

# L'atome à $Z$ électrons

Atome :  $Z$  électrons liés par un potentiel coulombien à symétrie sphérique

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^Z \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{1}}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\widehat{1}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

énergie cinétique   attraction noyau   répulsion électron-électron

Première étape : passer à une somme de Hamiltoniens isotropes à une particule en utilisant une hypothèse de champ moyen.

$$\sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\widehat{1}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \sum_{i=1}^Z \hat{V}_{\text{moyen}}(\vec{r}_i) \quad \hat{H}_e = \sum_{i=1}^Z \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hat{1}}{r_i} + \underbrace{V_{\text{moyen}}(\vec{r}_i)}_{\hat{W}(\vec{r}_i)} \right)$$

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^Z \hat{h}_{z,i}$$

$$\hat{h}_z = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + \hat{W}(\vec{r})$$

Deuxième étape : Calculer les états propres et les niveaux d'énergie du hamiltonien à une particule.

# Les états électroniques

$$\hat{h}_z \psi = E\psi$$

- ➡ Potentiel à symétrie sphérique : le moment cinétique commute avec le hamiltonien.

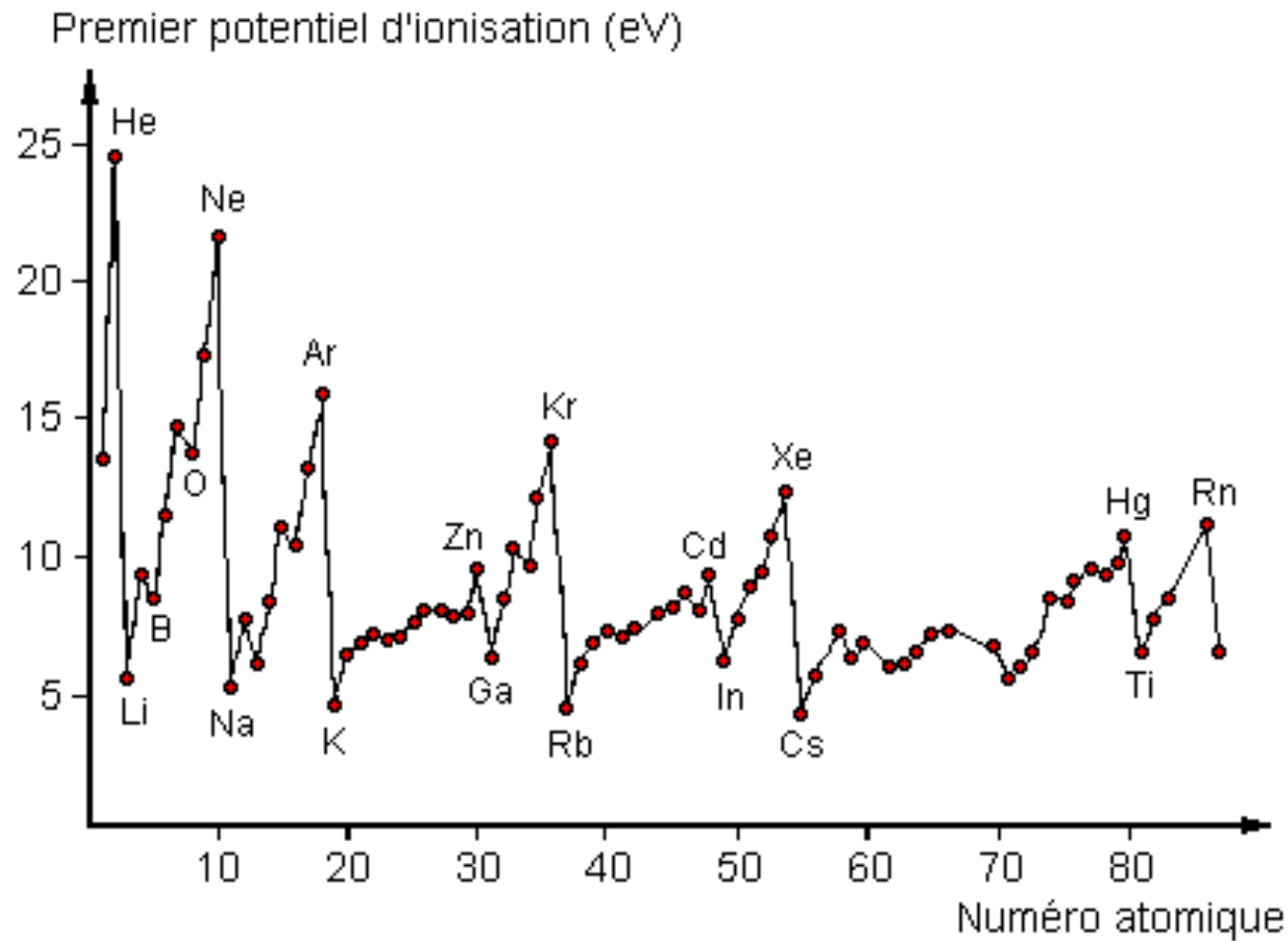
$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \times Y_l^m(\theta, \varphi)$$

- ➡ Les énergies ne dépendent pas du nombre quantique magnétique  $m$ .
- ➡ Les énergies dépendent des nombres quantiques  $n$  et  $l$ .  
(sauf dans le cas du potentiel coulombien)
- ➡ Les énergies **croissent** avec le nombre quantique principal  $n$ .
- ➡ Les énergies **croissent** avec le nombre quantique orbital  $l$ .
- ➡ A partir de  $n=3$ , **enchevêtrement** des sous-couches.
- ➡ Seuls deux électrons peuvent occuper un même état  $n, l, m$  (spin).
- ➡ Répulsion **apparente** due au principe d'exclusion de Pauli.

Construction de l'état fondamental en remplissant  
les couches par énergie croissante

# Potentiel d'ionisation

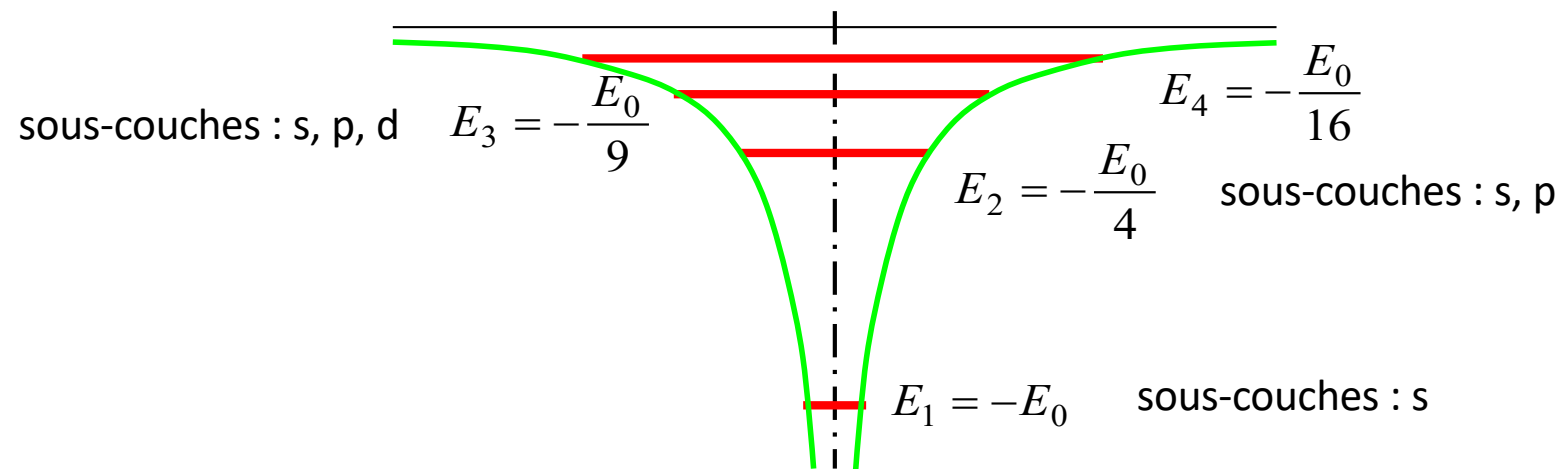
Énergie minimale à fournir pour arracher un électron à l'atome



# Comment construire les atomes...

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \times Y_l^m(\theta, \varphi)$$

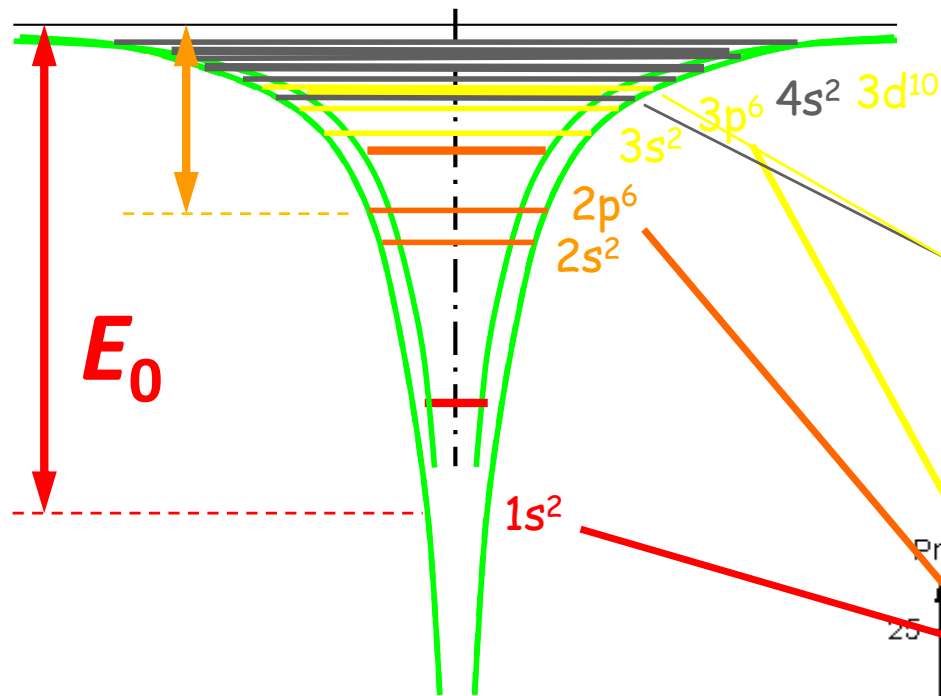
Pour  $Z=1$  (hydrogène), on connaît **exactement** les énergies et les solutions radiales.



L'orbitale de nombre principal  $n$  est environ à  **$n \times$  rayon de Bohr**.

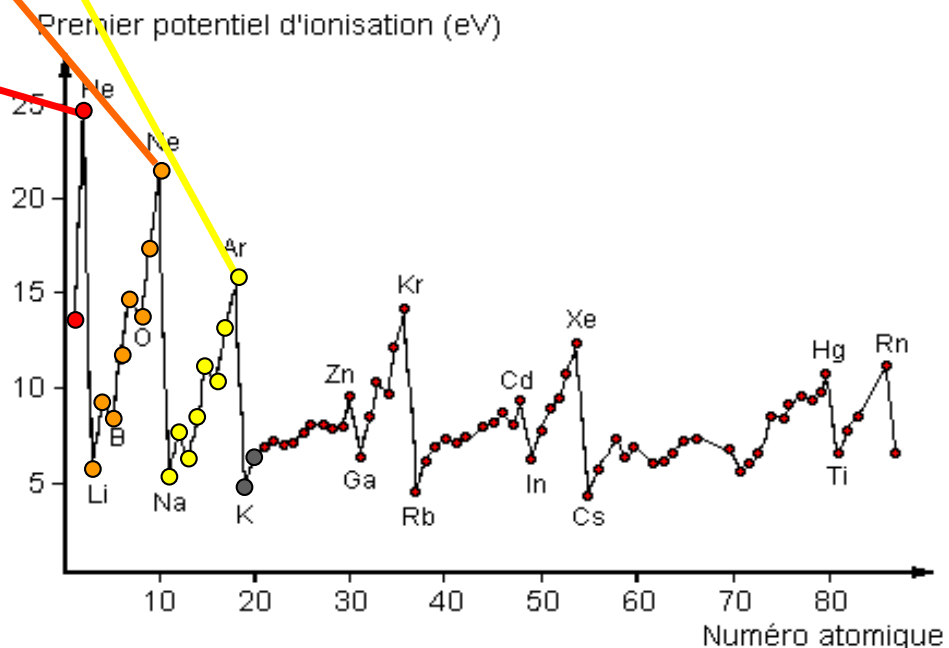
# Comment construire les atomes...

Pour un atome quelconque,  $Z$  protons



- ➡ Correction due aux interactions  $e^-e^-$
- ➡ Séparation des sous-couches
- ➡ Enchevêtrement éventuel
- ➡ Spin  $\frac{1}{2}$  de l'électron : remplissage avec deux électrons par niveau d'énergie.

Potentiel d'ionisation :  
énergie minimale pour  
arracher un électron



# TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS

<http://www.periodni.com/fr/>

**LE DÉTAIL DE L'ÉLÉMENT BORE (B)**

MASSA ATOMIQUE RELATIVE (1): 10.811

SYMBOLE: B

NOM DE L'ÉLÉMENT: BORE

NUMÉRO ATOMIQUE: 5

PERIODE: 2

GRUPE IUPAC: IIIA

GRUPE CAS: 13

**LEGÈNDE**

- Métaux
- Métaux alcalins
- Métaux alcalino-terreux
- Métaux de transition
- Lanthanides
- Actinides
- Métalloïdes
- Non-métaux
- Chalcogènes
- Halogènes
- Gaz nobles

**ÉTAT PHYSIQUE (25 °C; 101 kPa)**

Ne - gaz    Fe - solide

Hg - liquide    Ts - synthétique

PÉRIODE	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H 1.0079 HYDROGÈNE																	
2	Li 6.941 LITHIUM	Be 9.0122 BÉRYLLIUM																
3	Na 22.990 SODIUM	Mg 24.305 MAGNÉSium																
4	K 39.098 POTASSIUM	Ca 40.078 CALCIUM	Sc 44.956 SCANDIUM	Ti 47.867 TITANE	V 50.942 VANADIUM	Cr 51.996 CHROME	Mn 54.938 MANGANESE	Fe 55.845 FER	Co 58.933 COBALT	Ni 58.693 NICKEL	Cu 63.546 CUIVRE	Zn 65.409 ZINC	Ga 69.723 GALLIUM	Ge 72.64 GERMANIUM	As 74.922 ARSENIC	Se 78.96 SÉLÉNIUM	Br 79.904 BROME	Kr 83.798 KRYPTON
5	Rb 85.468 RUBIDIUM	Sr 87.62 STRONTIUM	Y 88.906 YTRIUM	Zr 90.224 ZIRCONIUM	Nb 92.906 NIOBIUM	Mo 95.94 MOLYBDÈNE	Tc (98) TECHNÉTIUM	Ru 101.07 RUTHÉNIUM	Rh 102.91 RHODIUM	Pd 106.92 PALLADIUM	Ag 107.87 ARGENT	Cd 112.41 CADMIUM	In 114.82 INDIUM	Sn 118.71 ÉTAIN	Sb 121.76 ANTIMOINE	Te 127.60 TELLURE	I 126.90 IODE	Xe 131.29 XÉNON
6	Cs 132.91 CÉSium	Ba 137.33 BARYUM	La-Lu 57-71 Lanthanides	Hf 178.49 HAFNIUM	Ta 180.95 TANTALE	W 183.84 TUNGSTÈNE	Re 186.21 RHÉNIUM	Os 190.23 OSMIUM	Ir 192.22 IRIDIUM	Pt 195.08 PLATINE	Au 196.97 OR	Hg 200.59 MERCURE	Tl 204.38 THALLIUM	Pb 207.2 PLOMB	Bi 208.98 BISMUTH	Po (209) POLONIUM	At (210) ASTATE	Rn (222) RADON
7	Fr (223) FRANCIUM	Ra (226) RADIUM	Ac-Lr 89-103 Actinides	Rf (261) RUTHÉRFORDIUM	Db (268) DUBNIUM	Sg (271) SEABORGIUM	Bh (272) BOHRRIUM	Hs (277) HASSIUM	Mt (276) MEITNERIUM	Ds (281) DARMSTADTIUM	Rg (280) ROENTGENIUM							

**LANTHANIDES**

57 138.91 La LANTHANE	58 140.12 Ce CÉRIUM	59 140.91 Pr PRASEODYME	60 144.24 Nd NÉODYME	61 (145) Pm PROMÉTHIUM	62 150.36 Sm SAMARIUM	63 151.96 Eu EUROPIUM	64 157.25 Gd GADOLINIUM	65 158.93 Tb TERBIUM	66 162.50 Dy DYSPROSIUM	67 164.93 Ho HOLMIUM	68 167.26 Er ERBIUM	69 168.93 Tm THULIUM	70 173.04 Yb YTTÉRIUM	71 174.97 Lu LUTÉTIUM
-----------------------	---------------------	-------------------------	----------------------	------------------------	-----------------------	-----------------------	-------------------------	----------------------	-------------------------	----------------------	---------------------	----------------------	-----------------------	-----------------------

**ACTINIDES**

89 (227) Ac ACTINIUM	90 232.04 Th THORIUM	91 231.04 Pa PROTACTINIUM	92 238.03 U URANIUM	93 (237) Np NEPTUNIUM	94 (244) Pu PLUTONIUM	95 (243) Am AMÉRICIUM	96 (247) Cm CURIUM	97 (247) Bk BERKÉLIUM	98 (251) Cf CALIFORNIUM	99 (252) Es EINSTEINIUM	100 (257) Fm FERMIUM	101 (258) Md MENDELÉVIUM	102 (259) No NOBÉLIUM	103 (262) Lr LAWRENCIUM
----------------------	----------------------	---------------------------	---------------------	-----------------------	-----------------------	-----------------------	--------------------	-----------------------	-------------------------	-------------------------	----------------------	--------------------------	-----------------------	-------------------------

Copyright © 2007 Eni Generali

(1) Pure Appl. Chem., 78, No. 11, 2051-2066 (2006)  
 La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande. Toutefois, pour les trois éléments (Th, Pa et U) qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

Argent :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10} 5s^1$

## ATOMES

Toutes les animations et explications sur  
[www.toutestquantique.fr](http://www.toutestquantique.fr)

# L'intrication quantique



# L'intrication quantique

Soit un système de deux particules de spin  $\frac{1}{2}$ .

Un état de la première particule peut s'écrire :  $|\psi_1\rangle = \lambda_1|+\rangle + \mu_1|-\rangle$

Un état « **produit** » donne un état à deux particules :

$$\begin{aligned} |\psi_1, \psi_2\rangle &= (\lambda_1|+\rangle + \mu_1|-\rangle) \otimes (\lambda_2|+\rangle + \mu_2|-\rangle) \\ |\psi_1, \psi_2\rangle &= \lambda_1\lambda_2|++\rangle + \lambda_1\mu_2|+-\rangle + \mu_1\lambda_2| -+\rangle + \lambda_2\mu_2|--\rangle \\ &= a|++\rangle + b|+-\rangle + c| -+\rangle + d|--\rangle \end{aligned}$$

C.N.S. pour qu'un état à deux particules soit un état produit :  $ad = bc$

Conséquence : tous les états ne sont pas des états produits !!

Exemple :  $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle)$  est un état dit « **intriqué** »

Mesure du spin : si on mesure  $+\frac{\hbar}{2}$  (proba.  $\frac{1}{2}$ ) pour la particule 1, alors l'état après réduction du paquet d'ondes est :  $|\Psi_{\text{après}}\rangle = |++\rangle$

« La mesure de l'un a modifié l'état de l'autre »

# Le paradoxe EPR



Albert Einstein  
(1879 - 1955)



Boris Podolsky  
(1896 - 1966)



Nathan Rosen  
(1909 - 1995)

"Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?", *Physical Review*, **47**:777-780 , 1935.

# Le paradoxe EPR

↑ spin ½

désintégration d'une  
particule de spin 0

mesure de  $\hat{S}_z$



spin ½ ↗

mesure de  $\hat{S}_{\vec{a}}$

Relativité restreinte :

Les mesures sont séparées par un intervalle de genre **espace**.

Mécanique quantique :

L'état initial des deux particules est :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1+\rangle|2-\rangle - |1-\rangle|2+\rangle)$$

Une **seule** mesure entraîne la réduction du paquet d'ondes.

Si  $\vec{a} = \vec{u}_z$ , la mesure du spin de la particule 1 donne avec **certitude** celui de la particule 2.

**Quelle est la première mesure ?**

**Transmission instantanée de l'information ?**

# Les principes invoqués

- **Principe de réalisme** : si on peut connaître une propriété d'un système sans le perturber, alors cette propriété correspond à une **réalité** existante en dehors de l'observateur.
- **Principe de séparabilité** : même si un système est lié à un autre, il conserve des propriétés physiques qui lui sont **propres**.
- **Principe de localité** : les mesures effectuées sur un système sont **indépendantes** des mesures effectuées sur un autre système suffisamment **distant**.

# Réalisme ou localité ?

Mécanique quantique incomplète **OU**  $x, p, S$  n'ont pas de réalité propre

Mécanique quantique complète  $\Rightarrow$  quantités incompatibles ne peuvent avoir de réalité simultanée

Mécanique quantique complète  $\Rightarrow$  quantités incompatibles doivent posséder une réalité simultanée

Solution du paradoxe ? : La mécanique quantique est **incomplète**, il existe des **variables cachées** dont on n'observe que les conséquences **statistiques**.



John Stewart Bell  
(1928 -1990)

« Dieu ne joue pas aux dés »

*Albert Einstein*

Possibilité de tester les théories **réalistes locales** (1964)

# Une mesure quantique paradoxale

On considère trois particules de spin  $\frac{1}{2}$  que l'on suppose dans l'état :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |+++ \rangle - |-- - \rangle \right) \quad \text{dans la base des états propres de } \hat{S}_z$$

On désire effectuer les trois mesures suivantes :

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_x^{(1)} \times \hat{\sigma}_y^{(2)} \times \hat{\sigma}_y^{(3)} \quad \hat{B} = \hat{\sigma}_y^{(1)} \times \hat{\sigma}_x^{(2)} \times \hat{\sigma}_y^{(3)} \quad \hat{C} = \hat{\sigma}_y^{(1)} \times \hat{\sigma}_y^{(2)} \times \hat{\sigma}_x^{(3)}$$

En interprétation classique :

$$A \times B \times C = \left( \sigma_x^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_y^{(3)} \right) \times \left( \sigma_y^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_y^{(3)} \right) \times \left( \sigma_y^{(1)} \sigma_y^{(2)} \sigma_x^{(3)} \right) = \sigma_x^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_x^{(3)}$$

$$\begin{aligned} \hat{A} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\sigma}_x^{(1)} \hat{\sigma}_y^{(2)} \left( i |++ - \rangle + i |-- + \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\sigma}_x^{(1)} \left( - |+- - \rangle + |-++ \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( - |-- - \rangle + |+++ \rangle \right) = |\psi\rangle \end{aligned}$$

$|\psi\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{A}$  avec la valeur propre +1

$$\begin{aligned} \sigma_x |z+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |z-\rangle \\ \sigma_x |z-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |z+\rangle \\ \sigma_y |z+\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i |z-\rangle \\ \sigma_y |z-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i |z+\rangle \end{aligned}$$

# Une mesure quantique paradoxale

➡  $|\psi\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  avec la valeur propre +1

$$\hat{A} |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \hat{B} |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \hat{C} |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Mesure de  $D$ , produit « classique » de  $A, B$  et  $C$

$$\begin{aligned} \sigma_x^{(1)} \sigma_x^{(2)} \sigma_x^{(3)} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |++-\rangle - |--+\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |+- -\rangle - |-++\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |-- -\rangle - |+++ \rangle \right) = \boxed{-|\psi\rangle} \end{aligned}$$

Classiquement, on aurait la relation :  $\langle D \rangle = \langle A \rangle \times \langle B \rangle \times \langle C \rangle$

Pour cet état, toute mesure des observables  $A, B$  ou  $C$  donne 1 avec probabilité 1

Pour cet état, la mesure de  $D$  donne -1 avec probabilité 1...

**Violation claire du réalisme local !**

# Les inégalités de Bell

Le spin de la particule 1 peut être mesuré suivant  $\vec{a}$  ou  $\vec{a}'$

Le spin de la particule 2 peut être mesuré suivant  $\vec{b}$  ou  $\vec{b}'$

Mesure du spin de la particule 1 dans la direction  $\vec{a}$  : A

Mesure du spin de la particule 1 dans la direction  $\vec{a}'$  : A'

Mesure du spin de la particule 2 dans la direction  $\vec{b}$  : B

Mesure du spin de la particule 2 dans la direction  $\vec{b}'$  : B'

(= +1 ou -1)

Quantité  $X = \langle AB \rangle - \langle AB' \rangle + \langle A'B \rangle + \langle A'B' \rangle$

On suppose que  $\vec{b}$  est suivant Oz :  $\langle AB \rangle = \frac{4}{\hbar^2} \langle \hat{S}_{\vec{a}}^{(1)} \hat{S}_z^{(2)} \rangle$

Calcul à deux particules :  $\langle \psi_1 \otimes \psi_2 | \hat{A}_1 \hat{A}_2 | \varphi_1 \otimes \varphi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A}_1 | \varphi_1 \rangle \langle \psi_2 | \hat{A}_2 | \varphi_2 \rangle$

$$\frac{2}{\hbar} \hat{S}_{\vec{a}} = \sin \theta \sigma_2 + \cos \theta \sigma_3 = \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -i \sin \theta \\ i \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$



# Les inégalités de Bell



John Stewart Bell  
(1928 -1990)

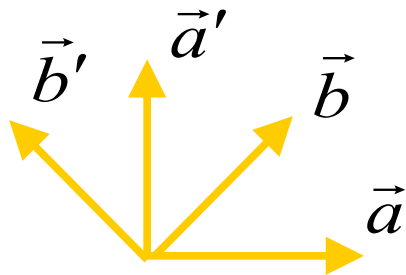
$$\begin{aligned}\langle AB \rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \left| \frac{4}{\hbar^2} \hat{S}_{\vec{a}}^{(1)} \hat{S}_z^{(2)} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \left( -\langle + | \frac{2}{\hbar} \hat{S}_{\vec{a}}^{(1)} | + \rangle + \langle - | \frac{2}{\hbar} \hat{S}_{\vec{a}}^{(1)} | - \rangle \right) = \frac{1}{2} (-\cos \theta - \cos \theta) = -\cos \theta\end{aligned}$$

$$X = \langle AB \rangle - \langle AB' \rangle + \langle A'B \rangle + \langle A'B' \rangle = -\cos \theta_{ab} + \cos \theta_{ab'} - \cos \theta_{a'b} - \cos \theta_{a'b'}$$

**Réalisme local** : ces quantités ont un sens « en dehors » de toute mesure

Donc  $X = \underbrace{\langle A(B - B') + A'(B + B') \rangle}_x \quad |B| = |B'| = 1 \Rightarrow |x| = 2$

$$-2 \leq X \leq +2$$

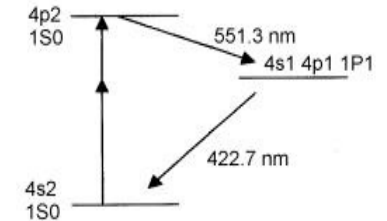
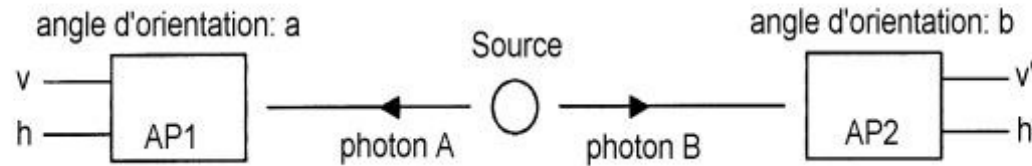


**Mécanique quantique :**

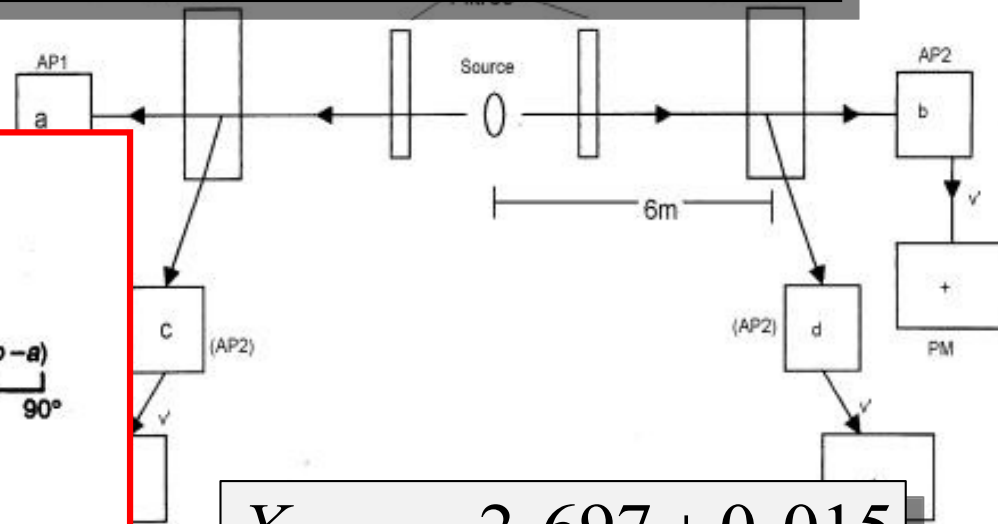
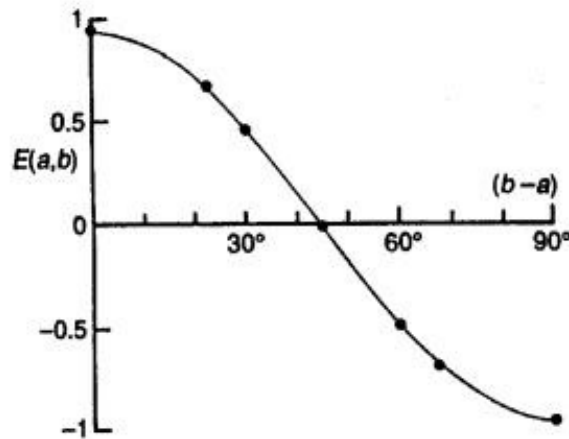
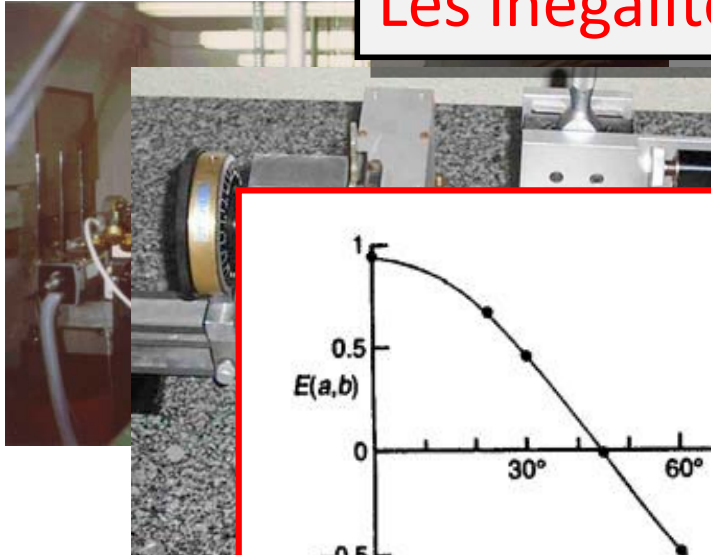
$$X = -\cos \frac{\pi}{4} + \cos \frac{3\pi}{4} - \cos \frac{\pi}{4} - \cos \frac{\pi}{4} = -2\sqrt{2}$$

# Les expériences d'Aspect

(Aspect, Dalibard, Grangier, Roger, 1982)

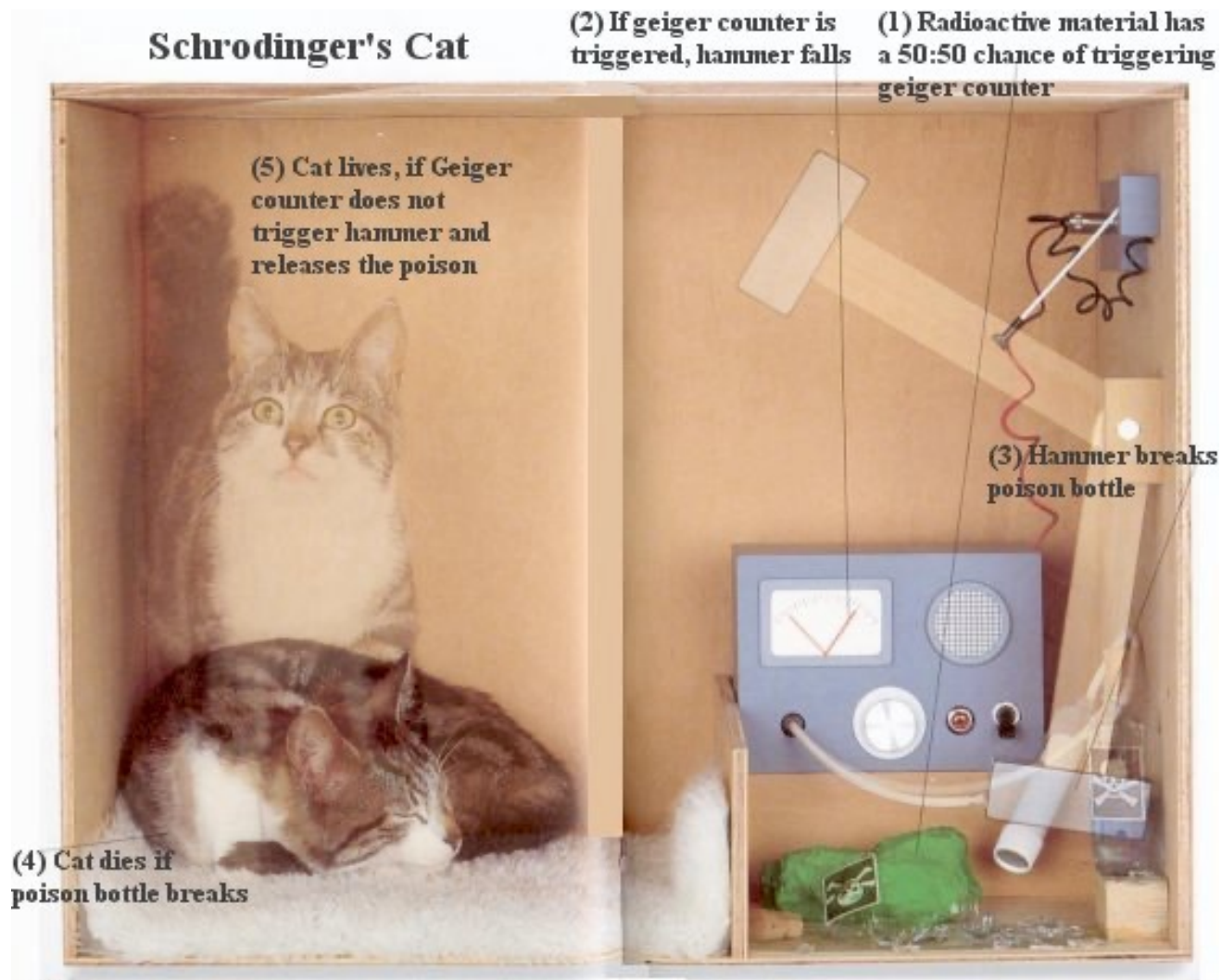


Les inégalités de Bell ne sont pas vérifiées



$$X_{\text{exp}} = -2,697 \pm 0,015$$

# Le chat de Schrödinger et la décohérence

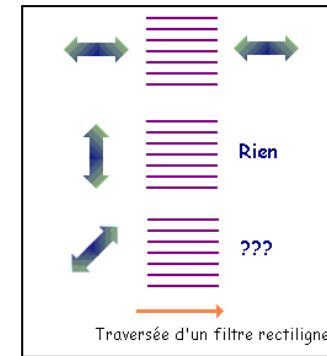
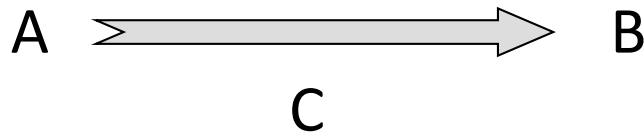


Schrödinger's Plates: They are both broken and not broken until you open the door.



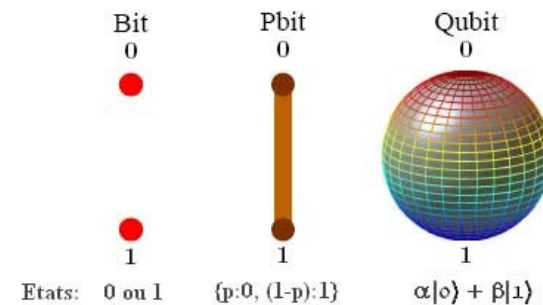
# L'intrication en pratique

- La cryptographie quantique



- L'ordinateur quantique

remplacer les bits par des « qubits »  
 $N$  qubits  $\rightarrow 2^N$  informations.



- La « téléportation quantique »

Anton Zeilinger (1997)

# Après la physique quantique...

La physique quantique relativiste

La théorie quantique des champs

Le modèle standard

La physique quantique appliquée aux grands systèmes

**La physique statistique**

La théorie des solides cristallins : **la physique du solide**

La dynamique moléculaire

L'investigation, la maîtrise et la conception à l'échelle nanométrique

Les **nanosciences** et les **nanotechnologies**





PARISIENNE  
DE PHOTO  
GRAPHIE

# Licence d'usage dans un contexte public, sans modification

La licence confère à l'utilisateur un droit d'usage sur le document consulté ou téléchargé, totalement ou en partie, dans les conditions définies ci-après et à l'exclusion expresse de toute utilisation commerciale.

Le droit d'usage défini par la licence autorise un usage à destination de tout public qui comprend :

- Le droit de reproduire tout ou partie du document sur support informatique ou papier,
- Le droit de diffuser tout ou partie du document au public sur support papier ou informatique, y compris par la mise à la disposition du public sur un réseau numérique.

Aucune modification du document dans son contenu, sa forme ou sa présentation n'est autorisée.

Les mentions relatives à la source du document et/ou à son auteur doivent être conservées dans leur intégralité.

Le droit d'usage défini par la licence est personnel, non exclusif et non transmissible. Tout autre usage que ceux prévus par la licence est soumis à autorisation préalable et expresse de l'auteur.

