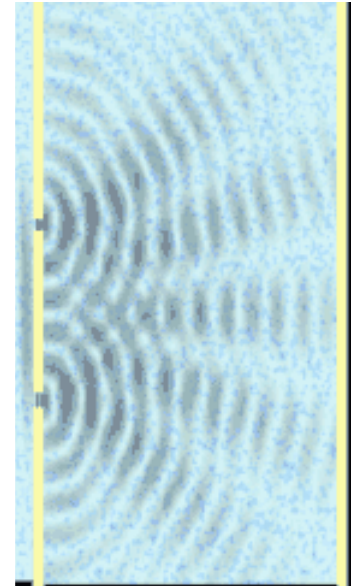
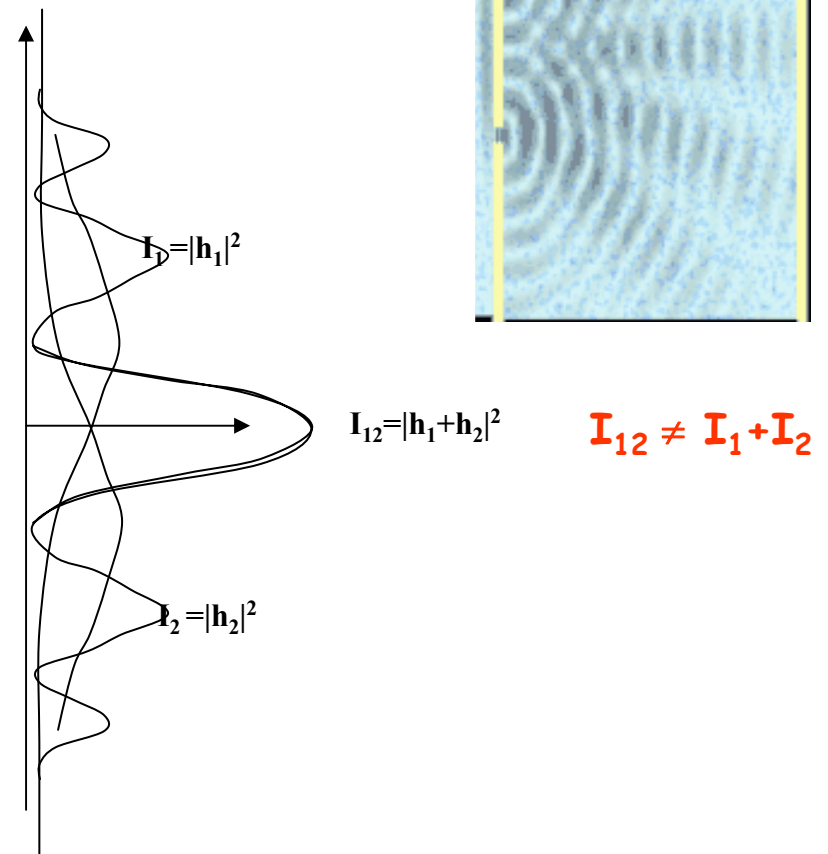
Réponse facile

### 2<sup>ème</sup> expérience

Une source d'ondes dans l'eau



### interférences

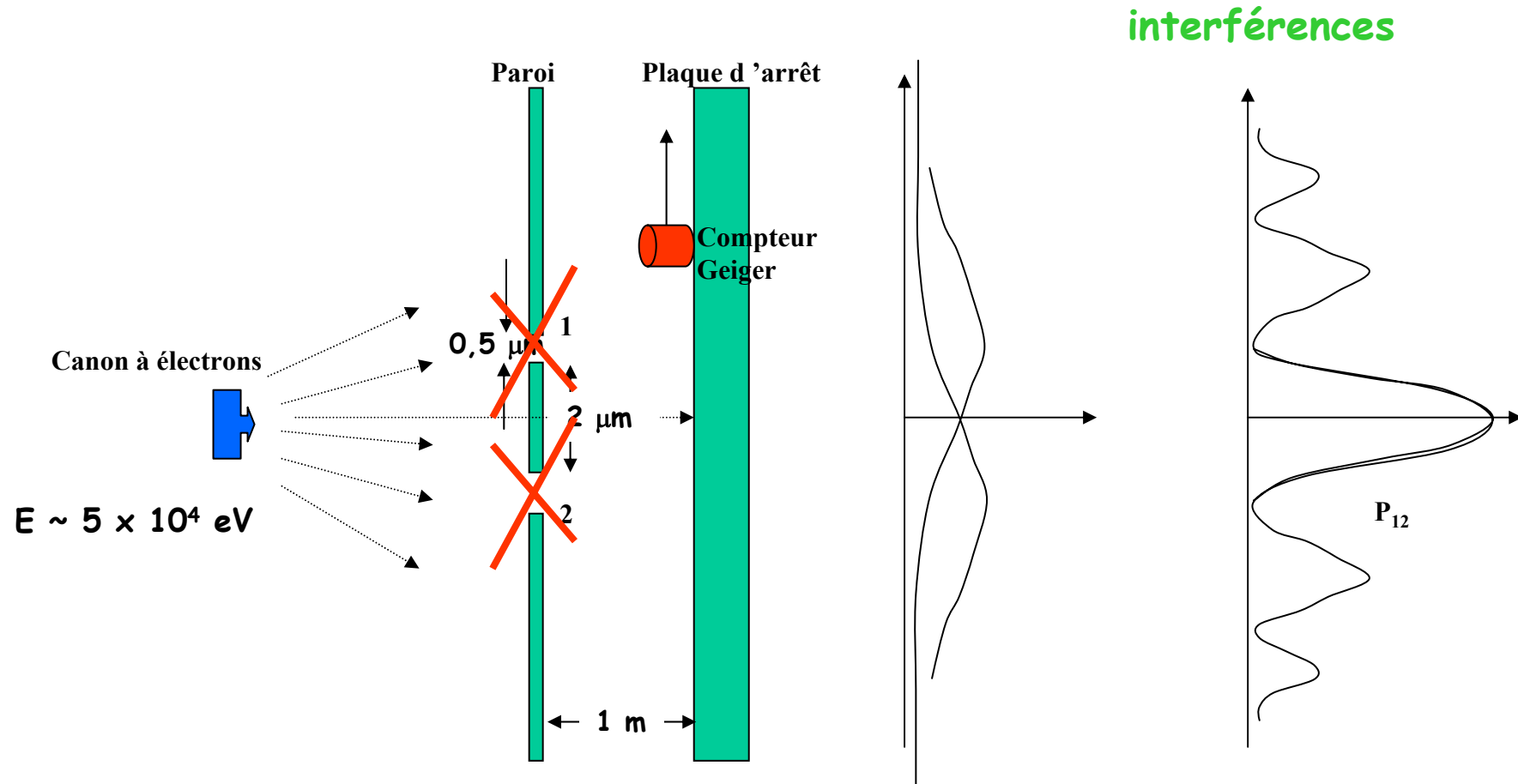


## I.2.1. Diffraction par les fentes de Young

36

### 3<sup>ème</sup> expérience

Une source d 'électrons - filament chauffé

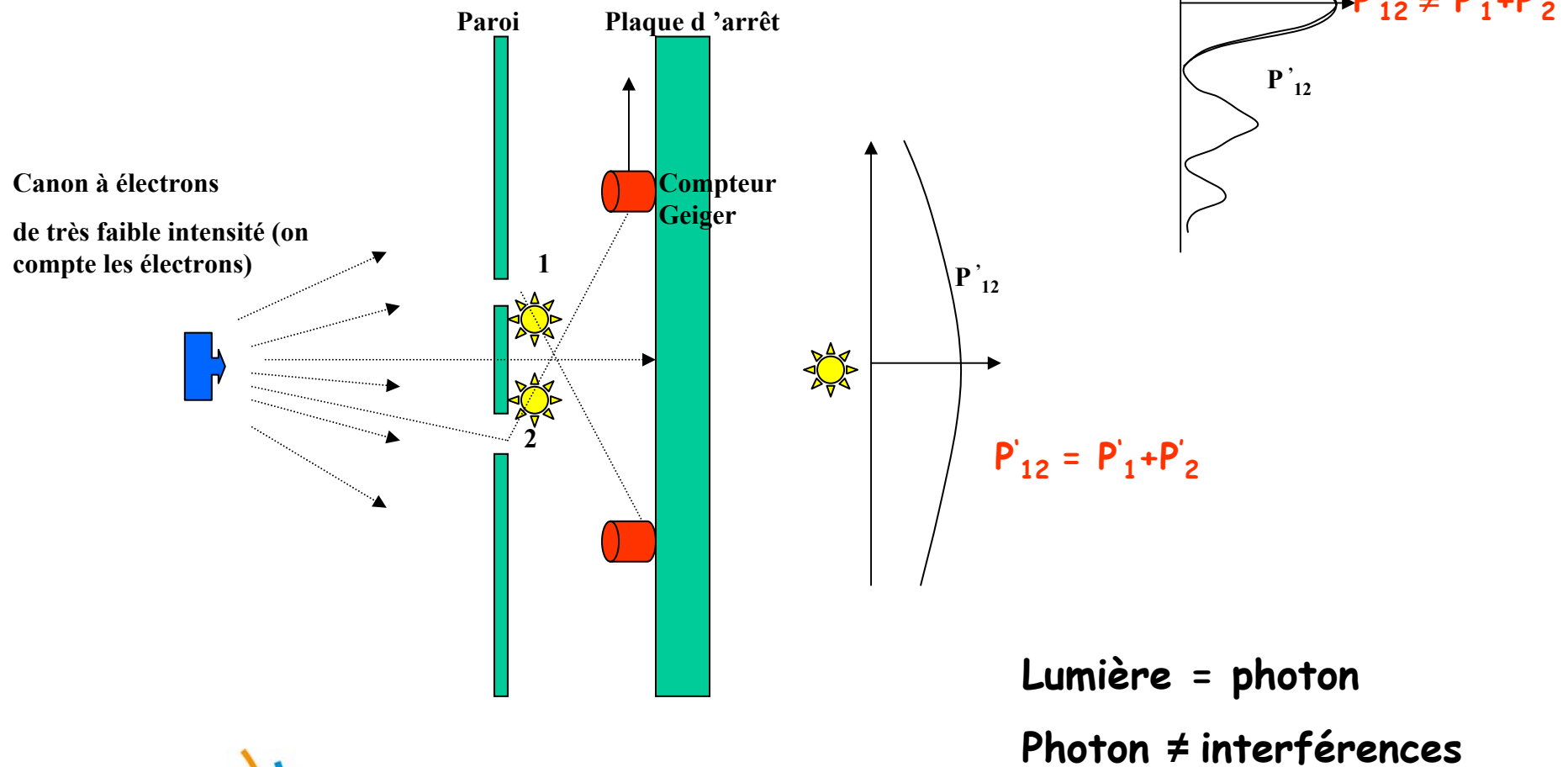


[http://www.kfunigraz.ac.at/imawww/vqm/pages/samples/104\\_18a.html](http://www.kfunigraz.ac.at/imawww/vqm/pages/samples/104_18a.html)

### Et en observant les électrons

Forte source de lumière derrière la plaque

(les charges électriques diffusent la lumière)

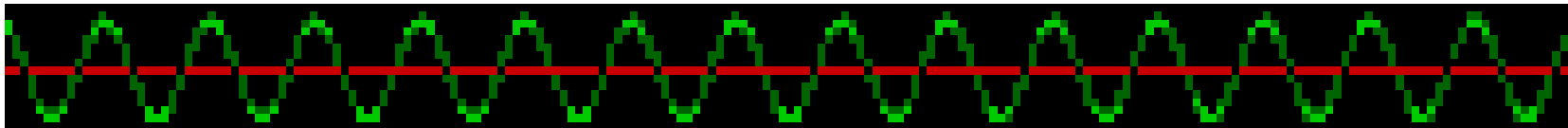


---

Un électron n'est pas une particule

 $E, p$ 

Un électron n'est pas une onde

 $A, \omega, k$ 

Un électron c'est les deux à la fois



## I.2.1. Relations d'incertitude de Heisenberg - 1927

39

### Comment observer un électron ?

On ne peut observer quelque chose qu'en l'éclairant avec de la lumière.

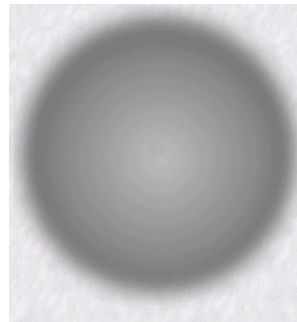


Werner Karl Heisenberg

Prix Nobel de Physique en 1932

orbitale électronique

*nature ondulatoire*



électron observé

*nature corpusculaire*



T41

Il est impossible de déterminer avec précision et simultanément la position et la vitesse d'une particule comme l'électron. La notion de trajectoire exacte n'a pas de sens pour les particules. Ce paradoxe quantique (*encore un !*) n'est pas un principe, c'est juste une conséquence.

T43

T42



Imaginons : La nuit au fond des bois, un amoureux de la nature entend le hululement d'un hibou. S'il veut, en même temps, voir le volatile, il devra braquer sur lui une lampe torche: Il est à parier que le hibou, ébloui, arrêtera son chant. D'où le dilemme insoluble: On ne peut pas à la fois entendre et voir le hibou...Hélas!

- Il est impossible de mesurer et d'observer en même temps



la mesure perturbe de manière fondamentale le phénomène

(notion purement quantique)



## I.2.1. Relations d'incertitude de Heisenberg

41

- On admet que :

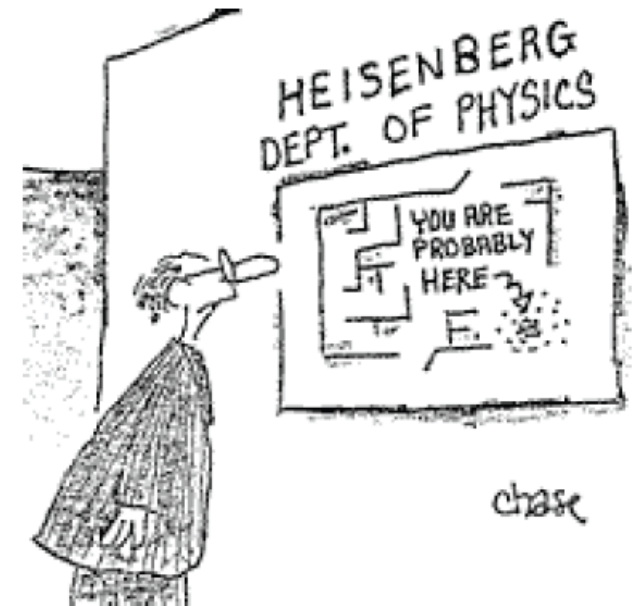
### Relations d'incertitude de Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Les relations d'Heisenberg se généralisent à 3D

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \end{array} \right.$$



- De même, il est impossible de mesurer l'énergie d'une particule à un instant donné:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Second relation d'incertitude d'Heisenberg

## I.2.2. Onde, particule et fonction d'onde

42


T44 En 1923, le prince Louis-Victor de Broglie a une idée géniale !

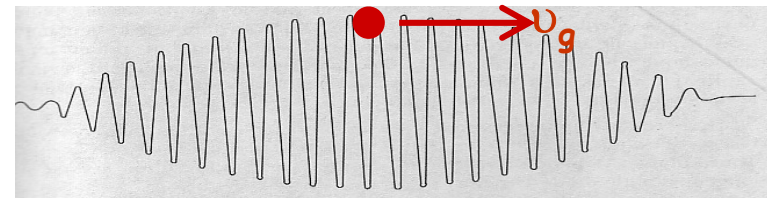
la suivante:



- Puisque les ondes électromagnétiques peuvent être considérées comme des corpuscules qui interagissent avec la matière (Einstein)... Pourquoi la réciproque ne serait-elle pas vraie !!!
- Louis-Victor de Broglie propose d'associer à toute particule de matière une onde dont la longueur  $\lambda$  est définie par :

$$\lambda = h / (m v_{\phi})$$

- En fait, la particule est associée à un groupe (ou paquet) d'ondes dont le maximum d'amplitude se déplace à la vitesse de la particule ! 



L'onde associée à la particule a un sens probabiliste

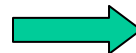
Particule



Fonction d'onde  $\Psi(r,t)$

L'onde est associée à la probabilité pour que la particule (photon, électrons...) se manifeste

Densité de probabilité de présence



$$|\Psi(r,t)|^2$$

## I.2.2. Onde, particule et fonction d'onde

44

- Notion de trajectoire remplacée par  Notion d'état d'une particule

L'état d'une particule est caractérisée par sa fonction d'onde  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  qui contient toutes les informations possibles sur la particule

- $\Psi(\mathbf{r}, t)$  est lié à la probabilité  $dP$  de trouver à l'instant  $t$  la particule dans un volume  $d^3r$  centré autour d'un point défini par le vecteur  $\mathbf{r}$

$$dP(\bar{\mathbf{r}}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \cdot d^3r$$

avec

$$\int_{\text{espace}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \cdot d^3r = 1$$

Car la particule doit bien être quelque part

Max Born (1924)

$\Psi(\mathbf{r}, t)$  est l'amplitude de probabilité de présence  
(pas de signification physique)

$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  est la densité de probabilité de présence





*Relations*

- de Planck-Einstein (photons)
- de De Broglie (particules)

On a aussi

Energie	$E = h \nu = \hbar \omega$
Impulsion (quantité de mouvement)	$p = \hbar k$

Photons	et	Particules
$\omega = ck$		$\omega = v_\phi k$
$\lambda = \frac{c}{\nu}$		$\lambda = \frac{v_\phi}{\nu}$

Dans le vide :  $v_\phi = v_g$  Si non :  $v_\phi = \frac{v_g}{2}$   $v_g = \frac{d\omega}{dk}$   $v_\phi$  : vitesse de phase  
 $v_g$  : vitesse de groupe

- Le développement de la Mécanique Quantique a permis d'expliquer correctement les propriétés des atomes, molécules, noyaux ....

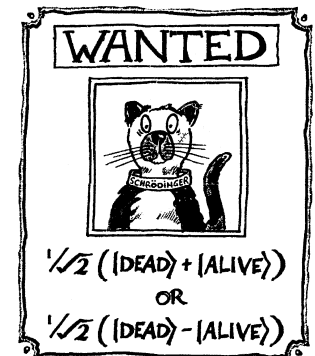
- Difficultés associées à la mécanique quantique

- ➔ pas d'expérience directe des propriétés des atomes
- ➔ pas d'analogie possible avec les systèmes macroscopiques (trajectoire par ex.)
- ➔ passer de la description en terme de position et de vitesse d'une particule à une description en fonction d'une probabilité de présence d'une particule
- ➔ remplacer le déterminisme absolu de la mécanique classique par un déterminisme de tendance pour la mécanique quantique.
- ➔ formulation très mathématique (nouvelle par rapport à ce que vous connaissez)



« Quiconque n'est pas choqué par la mécanique quantique ne la comprend pas »

- Niels Bohr



« La Physique Quantique, c'est un aveugle dans une pièce sombre qui cherche un chat noir qui n'existe pas! »



C'est une théorie démissionnaire, ayant renoncé à l'ambition de fournir des explications pour s'en tenir à la seule fonction *prédictive*.

A ce jour, aucune expérience n'est venue démentir ses prédictions, aussi étranges soient-elles.

La mécanique quantique n'est pas encore complète T48

Dieu ne joue  
pas aux dés



Albert Einstein, pour ne citer que lui, n'a jamais accepté certaines des conséquences de la théorie quantique (on ne peut pas par exemple expliquer correctement ce qui se passe lors d'une mesure...)

Prix Nobel de Physique en 1921

Einstein se méfie de la mécanique quantique et de son interprétation « **probabiliste** ».

Il refuse le point de vue de **Bohr** ;

« il est sans objet de parler d'un état quantique préalablement à toute mesure. **Tant qu'aucune mesure n'a été effectuée, l'état est indéterminé.** Lorsque la mesure est effectuée, **l'état est déterminé aléatoirement** »

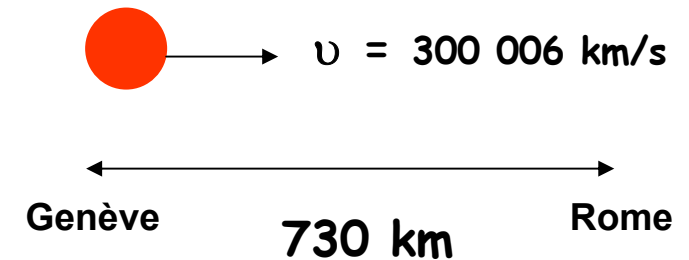
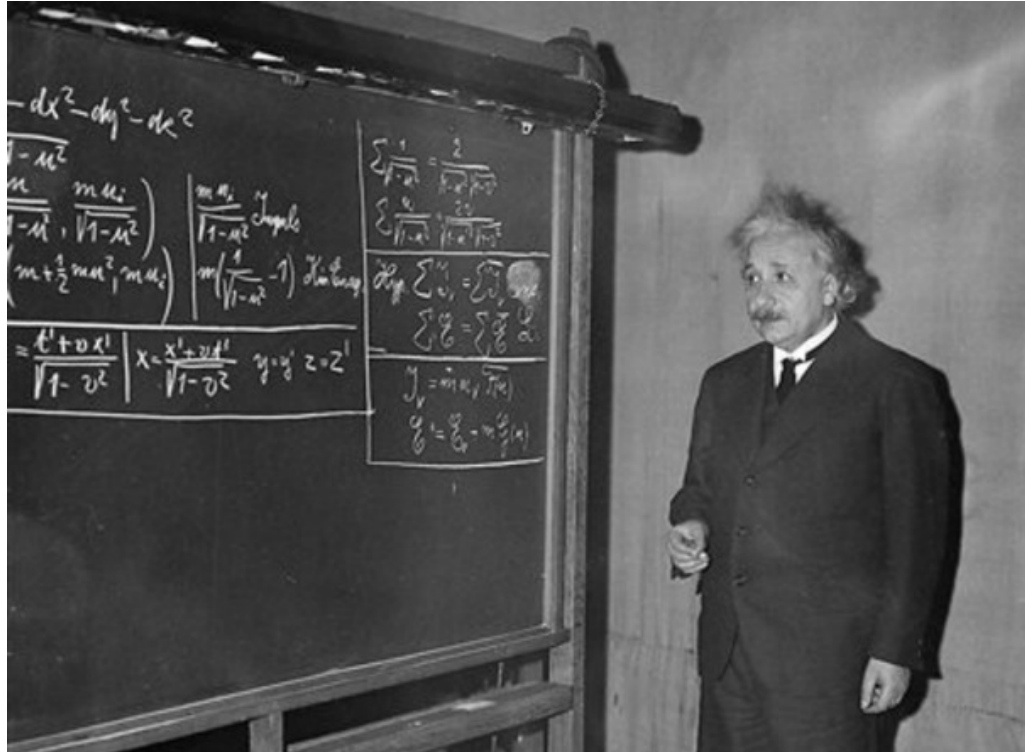
**Einstein** soutient que les états sont déterminés à tout moment, **même avant la mesure**. La mesure révèle simplement l'état.

Il ne s'agit que d'une opposition philosophique qui a duré 30 ans.

T46

# Une expérience du CERN (septembre 2011) remet en question la théorie de la relativité

!!!!!!!!!!!!



60 ns d'avance sur les  
 $2.4 \times 10^{-3} \text{ s}$  attendues

Une particule (**neutrino**) dépassant la vitesse de la lumière, pourtant considérée comme une "limite infranchissable" dans la théorie de la relativité d'Einstein

(Expérience effectuée pendant 3 ans sur 15000 neutrinos)

## Qqs mois plus tard

La théorie de la relativité d'Einstein remise en cause... suite au défaut de connexion d'une fibre optique ?

Revanche des photons sur les neutrinos

## Récapitulatif

Selon Planck :  
les interactions  
matière - rayonnement se  
font par quanta d'énergie  
(des multiples de  $h\nu$ ).

Selon Einstein :  
la lumière est constituée  
de quanta d'énergie  
(multiples de  $h\nu$ ).

Un électron n'est pas une particule

Un électron n'est pas une onde

Un électron c'est les deux à la fois

L'onde se comporte  
comme une particule

L'électron  
(et n'importe  
quelle autre  
particule) se  
comporte  
comme une  
onde

# I.1. Introduction

## I.1.1 Historique

## I.1.2 Les dilemmes du début XX<sup>ème</sup> siècle

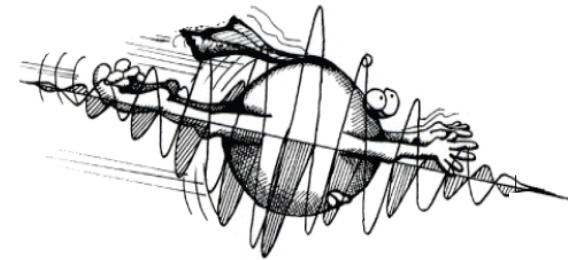
- \* corps noir
- \* effet photoélectrique
- \* l'instabilité des atomes

# I.2. La dualité onde-corpuscule

## I.2.1. Diffraction par des fentes de Young

- \* Relations d'incertitude d'Heisenberg

## I.2.2. Onde, particule et fonction d'onde



# I.3. Description ondulatoire des particules

## I.3.1. Equation de Schrödinger

## I.3.2. La grandeur physique énergie

# I.4. Le spin - Expérience de Stern et Gerlach



## 1.3.1. Équation de Schrödinger

53

La fonction d'onde obéit à l'équation de propagation des ondes (équation de d'Alembert)

$$\Delta \Psi(x,t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2} = 0 \quad (\Delta = \text{Laplacien}) \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \Psi(x,t) = A e^{i(x \pm vt)}$$

- Par analogie avec l'onde EM associée aux photons, l'onde de matière associée à une particule peut s'écrire sous la forme d'une onde plane :  $\Psi(x,t) = A \exp i(kx - \omega t)$



Donc :  $\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2} = -\omega^2 \Psi(x,t)$  Ou bien :  $\Delta \Psi(x,t) + \frac{\omega^2}{v^2} \Psi(x,t) = 0$  avec  $\frac{\omega}{v} = k$

- D'autre part l'énergie, la longueur d'onde et le vecteur d'onde associées à la particule sont

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m \cdot [E - V(x)]}} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi \frac{\sqrt{2m \cdot [E - V(x)]}}{h}$$

donc  $\Delta \Psi(x,t) + 4\pi^2 \left( \frac{2m(E - V(x))}{h^2} \right) \Psi(x,t) = 0$

et comme  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  on trouve :  $\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x,t) + [E - V(x)] \Psi(x,t) = 0$

## 1.3.1. Équation de Schrödinger

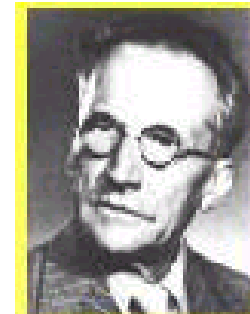
---

54

Schrödinger a donné la solution finale en 1926 (prix Nobel en 1933)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

Fonction d'onde



E. Schrödinger  
(1887 - 1961)

Si on peut résoudre cette équation on connaît tout du système

## I.3.1. Équation de Schrödinger

55



Dans cette équation  $V(r)$  est une énergie et non un potentiel, il s'agit de l'énergie potentielle

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r, t) + V(r) \cdot \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t}$$



(1887-1961)

- Remarques :

- équation du 1er ordre en  $t$  : connaître  $\Psi(x, t_0)$  permet de connaître  $\Psi(x, t)$
- en méca. classique, 6 paramètres sont nécessaires pour connaître l'état d'un système à un instant  $t$  :  $\{x, y, z, p_x, p_y, p_z\}$
- en méca. quantique l'état d'un système à un instant  $t$  est déterminé par une infinité de paramètres : les valeurs de  $\Psi(x, t)$



la trajectoire est remplacée par la propagation de l'onde associée à la particule

- On cherche s'il existe des solutions où les variables espace et temps sont séparées

(système isolé)

$$\Psi(r, t) = \Phi(r) \cdot f(t) \quad (\text{on continue de raisonner à 1D - raisonnement identique à 3D})$$

- L'équation de Schrödinger devient  $\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(x) \right] \cdot f(t) + V(x) \cdot \Phi(x) f(t) = i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} \cdot \Phi(x)$

$$\frac{eq.}{\Phi(x)f(t)} \Rightarrow \underbrace{\frac{1}{\Phi(x)} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(x) \right] + V(x)}_{\text{fonction de } x \text{ seul}} = \underbrace{i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t}}_{\text{fonction de } t \text{ seul}}$$

- L'équation ci-dessus n'est vérifiée que si chaque membre est une constante

Schrödinger appelle cette constante **E**

- Alors, d'une part (**partie temporelle**)

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial f(t)}{\partial t} + i \frac{E}{\hbar} \cdot f(t) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad f(t) = A \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

- Et d'autre part, (**partie spatiale**)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(x) + V(x) \cdot \Phi(x) = E \cdot \Phi(x)$$

Équation de Schrödinger  
indépendante du temps

La fonction d'onde s'écrit alors

$$\psi(x, t) = A \cdot \phi(x) e^{-i\omega t}$$

## I.3.2. La grandeur physique énergie

- Soit l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(x) + V(x) \cdot \Phi(x) = E \cdot \Phi(x)$$

- On introduit l'opérateur différentiel d'**Hamilton**

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$$

d'où

$$H\Phi_i(x) = E_i \cdot \Phi_i(x)$$

Equation aux valeurs propres de H

- L'opérateur « **Hamiltonien** » est l'objet mathématique associé à la grandeur physique  
« **Energie** »

Il y a en général plusieurs couples de solutions  $E_i, \Phi_i$

➡ chaque  $E_i$  est une valeur propre de l'opérateur H (= un des résultats possibles)

➡ à chaque  $E_i$  est associé un état propre c.à.d une fonction d'onde propre  $\Phi_i(r,t)$

# I.1. Introduction

## I.1.1 Historique

## I.1.2 Les dilemmes du début XX<sup>ème</sup> siècle

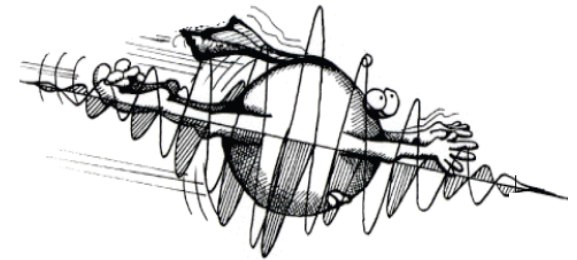
- \* corps noir
- \* effet photoélectrique
- \* l'instabilité des atomes

# I.2. La dualité onde-corpuscule

## I.2.1. Diffraction par des fentes de Young

- \* Relations d'incertitude d'Heisenberg

## I.2.2. Onde, particule et fonction d'onde



# I.3. Description ondulatoire des particules

## I.3.1. Equation de Schrödinger

## I.3.2. La grandeur physique énergie

# I.4. Le spin - Expérience de Stern et Gerlach

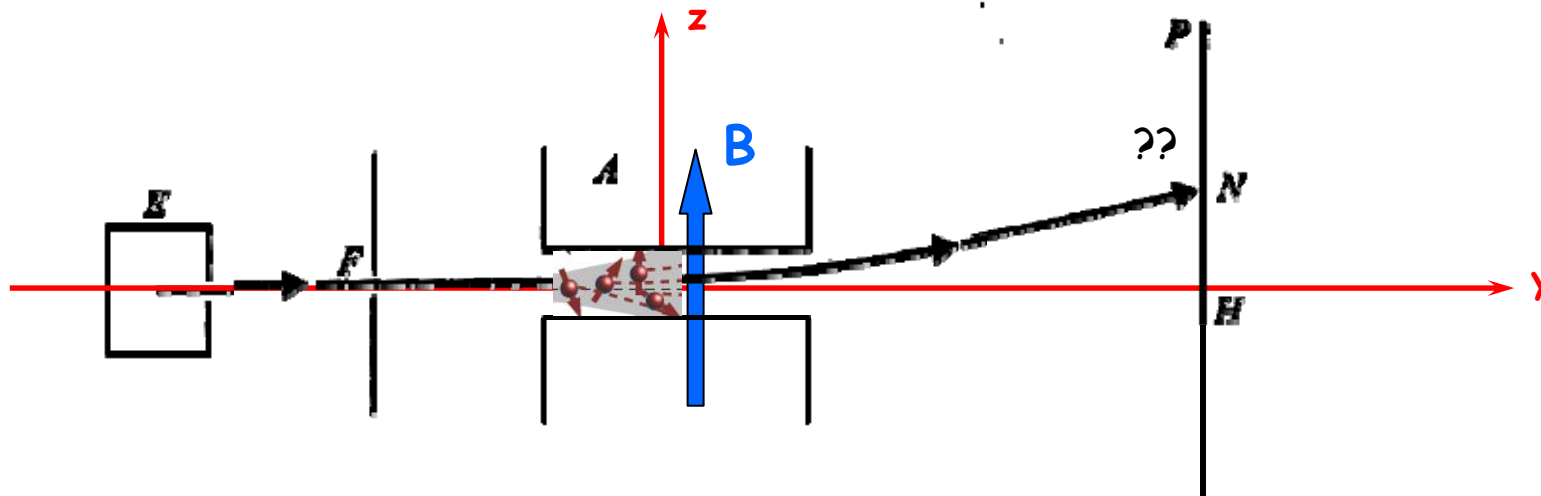




## I.4. Le spin - Expérience de Stern et Gerlach (1922)

59

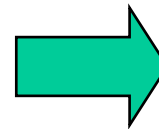
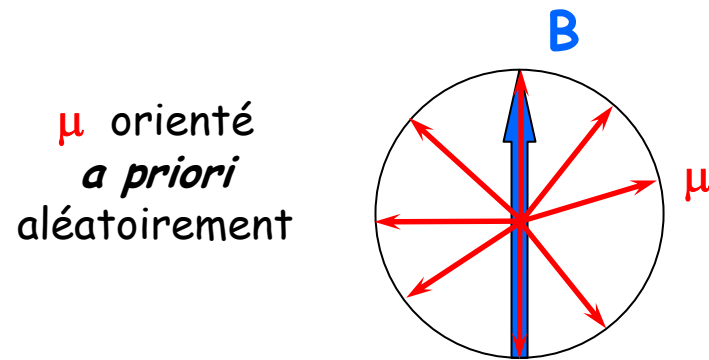
- Enceinte E :
  - contient des atomes d '**Ag** ( $4d^{10} 5s^1$ )
  - ⇒ **atomes neutres** : pas de force de Lorentz due au champ magnétique
  - ⇒ **paramagnétiques** : orientation aléatoire des moments magnétiques  $\mu \neq 0$  en absence de champ magnétique
- $T \uparrow$  : Les atomes s'échappent par un petit orifice et se propagent en ligne droite (vide poussé)
- Fente F : permet de sélectionner les atomes de vitesse // à l'axe Oy



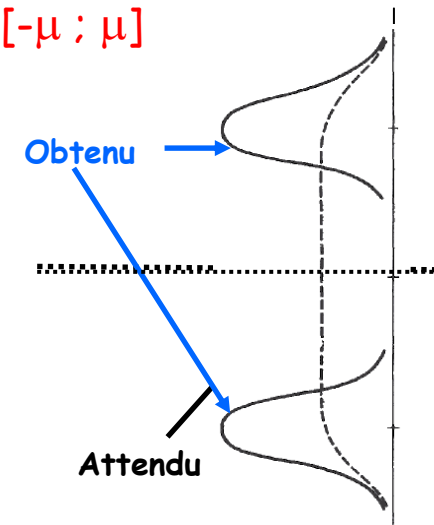
- Les atomes traversent l'entrefer d'un **électroaimant A** (fort champ B)
- On les observe sur une plaque P ... **en quelle(s) position(s) ?**

- Déviation des atomes d'Ag :

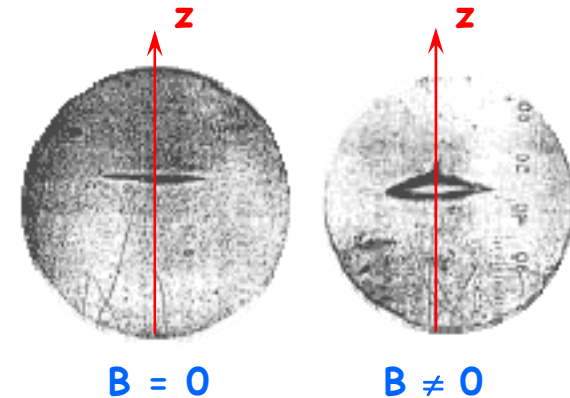
- lorsque les atomes d'Ag pénètrent dans l'entrefer, on a  $\mu_z \in [-\mu ; \mu]$



on s'attend donc à  
avoir une répartition  
uniforme selon Oz et  
symétrique p/r à y



• On observe 2 taches symétriques en  
**contradiction totale avec les prévisions classiques**



Quantification de la composante  $\mu_z$  du moment magnétique  
qui peut prendre que 2 valeurs sur l'axe Oz

## I.4. Le spin

- Pour expliquer les observations, on est amené à introduire une grandeur physique appelée **moment cinétique intrinsèque** ou **moment cinétique de spin**, notée **S**

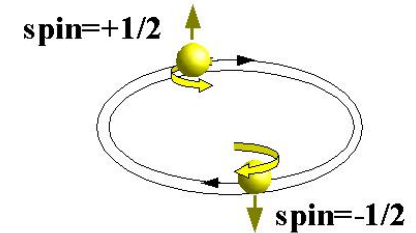
➡ cette grandeur physique n'a pas d'équivalent en mécanique classique

➡ le spin correspond à des **degrés de liberté internes à la particule** (concept purement quantique)

- D'après ce qui précède,  **$S_z$  (la projection sur Oz) ne peut prendre que 2 valeurs**

On admettra que ces valeurs sont  $+\frac{\hbar}{2}$  et  $-\frac{\hbar}{2}$

➡ le spin de l'atome d'Ag vaut  $\frac{1}{2}$  : on parle de **spin 1/2**



### Exemples

#### Particules élémentaires

Électrons  
Protons  
Neutrons

Spin 1/2  
Fermions



#### Atomes

He<sub>4</sub> (2p+2n+2e)

Spin entier (=3)

He<sub>3</sub> (2p+1n+2e)

Spin demi entier  
(= 5/2)

Photons

Spin 1

Bosons

## Équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H\Phi(x) = E\Phi(x)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$$

## Fonction d'onde

$$\Psi(x, t) = A \cdot \Phi(x) e^{-i\omega t}$$

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

$$p = \hbar k, \lambda = h/p$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Influence de la relation de Heisenberg à l'échelle macroscopique

- calculer la  $\lambda$  associée à un grain de poussière :  $\varnothing=1 \mu\text{m}$      $m=10^{-9} \text{ kg}$      $v = 10^{-3} \text{ m/s}$
- calculer  $\Delta p$  si  $\Delta x=0.01 \mu\text{m}$ .

 conclusion ?

- Trouver l'erreur !

- la dualité onde-particule permet d'écrire l'énergie d'une particule (énergie cinétique)

$$E = \hbar \omega$$

$$= \hbar v.k \quad (\text{car } \omega=v.k)$$

$$= p.v \quad (\text{car } p= \hbar k)$$

$$= mv^2 \quad (\text{car } p= mv)$$

- or on sait bien que  $E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$  ... où est passé le facteur  $\frac{1}{2}$  ?