

Introduction au monde quantique

Mécanique quantique - Cours 1 - MP

1 Principe de dualité onde corpuscule

1.1 Introduction

Les phénomènes d'interférences de la lumière vue comme un signal permettent de décrire les propriétés de la dualité onde corpuscule. Ces phénomènes ondulatoires sont mis en évidence au XIX^e siècle. Par ailleurs, des phénomènes découverts au XX^e permettent d'établir l'existence de quantas (particules les plus élémentaire) de lumière que l'on appelle photons (terme donné par Lewis en 1926). Ainsi la lumière possède un aspect corpusculaire. On parle alors de dualité onde corpuscule pour décrire l'ambivalence des propriétés de la lumière. L'expérience des fentes d'Young permet d'établir le caractère ondulatoire de la lumière

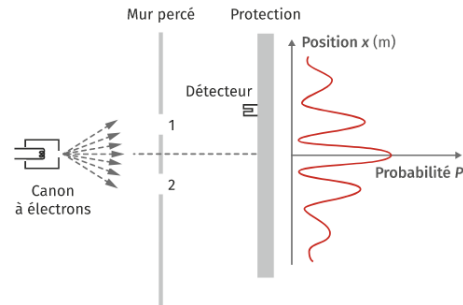


FIGURE 1 – Expérience des fentes d'Young

1.2 Etablissement du caractère corpusculaire de la lumière

1.2.1 Le rayonnement thermique

En 1900 pour réussir à expliquer les propriétés de l'émission thermique du rayonnement électromagnétique d'un corps chauffé, **Max Planck** utilisa l'hypothèse que l'énergie s'échange entre la matière et le rayonnement par multiples d'une valeur minimale.

Quantum d'énergie

On définit le **quantum d'énergie** comme cette valeur minimale d'énergie dont l'expression est

$$\mathcal{E} = h \times \nu$$

On l'on note ν la fréquence du rayonnement et h la constante de Planck dont la valeur est notable et à connaître.

La constante de Planck h est une constante fondamentale de la physique dont la valeur actuellement admise est $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

Pour les multiples d'énergies du quantum on introduit une unité pratique adaptée à ces mesures : l'**électron-volt** noté **eV** tel que $1\text{eV} = 1,60 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

1.2.2 L'effet photoélectrique

Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique est le résultat de l'émission d'électrons par une surface métallique soumise à un rayonnement lumineux (principalement UV et visible). Le phénomène n'existe que si la fréquence du rayonnement est supérieure à une fréquence seuil qui dépend de la nature du métal.

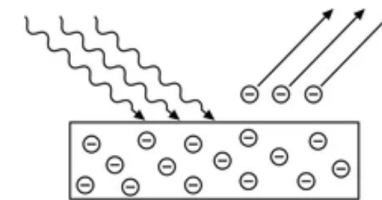


FIGURE 2 – Effet photoélectrique

Cet effet est utilisé dans de nombreux appareils (capteur CCD notamment). L'énergie acquise par les électrons ne dépend pas de l'amplitude de l'onde lumineuse comme le laisserait penser la théorie ondulatoire mais de l'énergie que

possède le quantum d'énergie d'après la théorie corpusculaire. Cette énergie dépend alors de la fréquence de l'onde lumineuse.

fréquence seuil

On appelle fréquence seuil la fréquence f_s minimale du rayon lumineux nécessaire à l'apparition d'un effet photoélectrique.

Interprétation théorique

En 1905, Albert Einstein propose une interprétation théorique de l'effet photoélectrique :

Un électron du métal peut absorber un seul quantum de lumière. Si on augmente l'intensité lumineuse, on augmente le nombre de photons mais l'énergie de chaque photon demeure inchangée car la fréquence est la même.

Pour s'échapper de la cible un électron doit acquérir une énergie minimale caractéristique du matériau de la cible appelée énergie minimale d'extraction notée W . Ainsi la condition d'extraction de l'électron de la cible s'écrit

$$h \times \nu > W$$

En réalité on peut écrire un bilan de conservation de l'énergie et être plus précis cette dernière inégalité.

$$h \times \nu = \mathcal{E}_{c,max} + W$$

Cette équation constitue un énoncé du principe de conservation de l'énergie dans le cas de l'absorption d'un quantum d'énergie (photon unique) par un matériau possédant un travail d'extraction W .

Réécriture

On peut réécrire cette loi de la façon suivante : on note $V_{arret} = \frac{h}{e}\nu - \frac{W}{e}$ la quantité appelée potentiel d'arrêt

$$h \times \nu = \mathcal{E}_{c,max} + W = eV_{arret} + W$$

Avec l'égalité d'identification $\mathcal{E}_{c,max} = eV_{arret}$

Application

On envoie un flux lumineux de longueur d'onde $400nm$ sur une plaque de lithium de travail d'extraction minimal $W_{li} = 2,83eV$. Déterminer l'énergie des photons, l'énergie cinétique des électrons émis et le potentiel d'arrêt V_{arret} .

On applique tout d'abord la relation de Planck-Einstein

$$E = h \times \nu = h \times \frac{c}{\lambda}$$

On fait l'application numérique $E = \frac{6,63.10^{-34} \times 3,0.10^8 \times 10^9}{400 \times 1.6.10^{-19}} = 3,1 eV$

On applique le principe de conservation de l'énergie :

$$h\nu = W_{li} + \mathcal{E}_c \iff \mathcal{E}_c = h\nu - W_{li}$$

$$\text{AN } \mathcal{E}_c = 0.28eV$$

On étudie le système de l'électron entre l'émetteur et le collecteur et on applique le théorème de conservation de l'énergie mécanique (TEM) :

$$\mathcal{E}_{c,emmet} + \mathcal{E}_{p,emmet} = \mathcal{E}_{c,collec} + \mathcal{E}_{p,collec}$$

avec $\mathcal{E}_p = qV = -eV$ telle que $\mathcal{E}_{c,max} = 0 + eV = eV_{arret} \iff V_{arret} = 0.28V$

Application

Quelle fréquence lumineuse est nécessaire pour produire des électrons d'énergie cinétique $3,0eV$ en éclairant du lithium ?

$$E = h\nu = W_{li} + \mathcal{E}_c \implies \nu = \frac{W_{li} + \mathcal{E}_c}{h}$$

$$\text{AN } \nu = \frac{(2,83 + 3,0) \times 1,0.10^{-19}}{6,63.10^{-34}} = 1.41.10^{15} Hz \implies \lambda = \frac{c}{\nu} = 212nm$$

C'est le domaine UV

1.2.3 L'effet Compton

En 1916 Einstein a élargi son concept de quantum de lumière en suggérant qu'ils possèdent une quantité de mouvement p et n'ont pas de masse :

$$p = \frac{\mathcal{E}}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

proposition

Quand un quantum de lumière interagit avec la matière, il y a transfert d'énergie et de quantité de mouvement comme s'il y avait une collision classique entre une particule et la matière.

En 1923 Arthur Compton réalisa une expérience qui permit de confirmer l'hypothèse du quantum. L'expérience consiste à projeter un faisceau de rayon X ($\lambda = 71,1 \text{ pm}$) sur une cible de carbone et de mesurer la longueur d'onde et l'intensité des rayons X qui étaient diffusés par la cible. Il constata tout d'abord que la longueur d'onde diffusée était différente de λ ce qui rentre en contradiction avec la théorie classique. Il put interpréter les résultats expérimentaux en faisant l'hypothèse d'une collision entre les électrons contenus dans la cible et les rayons incidents. Au cours de cette collision le quantum perd une partie de son énergie ce qui explique qu'il reparte avec une énergie plus petite, donc une longueur d'onde λ' plus grande.

Relation de Compton

Un calcul de mécanique relativiste donne la relation de Compton associée au schéma expérimental précisé ci-dessous.

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \varphi)$$

1.2.4 Le photon

On parle de photon comme de la particule associée à la lumière. On peut en décrire quelques propriétés.

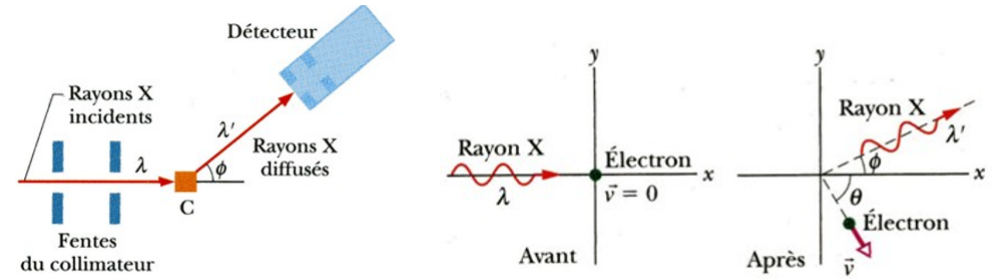


FIGURE 3 – Schéma de l'expérience de Compton

Propriétés du photon

On donne les propriétés suivantes caractéristiques de l'entité qu'est le photon :

1. Le photon est de masse nulle : $m_{\text{photon}} = 0$
2. Le photon se déplace à la vitesse de la lumière dans le vide soit sa célérité $c = 3.10^8 \text{ m.s}^{-1}$
3. Le photon associé à une lumière de fréquence ν possède exactement l'énergie

$$\mathcal{E}_{\text{photon}} = h \times \nu = h \times \frac{c}{\lambda}$$

avec h la constante de Planck et selon la relation de Planck-Einstein donnée ci-dessus.

4. Le photon associé à une lumière de fréquence ν et se propageant selon le vecteur unitaire \vec{u} possède la quantité de mouvement

$$\vec{p} = \frac{\mathcal{E}_{\text{photon}}}{c} \vec{u} = \frac{h\nu}{c} \vec{u} = \frac{h}{\lambda} \vec{u}$$

L'aspect corpusculaire est rarement perceptible en optique à cause du nombre important de photons qui interviennent. Il existe actuellement des systèmes élaborés permettant d'émettre des photons un par un : on parle de sources de photons uniques.

1.3 La lumière en tant qu'onde de probabilité

Comment la lumière peut-elle être une onde en physique classique alors qu'elle est émise et absorbée sous forme de photons en physique quantique ? Pour répondre à cette question revenons sur l'expérience de Thomas Young, avec 2 regards différents.

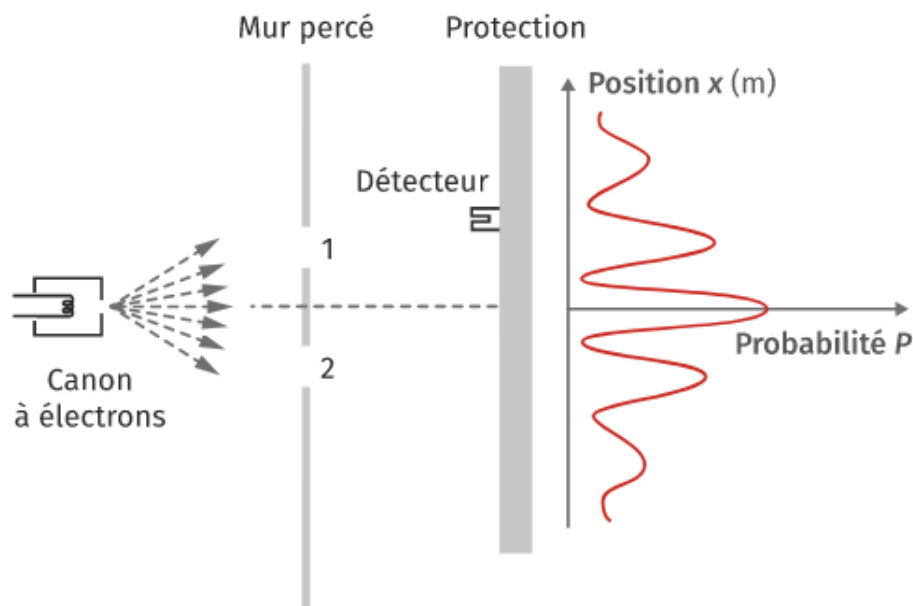


FIGURE 4 – Expérience de Thomas young

Dans la forme standard de l'expérience, les sources secondaires situées sur l'écran créent par interférences des franges sur l'écran. Dans la première partie on a considéré l'existence de ces interférences comme preuve indéniable de la nature ondulatoire de la lumière. Si on place un détecteur de photon sur l'écran on constate deux choses :

1. Les photons sont détectés de façons aléatoire.
2. le nombre de détéctions augmente avec l'intensité des franges.

Principe probabiliste

Le caractère ondulatoire fait qu'on ne peut prédire que la probabilité qu'un photon soit détecté en un point particulier pendant une durée spécifique, cette probabilité étant proportionnelle à l'intensité de la lumière incidente en ce point.

La lumière n'est donc pas seulement une onde électromagnétique mais aussi une onde de probabilité.

La deuxième forme de l'expérience se fait envoyant les photons un par un. On arrive à reproduire les franges d'interférences avec une source émettant un seul photon à la fois ! Incroyable.

La forme des franges suggère que la lumière est une onde alors qu'elle est détectée sous forme localisée d'un photon. En fait la figure d'interférence reste la même qu'on envoie la lumière par faisceau ou photon par photon... On peut se poser la question suivante : *Un photon unique peut-il passer par les deux fentes et interférer avec lui-même ?*

Les photons ne sont observables que si ils interagissent avec la matière. On ne peut donc pas connaître la nature du photon entre la source et l'écran. On peut juste affirmer que la lumière se propage sous forme d'une **onde de probabilité**.

Bilan

La lumière présente un double aspect corpusculaire et ondulatoire. Les photons sont détectés de manière aléatoire. La probabilité de détecter un photon en un point est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde lumineuse en ce point. (Voir suite) La lumière se propage sous forme d'une onde de probabilité.

2 La dualité onde-particule de la matière

2.1 La longueur d'onde de Broglie

A noter tout d'abord que lorsque l'on écrit "De Broglie" on doit prononcer "[De Breuil]".

Longueur d'onde de Broglie

En 1924 Le physicien français Louis de Broglie formula que toute particule se comporte comme une onde de matière qui transfère de l'énergie et une quantité de mouvement à la matière en des endroits localisés.

Il attribua alors une longueur d'onde λ_{DB} à toute particule de quantité de mouvement p telle que

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$$

On appelle cette longueur d'onde la longueur d'onde de Broglie.

Les effets quantiques se manifestent dès que la longueur d'onde de Broglie n'est plus négligeables devant les distances caractéristiques du système. On considère la négligeabilité quand cette longueur d'onde est inférieure effectivement de plusieurs ordres de grandeurs aux distances caractéristiques.

Application

Calculer la longueur d'onde de Broglie d'une balle de Tennis de 57g se déplaçant à $25m.s^{-1}$ et celle d'un électron d'énergie 3 keV. Ces objets peuvent ils avoir des propriétés ondulatoires?

Balle de tennis $\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ AN : $\lambda_{DB} = \frac{6,63.10^{-34}}{57.10^{-3} \times 25} = 4,7.10^{-34}$

Ainsi la longueur d'onde est très inférieure aux distances caractéristiques et l'effet est négligeable donc pas de propriétés ondulatoire.

Electron L'électron est d'énergie cinétique $3 = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ Ainsi $\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}}$

AN $\lambda_{DB} = \frac{6,63.10^{-34}}{\sqrt{2 \times 8,1.10^{-31} \times 3.10^8 \times 1,6.10^{-19}}} = 2,2.10^{-11}$

ici c'est environ la taille d'un atome ce n'est plus négligeable donc l'électron possède des propriétés ondulatoires.

En 1927 la vérification expérimentale de C.J.Davisson, L.H.Germer et G.P.Thomson de l'existence des ondes de matière est réalisée en observant la diffraction d'un faisceau d'électrons par un cristal de nickel.

3 Fonction d'onde

3.1 Définition

Une simple onde se propageant, qu'il s'agisse d'une onde dans une corde, d'une onde sonore ou d'une onde lumineuse, est décrite comme une grandeur qui varie selon un mode ondulatoire. Sa valeur observée en un point dépend de la position de ce point et de l'instant où l'observation est faite.

Quelle grandeur variable devrait-on utiliser pour décrire une onde de matière ?

On doit s'attendre à ce que cette grandeur appelée **fonction d'onde** $\psi(x, y, z, t)$ soit plus complexe que la grandeur correspondante d'une onde lumineuse, parce qu'une onde de matière en plus de l'énergie et de la quantité de mouvement transporte une masse et souvent une charge. Dans tous les cas que l'on rencontrera les variables d'espaces et de temps peuvent être séparés et on peut écrire ψ sous la forme

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z)e^{-i\omega t}$$

où l'on notera bien que $\omega = 2\pi f$ est la pulsation de l'onde de matière et que φ représente la partie spatiale de l'onde ψ qui est ici stationnaire.

Qu'entend-t-on par fonction d'onde ?

On entend par fonction d'onde le fait que'une onde de matière comme une onde lumineuse est une onde de probabilité. La probabilité qu'une particule soit détectée dans un intervalle de temps donné est alors proportionnelle à $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ où l'on note $|\psi|$ le module de la fonction d'onde et ψ^* le conjugué de la fonction complexe. On fera bien attention au fait que seule **la densité de probabilité** $|\psi|^2$ a un sens physique.

Fonction d'onde et densités de probabilité

On note $\psi(x, y, z, t)$ la fonction qui représente l'onde de probabilité de présence d'une particule. En générale on considère le cas stationnaire de cette onde ce qui permet d'isoler une partie spatiale et une partie temporelle

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z)e^{-i\omega t}$$

On parle de densité de probabilité de présence comme le carré du module de la fonction d'onde $|\psi|^2$ qui est la seule grandeur physique qui possède une vraie signification et est telle que la probabilité par unité de temps de détecter une particule dans un volume élémentaire centré sur un point donné dans une onde de matière est proportionnelle à la densité $|\psi|^2$ en ce point.

3.2 Cas de la particule libre

En deuxième année on montre que la fonction d'onde associée à la propagation d'une particule libre selon l'axe (Ox) dans le sens croissant s'écrit :

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$$

La fonction φ étant la partie spatiale de ψ dans le cas stationnaire on peut facilement déterminer que

$$\varphi(x) = \psi_0 e^{ikx}$$

On peut donc écrire la densité de probabilité

$$|\psi|^2 = \psi_0^2 |e^{ikx}|^2 = \psi_0^2 = K$$

La densité de probabilité est donc constante sur l'ensemble de l'axe (Ox) , $\forall x \in (Ox)$, $|\psi|^2 = K$.

4 L'inégalité de Heisenberg

4.1 Indétermination quantique

Dans les expériences de physiques les grandeurs mesurées sont aléatoires. C'est une propriété des systèmes quantiques.

Mesure et incertitude

La mesure d'une grandeur X sur un système quantique donne a priori un résultat aléatoire. On notera ainsi $\langle X \rangle$ la moyenne des résultats possibles et ΔX l'écart quadratique moyen de X défini par

$$\Delta X = \sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle}$$

Indétermination quantique

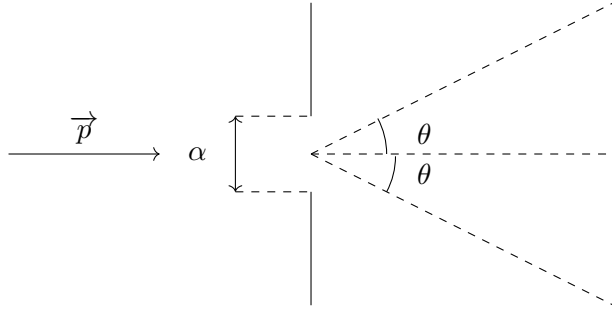
L'écart quadratique moyen ΔX nous renseigne sur la dispersion des résultats possibles pour la mesure de la grandeur X . On appelle l'indétermination quantique de X

4.2 Exemple de la diffraction de la lumière

On considère une particule de quantité de mouvement $\vec{p} = p\vec{u}_z$ arrivant sur une fente de largeur α parallèle à (Oy) . L'onde associée à la particule est diffractée par la fente. Les relations de la diffraction nous donnent alors le demi-angle d'ouverture θ par la relation :

$$\sin \theta = \frac{\lambda_{DB}}{\alpha}$$

En notant toujours λ_{DB} la longueur d'onde de De Broglie.



Avant que la particule ne soit sur la fente, le mouvement est rectiligne suivant (Oz) donc sa quantité de mouvement Δp_x est parfaitement connue ($\Delta p_x = 0$) par contre nous ne pouvons localiser la particule sur (Oz) (particule libre).

Au niveau de la fente, la particule est localisée avec une indétermination quantique $\Delta x \approx \alpha$. A cause du phénomène de diffraction, il y a une indétermination quantique Δp_x telle que

$$\Delta p_x \approx p \sin(\theta) \approx \frac{h}{\lambda_{DB}} \sin(\theta) \approx \frac{h}{\lambda_{DB}} \frac{\lambda_{DB}}{\alpha} = \frac{h}{\alpha}$$

Ainsi on connaît la relation suivante

$$\Delta x \Delta p_x \approx h$$

4.3 Inégalité de Heisenberg Spatiale

inégalité de Heisenberg

Le résultat précédent est un cas particulier du principe d'indétermination d'Heisenberg. Les mesures de positions x et de quantité de mouvement \vec{p}_x selon un même axe (Ox) sont affectées d'indéterminations quantiques Δx et Δp_x dont le produit est au moins de l'ordre de grandeur de la constante de Planck réduite $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Ce principe se traduit

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar$$

Plus on veut connaître précisément la quantité de mouvement d'une particule, plus l'incertitude sur sa position sera grande et inversement. La position de la particule qui suit une trajectoire précise perd sa signification dans le monde quantique : cette inégalité est une contrainte fondamentale de la physique quantique. Le cas de la particule libre est un cas extrême.

5 Quantification de l'énergie

5.1 Notion de quantification

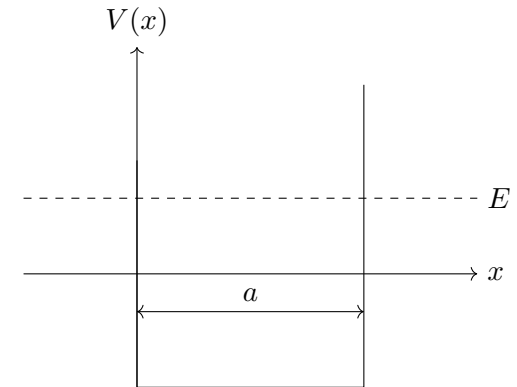
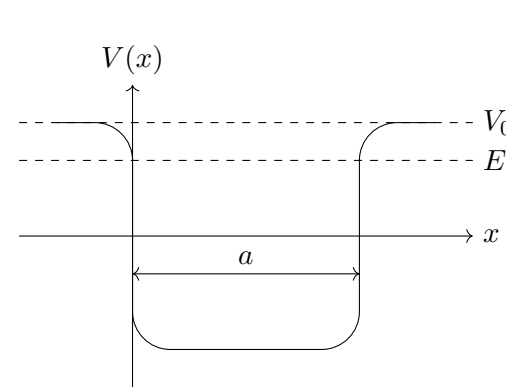
Quantification

Une grandeur physique est quantifiée lorsqu'elle ne peut prendre qu'une suite de valeurs discrètes. On parle de quantification.

5.2 Etude d'une particule dans un puits infini à une dimension

5.2.1 Puits de potentiel infini

La particule se déplace entre deux murs infranchissables perpendiculaires à (Ox) et distants de a . La particule est confinée entre $0 < x < a$. On notera $V(x)$ le potentiel de la particule confinée dans le puit quantique.



La première figure décrit le modèle réel d'un puit fini de potentiel quantique. La deuxième figure est une modélisation du puits de potentiel dans le cas $E \ll V_0$ et $d \ll \lambda_{DB}$

5.2.2 Quantification de la longueur d'onde de De Broglie

On considère pour la suite une étude à une dimension, selon l'axe (Ox). Soit l'onde de matière d'une particule confinée dans une région de l'espace entre $x = 0$ et $x = \alpha$.

propriété

La probabilité par unité de temps de détecter une particule entre x et $x + dx$ est

$$dP = |\psi(x, t)|^2 dx$$

en ce point.

On peut établir des conditions aux limites : la probabilité que la particule sorte du puit est nulle donc

$$\begin{cases} |\psi(x = 0, t)|^2 = 0 \\ |\psi(x = \alpha, t)|^2 = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \varphi(x = 0, t) = 0 \\ \varphi(x = \alpha, t) = 0 \end{cases}$$

L'équation décrivant l'évolution dans l'espace et dans le temps de la fonction d'onde d'une particule quantique a été proposée par Erwin Schrödinger, cette équation est un postulat de la mécanique quantique.

L'équation de Schrödinger

Dans le cas des états stationnaires cette équation connue sous le nom d'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

où l'on note $V(x)$ le potentiel de la particule.

Le potentiel de la particule $V(x)$ est donné par

$$\begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq \alpha \\ -\infty & \text{pour } x > \alpha \end{cases}$$

5.2.3 Résolution dans le cas du puit quantique infini

Les régions de l'espace où le potentiel est infini sont interdites à la particule (probabilité nulle de l'y trouver) donc $\varphi(x) = 0$ pour $x < 0$ et $x > \alpha$. Ainsi on étudie le cas spatial de l'ensemble des valeurs comprises entre 0 et α .

Pour $0 < x < \alpha$, l'équation de Schrödinger s'écrit donc

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

On est alors amené à distinguer trois cas

- Dans le cas où $E < 0$. On se trouve avec une équation du second degré qui n'est pas un oscillateur harmonique. On pose alors

$$k = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} > 0$$

Ainsi la solution pour la fonction φ donne

$$\varphi(x) = A \exp(kx) + B \exp(-kx)$$

La continuité de la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = \alpha$ impose les conditions aux limites $A = B = 0$. Ce cas est donc sans intérêt.

- Dans le cas où $E = 0$, par double intégration on détermine que la solution φ s'écrit

$$\varphi(x) = Ax + B$$

Par les conditions aux limites, on détermine également que $A = B = 0$, ce cas est donc également sans intérêt.

- Dans le cas $E > 0$ on a ici un oscillateur harmonique et on pose donc le vecteur d'onde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$$

La solution s'écrit alors

$$\varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

La continuité de la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = \alpha$ impose que $A = 0$ et $B \sin(k\alpha) = 0$. Pour avoir une fonction non nulle on a $A \neq 0$ ce qui nous donne la quantification de k par

$$k\alpha = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

On introduit alors la notion de modes quantiques $n \in \mathbb{N}^*$ tels que

$$\varphi_n(x) = B_n \sin\left(n\frac{\pi}{\alpha}x\right), \quad \text{pour le mode quantique } n$$

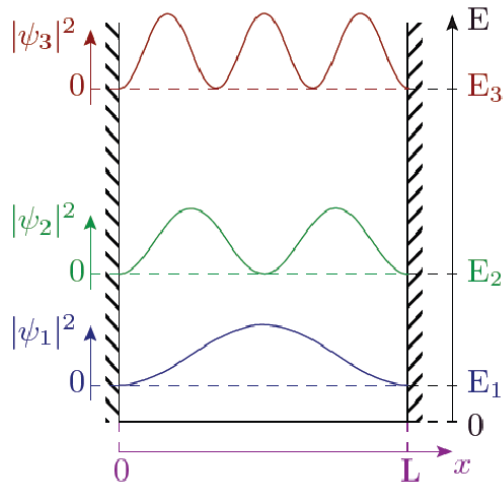


FIGURE 5 – Modes d'ondes

5.2.4 Quantification de l'énergie

On peut tenter de déterminer de deux façon les niveaux d'énergies de la particule quantique, la première façon utilise la quantité k . A partir de la relation $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$ on obtient les valeurs possibles de l'énergie de la particule quantique.

$$E_n = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\alpha^2} \right) n^2 \quad \forall n \in \mathbb{N}^*$$

Il y a quantification de l'énergie. D'une deuxième manière on peut remarquer que l'énergie mécanique E de la particule est égale à son énergie cinétique car le potentiel est nul dans le puit . Ainsi

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_{DB}^2}$$

Mais la relation $k\alpha = n\pi$ nous permet d'écrire $k = \frac{2\pi}{\lambda_{DB}}$ (relation entre longueur d'onde et vecteur d'onde) et encore

$$E_n = \left(\frac{h^2}{8m\alpha^2} \right) n^2 \quad \forall n \in \mathbb{N}^*$$

Nombre quantique

Chaque valeur de n décrit un état de l'onde de matière : on appelle **nombre quantique** le nombre entier n .

Modes d'oscillation

Les modes d'oscillation de l'onde de matière ne peuvent prendre que certaines longueurs d'onde telle que :

$$\alpha = n \frac{\lambda_{DB}}{2} \quad n \in \mathbb{N}$$

On peut dresser une analogie avec les modes propres d'une corde vibrante de longueur α fixée en ses deux extrémités.

Proposition

Une particule quantique confinée dans une région de l'espace de taille finie a son énergie quantifiée.

Définitions

Le niveau $n = 1$ s'appelle le niveau **fondamental**. Les niveaux tels que $n > 1$ sont appelés **niveaux excités**.

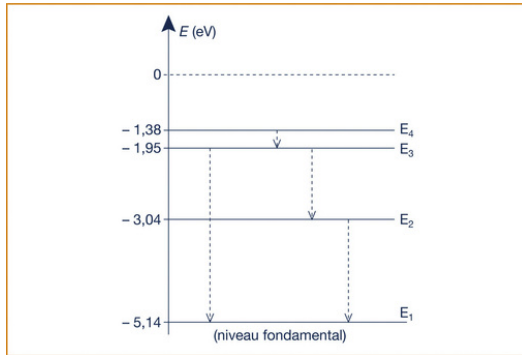


FIGURE 6 – Diagramme de niveaux d'énergie

5.2.5 Transitions énergétiques

Proposition

La transition énergétique entre deux niveaux d'énergies E_{haut} et E_{bas} peut se faire par absorption d'un photon de fréquence ν selon la conservation de l'énergie

$$E_{haut} - E_{bas} = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

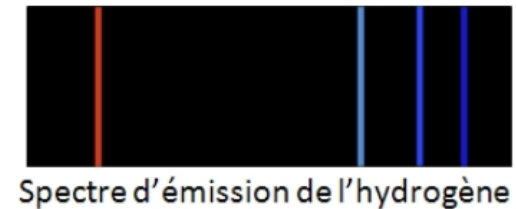
5.3 Modèle de Bohr

5.3.1 Spectre d'émission de l'atome d'hydrogène

Quand un gaz (matière) est excité (par effet photoélectrique, thermique) il émet des rayonnements de longueurs d'onde bien spécifiques : c'est le spectre d'émission qui est un spectre de raies.

Obtention du spectre

Le tube à décharge est constitué d'un tube en verre muni aux extrémités de 2 électrodes métalliques. Il contient du dihydrogène sous faible pression. Une tension croissante est appliquée entre les deux électrodes : vers 100V par effet thermoélectronique, les électrodes émettent un flux d'électrons, ils entrent alors en collision avec le dihydrogène vapeur provoquant la dissociation de certaines molécules en atomes d'hydrogènes excités par les collisions ; en se déséxcitant les atomes de H émettant des radiation électromagnétiques. La décomposition de la lumière émise par le tube fournit le spectre d'émission de l'atome H . Le



spectre d'émission est constitué d'une série de raies portant le nom de leur inventeur.

Série de Balmer(1885)

C'est la première série observée qui comprend 4 raies dans le visible et des raies dans le proche UV.

Raies	$\lambda(nm)$	Couleur
$H\alpha$	656,28	Rouge
$H\beta$	486,13	Bleu-Vert
$H\gamma$	434,05	Violet
$H\delta$	410,12	Violet

D'autres raies furent plus tard mises en évidence : les séries de LYMAN en 1906 dans l'UV, les séries de PASCHEN en 1909, les séries de BRACKET en 1922 et celles de PFUND en 1924 dans l'infrarouge.

Toutes les séries de raies ont la même structure : les raies sont de moins en moins intenses et de plus en plus rapprochées quand la longueur d'onde diminue.

5.4 Relation de Rydberg et Ritz

En s'appuyant sur les travaux de Balmer, Rydberg et Ritz ont montré que les longueurs d'onde des raies obéissent à la relation suivante :

$$\frac{1}{\lambda_{n,m}} = R_H \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right] \quad 0 < n < m$$

en notant R_H la constante de Rydberg de valeur $R_H = 1,09677 \cdot 10^7 m^{-1}$

n	Série	$\frac{1}{\lambda}$	m	domaine
1	Lyman	$R_H \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{m^2} \right]$	2,3,4...	UV
2	Balmer	$R_H \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right]$	3,4,5...	UV + Visible
3	Paschen	$R_H \left[\frac{1}{3^2} - \frac{1}{m^2} \right]$	4,5,6...	Proche IR
4	Bracket	$R_H \left[\frac{1}{4^2} - \frac{1}{m^2} \right]$	5,6,7...	IR
5	Pfund	$R_H \left[\frac{1}{5^2} - \frac{1}{m^2} \right]$	6,7,8...	IR lointains.

Actuellement on a réussi à mettre en évidence toutes les séries jusqu'à $n = 27$. Pour chaque série lorsque $m \rightarrow +\infty$ alors

$$\frac{1}{\lambda_{max}} = R_H \frac{1}{n^2}$$

5.5 Evolution du modèle de l'atome d'hydrogène

1. **Modèle planétaire de Rutherford** : Par hypothèse l'électron décrit une orbite circulaire de rayon R à la vitesse v autour du proton (noyau) ponctuel fixe (O) dans le référentiel d'étude. Une étude mécanique en repère circulaire permet d'établir la vitesse de l'électron

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m R}$$

De plus l'énergie mécanique se détermine :

$$E_m = \frac{K}{2R} = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 R}$$

Ce modèle présente quelques limites : Pas de minimum d'énergie donc pas d'état stable, toutes les valeurs de l'énergie sont permises : pas de spectre de raies, l'électron chargé possède un mouvement accéléré et donc émet continuellement un rayonnement, il perd alors de l'énergie et se rapproche du noyau et finit par tomber sur lui.

2. **Modèle de Bohr**

Postulats de Bohr

- (a) l'électron n'existe que certaines orbites circulaires stables et durables autour du noyau : états stationnaires. Lorsque l'électron est dans un état stationnaire, l'atome n'émet pas de rayonnement.
- (b) Le moment cinétique de l'électron de norme L est quantifiée c'est à dire qu'il ne peut prendre que certaines valeurs discrètes

$$L = n\hbar = n \frac{h}{2\pi} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

L'électron à un mouvement circulaire uniforme donc la norme du moment cinétique par rapport à (O) a pour expression : $L = mvr$. Ainsi en reprenant l'expression de la vitesse il vient

$$L = \sqrt{\frac{me^2 R}{4\pi\epsilon_0}} = n\hbar$$

d'où

$$R = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{me^2} \times n^2 = a_0 \times n^2$$

avec $a_0 = 52,9pm$ le rayon de Bohr. Plus n augmente plus le rayon augmente. Le rayon de l'orbite est quantifiée et sera notée R_n . A chaque orbite R_n correspond un état stationnaire d'énergie :

$$E_n = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 R} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \times \frac{1}{n^2}$$

L'énergie est quantifiée et

$$AN : \quad E_n = -13.6/n^2 eV$$

L'énergie est négative, l'entier n qui définit à la fois l'orbite et l'énergie est appelée nombre quantique principal. On obtient ainsi le diagramme d'énergie de l'atome d'hydrogène. $n = 1$ correspond à l'état fondamental, et $n > 1$ correspond aux états excités. Lorsque n tend vers l'infini, l'énergie tend vers 0. Les niveaux deviendront continus quand l'énergie est positive et l'électron libre.

L'émission ou l'absorption d'un photon correspond à la transition d'un électron d'un état énergétique i à un autre état énergétique j . La relation de planck Einstein donne

$$h\nu_{n,m} = E_n - E_m$$

De plus le modèle de Bohr permet de retrouver la relation de Rydberg et Ritz

$$h\nu_{i,j} = E_i - E_j = h \frac{c}{\lambda_{i,j}}$$