

Introduction (1)

La physique quantique est une branche relativement récente de la physique, le début de sa mise en place se situant au début du XXe siècle. . . Elle continue d'évoluer à ce jour !

La physique quantique est à l'origine d'une seconde révolution industrielle encore en cours. On estime à **50 % la part du PIB des pays développés** qui découle directement des technologies à base quantique (laser, transistor...).

Le Prix Nobel de physique 2012 a été attribué pour des travaux expérimentaux vérifiant des fondements de la physique quantique (Serge Haroche et David Wineland).

Introduction (2)

La mécanique quantique décrit la matière à l'échelle atomique et au-dessous. De la mécanique quantique, découle la réalisation d'inventions aussi importantes que le laser, le microprocesseur, l'horloge atomique, l'imagerie médicale par résonance magnétique nucléaire... Les phénomènes quantiques qui apparaissent à l'échelle microscopique sont parfois difficiles à appréhender car ils ne correspondent pas à notre intuition naturelle fondée sur notre expérience du monde macroscopique. À la base de leur compréhension se trouve l'idée de dualité onde-particule. Il en découle la quantification de l'énergie.

Dualité

Onde-particule de

la lumière

Rayonnement Thermique

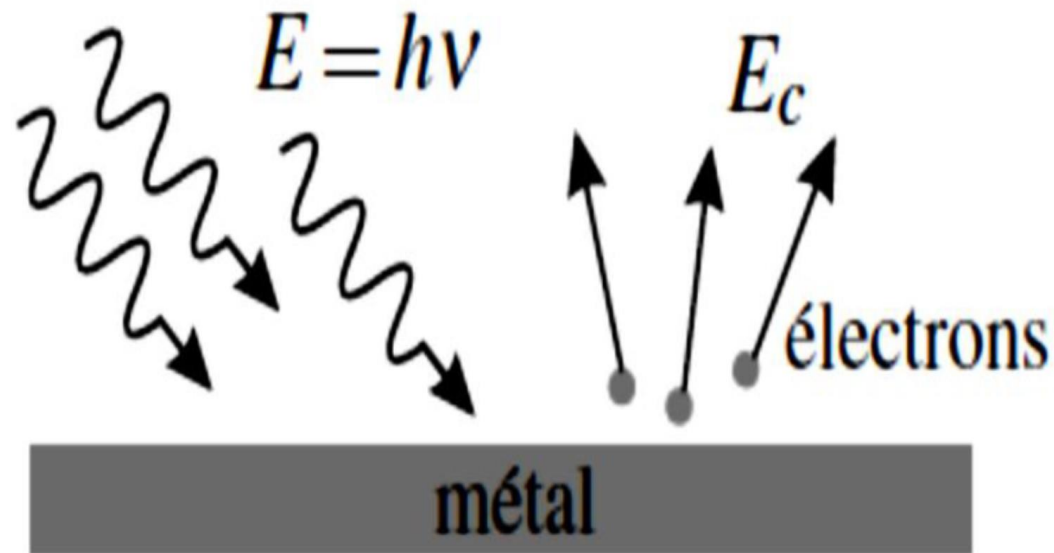
Pour réussir à expliquer les propriétés de l'émission thermique du rayonnement électromagnétique d'un corps chauffé (ce rayonnement est pour l'essentiel dans le domaine infrarouge), Max Planck utilisa l'hypothèse que l'énergie s'échange entre la matière et le rayonnement par multiples d'une valeur minimale, le quantum d'énergie, dont l'expression est :

$$E = h\nu$$

où ν est la fréquence du rayonnement et $h = 6,62606957 \cdot 10^{-34}$ J.s est la constante de Planck

Effet photo-électrique (1)

L'**effet photoélectrique (1887)** est l'émission d'électrons d'un matériau métallique lorsque celui-ci est exposé à un rayonnement électromagnétique (**domaine du visible ou ultraviolet**) de fréquence suffisamment élevée, c'est-à-dire supérieure à une **fréquence** dite **seuil** qui ne dépend que du matériau utilisé.



Effet photo-électrique (2)

Lorsqu'un photon, appartenant au faisceau lumineux, entre en collision avec un électron situé à la surface du métal, ce dernier l'absorbe entièrement et reçoit l'énergie $h\nu$. Mais pour qu'il puisse quitter le métal, cette énergie reçue doit être au moins égale à l'énergie qui le lie au métal appelé travail d'extraction W_{ext} . La fréquence seuil correspond donc à un photon ayant juste l'énergie correspondante: $h\nu_s = W_{ext}$. Si le photon apporte une énergie supérieure, l'électron extrait acquiert en plus une énergie cinétique E_C égale à :

$$E_C = \frac{1}{2} m_e v_e^2 = h\nu - W_{ext} = h\nu - h\nu_s = h(\nu - \nu_s)$$

Effet photo-électrique (3)

Il est important de comprendre que les échanges matières (électrons)-rayonnement (photons) se font sur **le modèle 1** \leftrightarrow **1: un seul photon interagit avec un seul électron**. Par conséquent à **basse fréquence** ($\nu < \nu_s$), les photons incidents n'ont pas suffisamment d'énergie pour extraire les électrons et augmenter l'intensité lumineuse revient à augmenter le nombre de photons, mais pas à les rendre plus énergétiques individuellement: **aucun électron n'est arraché**. Inversement, si la **fréquence est suffisante** ($\nu > \nu_s$), alors augmenter l'intensité lumineuse augmente le nombre de photons et donc le **nombre d'électrons arrachés** par suite l'intensité du courant détecté.

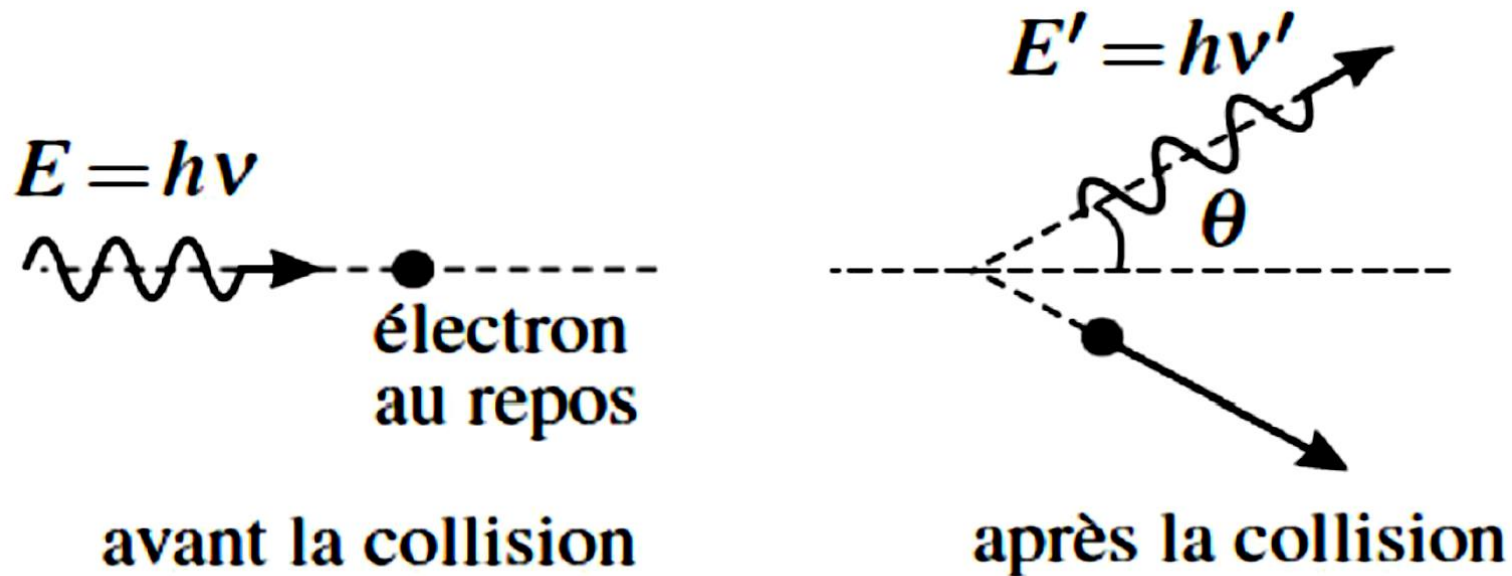
Diffusion Compton (1)

En envoyant des rayons X de longueur d'onde $\lambda=0,071$ nm sur une cible de carbone, A. Compton observa un rayonnement diffusé de longueur d'onde différente de la longueur d'onde incidente. Il put interpréter les résultats expérimentaux en faisant l'hypothèse d'une collision entre les électrons contenus dans l'échantillon et des particules arrivant avec le rayonnement incident, particules dotées de l'énergie $E = h\nu = hc/\lambda$ et de la quantité de mouvement :

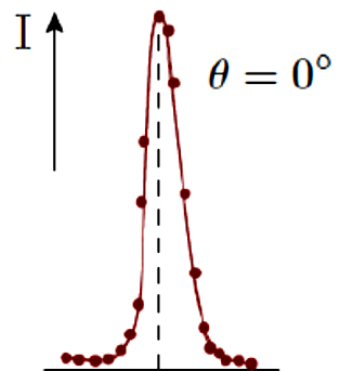
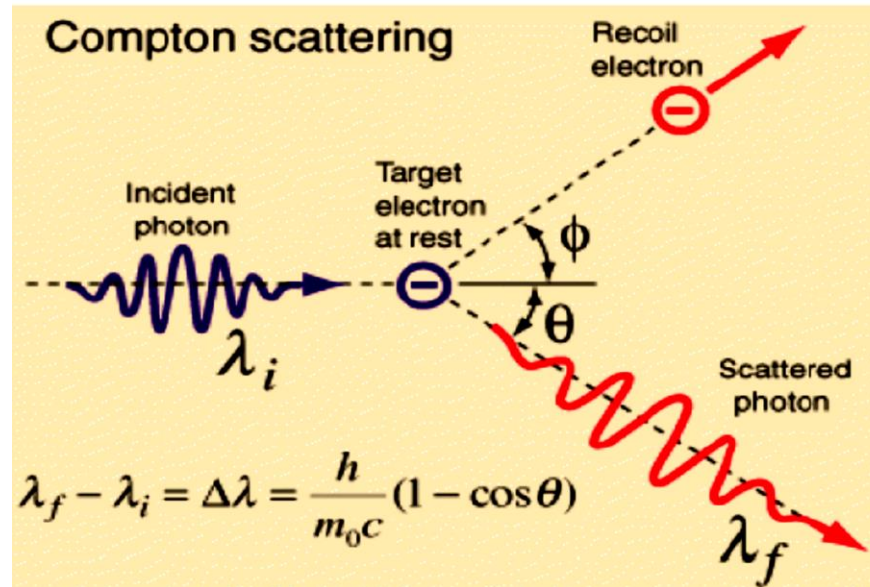
$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Diffusion Compton (2)

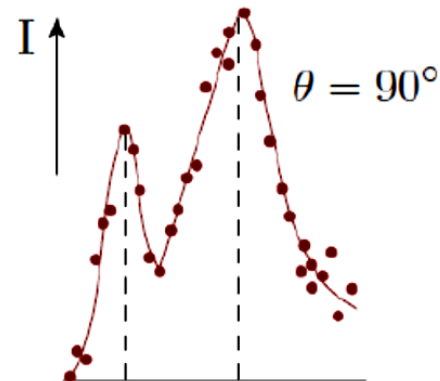
Au cours de cette collision la particule du rayonnement perd une partie de son énergie, ce qui explique qu'elle reparte avec une énergie $E' < E$, donc une fréquence $\nu' < \nu$ et une longueur d'onde $\lambda' > \lambda$.



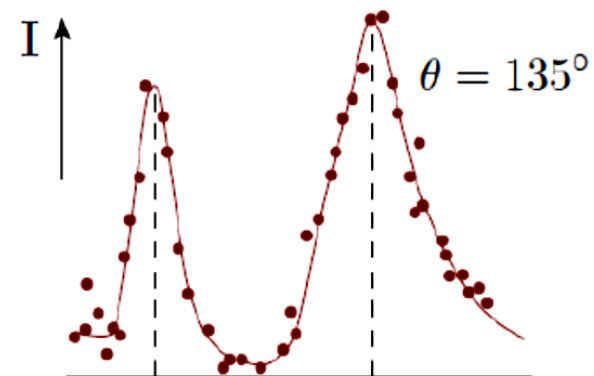
Diffusion Compton (3)



$\lambda = 0,0709 \text{ nm}$



$\lambda \quad \lambda' = 0,0731 \text{ nm}$



$\lambda \quad \lambda' = 0,0749 \text{ nm}$

Photon (1)

La particule associée à la lumière s'appelle le photon. Ses propriétés sont les suivantes :

- le photon a une masse nulle
- le photon se déplace à la vitesse de la lumière égale à $c = 3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ dans le vide.
- le photon associé à une lumière de fréquence ν et de longueur d'onde $\lambda = c/\nu$ possède l'énergie :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

h est la constante de Planck

Photon (2)

- le photon associé à une lumière de fréquence ν se propageant dans la direction du vecteur unitaire \vec{u} possède la quantité de mouvement :

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

L'énergie du photon est donnée par la relation :

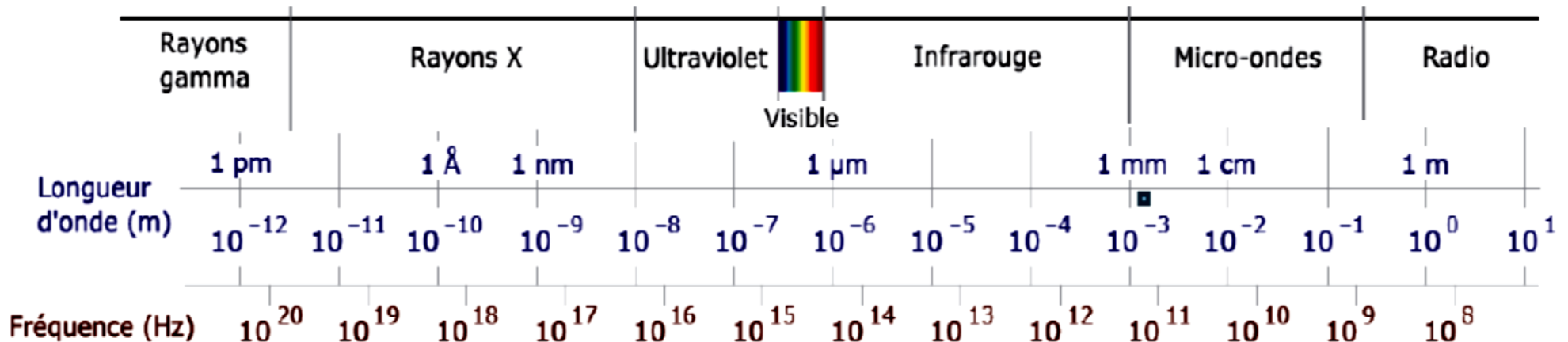
$$E(\text{eV}) = \frac{1240}{\lambda(\text{nm})}$$

$$1 \text{ eV (électron - volt)} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Les relations de Planck – Einstein

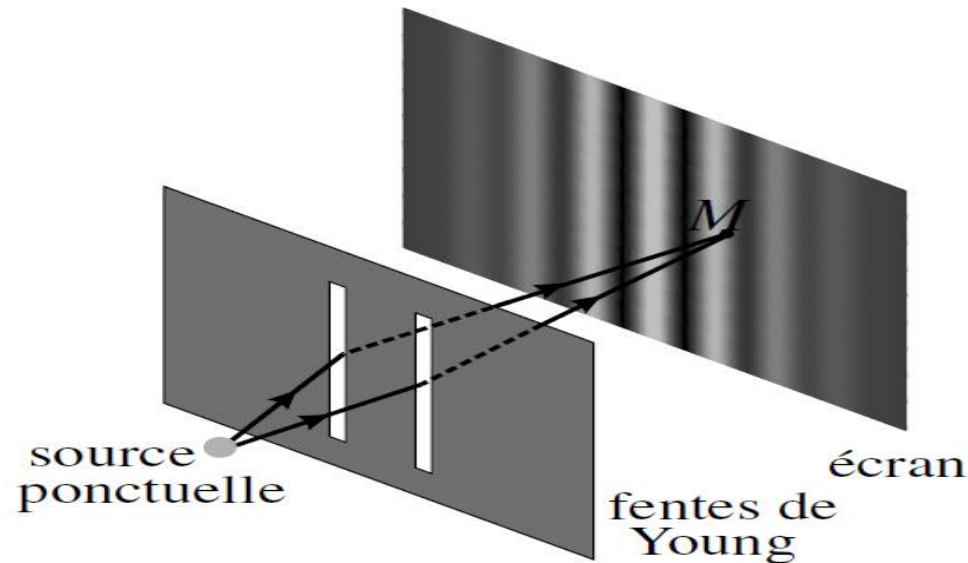
Les relations entre **l'aspect ondulatoire** et **l'aspect corpusculaire** sont appelées les relations de Planck – Einstein: $E = h\nu$; $p = E/c = h/\lambda$
En utilisant la pulsation et le vecteur d'onde:

$$E = \hbar\omega \quad ; \quad p = \hbar k \quad \hbar = h/2\pi = 1,0510^{-34} \text{ j.s}$$



Franges d'interférences et photons (1)

Une source ponctuelle, quasi monochromatique, éclaire un écran opaque percé de deux fentes rectilignes identiques très fines derrière lesquelles on place un écran parallèle au plan des fentes. Sur l'écran on observe des franges rectilignes parallèles aux fentes



Franges d'interférences et photons (2)

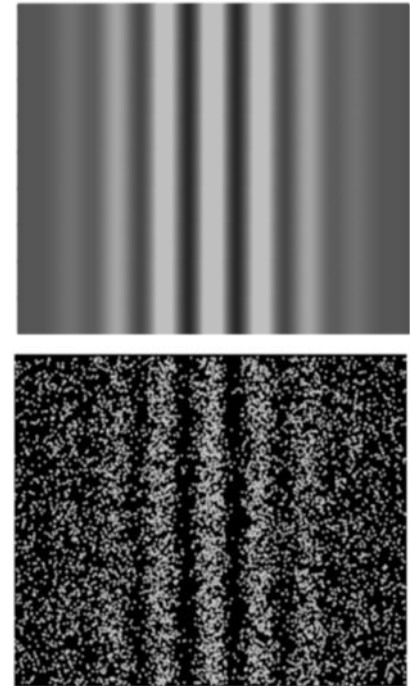
L'explication qualitative du phénomène est la suivante : en tout point M de l'écran parviennent deux ondes qui sont diffractées par les deux fentes de Young. Les longueurs des deux rayons lumineux entre la source et M sont différentes, donc les deux ondes sont décalés dans le temps ce qui se traduit par un déphasage qui dépend de la position de M sur l'écran. On observe ainsi **des franges brillantes**, au centre desquelles le déphasage est un multiple de 2π (**condition d'interférence constructive**) et **des franges sombres** au centre desquelles le déphasage est un multiple entier impair de π (**condition d'interférence destructive**).

Franges d'interférences et photons (3)

Si on envoie les particules (photons ou matière) une par une sur le dispositif de Young:

□ On observe des impacts sur l'écran qui traduisent **le comportement corpusculaire de la matière et de la lumière.**

□ On ne peut pas prévoir la position de chaque impact sur l'écran, mais uniquement la probabilité d'impact en fonction de la position sur l'écran. Cette distribution de probabilité résulte d'une **approche ondulatoire** et fait apparaître les interférences.



Conclusions

- ❑ La lumière est **de nature ondulatoire**
- ❑ La lumière est **de nature corpusculaire**
- ❑ Ces deux natures sont à la fois **complémentaires et indissociables** : il existe donc une dualité onde-corpuscule

La lumière: onde et particule

Grandeurs particulières	Grandeurs ondulatoires
$E = \text{Energie}$ $p = \text{Quantité de mouvement}$	$f = \text{fréquence}$ $\lambda = \text{longueur d'onde}$
$E = hf = hc/\lambda$ (relation de Planck-Einstein) $p = h/\lambda$	

Dualité

Onde-particule de

la matière

Relation de de Broglie (1)

Toute particule de quantité de mouvement \vec{p} possède un comportement ondulatoire et peut être décrite comme une onde monochromatique, dite **onde de matière** et possédant une longueur d'onde λ telle que:

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

λ_{DB} est appelée **longueur d'onde de de Broglie de la particule**.

La quantité de mouvement de la particule peut être calculée en utilisant l'expression de la mécanique classique $p = mv$ où v est la vitesse de la particule à condition que v soit très inférieure à la vitesse de la lumière.

$$v < \frac{c}{10}$$

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

Relation de de Broglie (2)

Les électrons: onde et particule ?

Grandeurs ondulatoires	Grandeurs particulières
f = fréquence λ = longueur d'onde	E = Energie p = Quantité de mouvement
$\left. \begin{array}{l} \lambda = h/p \\ f = E/h \end{array} \right\} \text{relations de Louis de Broglie}$	

Relation de de Broglie (3)

Exercice d'application

1. Quelle est longueur d'onde de de Broglie d'un électron ayant une énergie cinétique $E_C = 54 \text{ eV}$?

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

2. Quelle est longueur d'onde de de Broglie d'un électron ayant une énergie cinétique $E_C = 100 \text{ keV}$?

Fonction d'onde et inégalité de Heisenberg

Fonction d'onde (1)

En physique quantique, les particules sont entièrement décrites par la donnée d'une fonction mathématique de l'espace et du temps nommée **la fonction d'onde** et universellement notée :

$$\text{Fonction d'onde} \equiv \psi(x, t)$$

La fonction d'onde contient toute l'information disponible : il n'y a pas d'autre élément dans le formalisme quantique qui pourrait permettre de savoir, avant de faire la mesure, où la particule va être détectée.

Fonction d'onde (2)

On considère l'expérience d'interférence d'électrons de la figure ci-contre. Le module carré de la fonction d'onde va nous renseigner sur la probabilité de présence de l'électron en un endroit donné à un instant donné

Probabilité (en x à δx près)

$$= |\psi(x)|^2 \delta x = P(x) \delta x$$



Electrons create interference fringes.

FIGURE 39.5 The double-slit experiment with electrons.

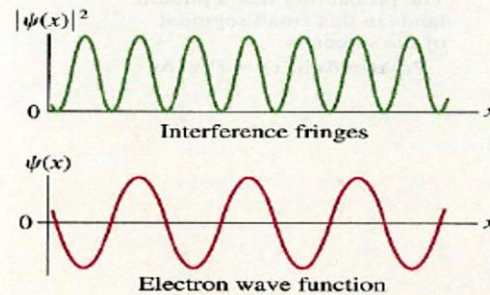
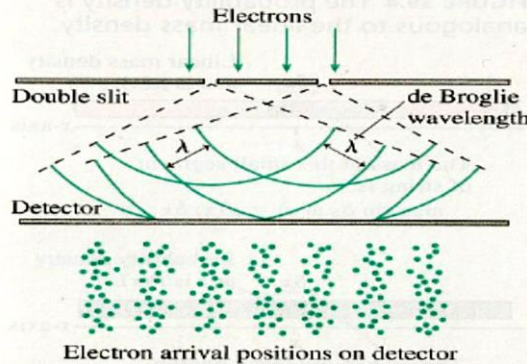
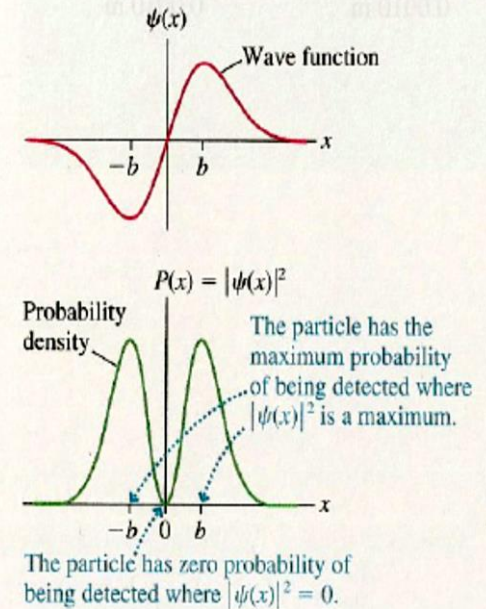


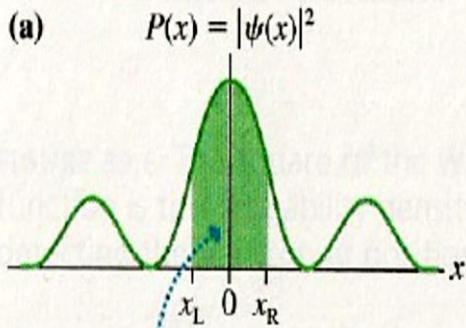
FIGURE 39.6 The square of the wave function is the probability density for detecting the electron at position x .



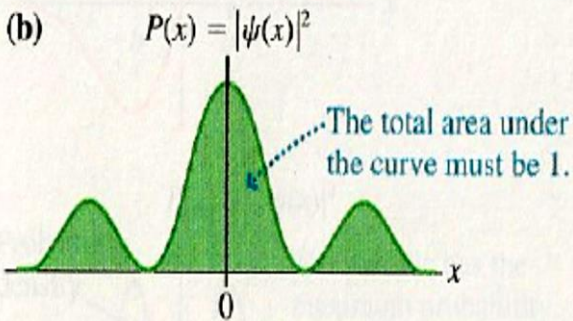
$P(x) \equiv$ densité de probabilité en m^{-1}
 = probabilité de trouver la particule en x à δx près à un instant donné
 = probabilité par unité de longueur

Fonction d'onde (3)

FIGURE 39.8 The area under the probability density curve is a probability.



The area under the curve between x_L and x_R is the probability of finding the particle between x_L and x_R .



The total area under the curve must be 1.

Considérons la figure ci-contre, la probabilité de trouver l'électron entre x_L et x_R est obtenu en sommant (intégrant) la densité de probabilité soit:

$$\text{Probabilité (entre } x_L \text{ et } x_R) = \int_{x_R}^{x_L} P(x) dx = \int_{x_R}^{x_L} |\psi(x)|^2 dx$$

On est certain, probabilité de 1, de trouver (grâce à un détecteur) l'électron quelque part entre $-\infty$ et $+\infty$. Cela nous donne la **condition de normalisation à laquelle doit satisfaire toute fonction d'onde** :

$$\text{Condition de normalisation: } \int_{-\infty}^{+\infty} P(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Fonction d'onde (4)

Comparaison physique classique - physique quantique

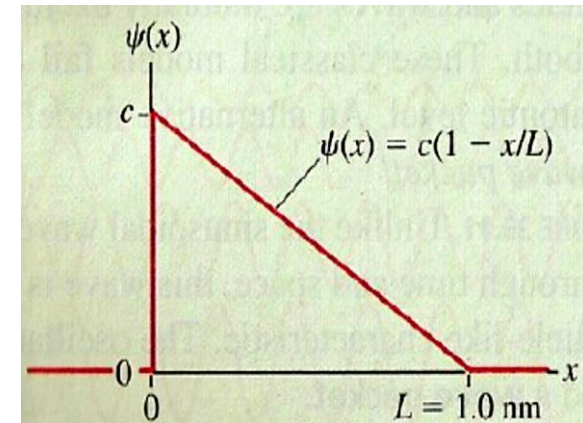
Physique classique- physique du mouvement	Physique quantique-physique probabiliste
Une particule est décrite par sa position $x(t)$	Une particule est décrite par sa fonction d'onde $\psi(x,t)$
$x(t)$ est obtenue par application des lois de Newton (cf. cours de mécanique)	$\psi(x,t)$ est obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger (une équation différentielle, pas au programme)

Fonction d'onde (5)

Exercice d'application

La figure ci contre montre la fonction d'onde d'une particule confinée dans une « boîte unidimensionnelle » entre $x = 0$ nm et $x = L = 1$ nm. La fonction d'onde vaut 0 au-delà.

- Déterminer la valeur de la constante c pour que la fonction d'onde soit normalisée.
- Représenter graphiquement la densité de probabilité $P(x)$.
- Déterminer la position x telle que l'on ait 50 % de chance de trouver la particule entre 0 et cette position.



Equation de Schrödinger (1)

Une particule de masse m , possédant une énergie potentielle $E_P(x, t)$ est décrite par une fonction d'onde dont le comportement est régi par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_P \psi$$

On peut rechercher des solutions de fonction d'onde sous la forme : $\psi(x, t) = \phi(x)\chi(t)$

La séparation des variables permet de montrer que la fonction d'onde se met alors sous la forme : $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$ et que la fonction $\phi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire.

Equation de Schrödinger (2)

Une particule de masse m , possédant une énergie potentielle $E_P(x, t)$ est décrite par une fonction d'onde $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$ dont la dépendance spatiale est solution de :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + E_P \phi = E \phi$$

\Rightarrow

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + (E - E_P) \phi = 0$$

Avec $E = \hbar\omega$ est l'énergie totale, constante, du système.

Inégalité de Heisenberg (1)

La mesure, à un instant donné quelconque, de la position x et de la quantité de mouvement (l'impulsion) p_x sur l'axe (Ox) présentent des indéterminations fondamentales respectives. Elles sont notées Δx et Δp_x et vérifient l'inégalité spatiale d'Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

- L'inégalité est bien entendu aussi valable dans les directions y et z .
- Cette inégalité interdit donc qu'une particule soit parfaitement immobile à une position fixée. En effet, si une particule est localisée à une position fixée exactement, alors $\Delta x = 0$ et si la particule est parfaitement immobile, alors $\Delta p_x = 0$. Dans ce cas, on ne vérifierait pas l'inégalité d'Heisenberg.

Inégalité de Heisenberg (2)

Cette inégalité montre qu'un état quantique ne donne pas une connaissance parfaite de cet état du point de vue classique. En d'autres termes, il est impossible de déterminer de façon simultanée et avec une précision infinie la position et la quantité de mouvement d'une particule. **La notion de trajectoire disparaît en mécanique quantique.**



Oscillateur Harmonique quantique

Energie minimale (1)

L'oscillateur harmonique (OH) est caractérisé par une énergie potentielle:

$$E_p(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Pour déterminer la fonction d'onde spatiale, il suffit en principe de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \phi = 0$$

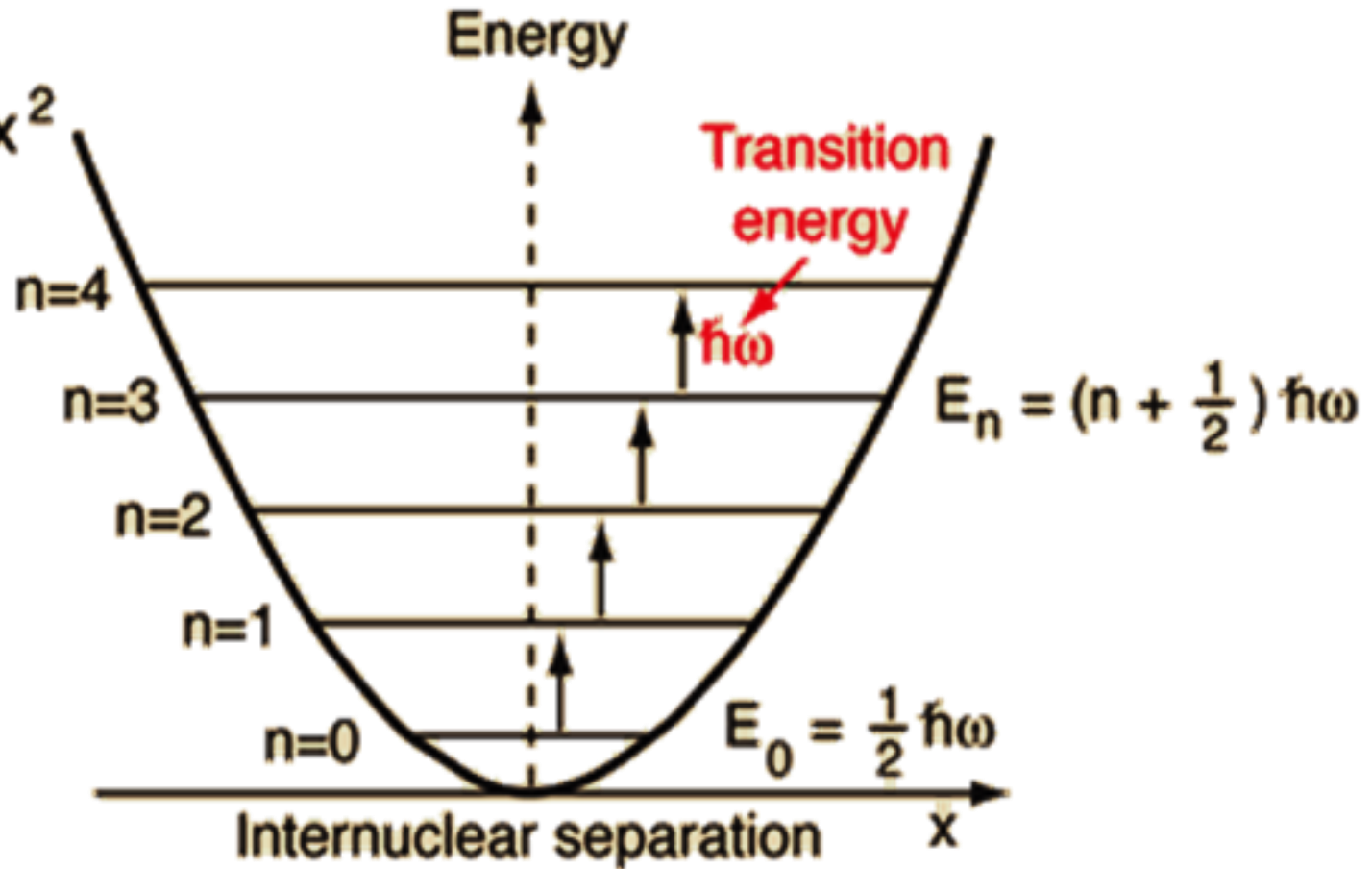
les valeurs d'énergie permises pour un OH de pulsation propre ω sont :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Energie minimale (2)

Potential energy
of form

$$\frac{1}{2}kx^2$$



Energie minimale (3)

Les solutions de l'équation harmonique s'écrivent sous la forme $x = A \sin(\omega t + \varphi)$. A et φ sont deux paramètres dépendant des conditions initiales. L'énergie totale de l'OH vaut

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m A^2$$

Calculons les valeurs moyennes dans le temps de:

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} A^2 = \frac{E}{m \omega^2}$$

$$\langle p \rangle = 0, \quad \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2} m^2 \omega^2 A^2 = m E$$

Energie minimale (4)

Les incertitudes sur x et p valent:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{mE}$$

L'application de l'inégalité d'Heisenberg conduit alors au résultat suivant :

$$\Delta x \times \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} \times \sqrt{mE} \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{soit} \quad E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

Energie minimale (5)

Le principe d'indétermination d'Heisenberg permet de montrer que l'énergie mécanique d'un oscillateur harmonique quantique est nécessairement supérieure à une valeur minimale E_{min} non nulle:

$$E_m = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 \geq \frac{1}{2} \omega^2 \hbar = E_{min}$$

et

$$E_{min} > 0$$

L'énergie mécanique d'un oscillateur harmonique quantique ne peut jamais être inférieure à $\omega^2 \hbar / 2$

Quantification de l'énergie d'une particule confinée

Définition

Une grandeur physique est quantifiée lorsqu'elle ne peut prendre qu'une **suite de valeurs discrètes**. On parle de **quantification**. L'énergie mécanique d'une particule confinée dans une région limitée de l'espace est quantifiée. Le cas le plus simple est celui d'une particule dans un puits infini à une dimension.

Quantification de l'énergie (1)

On peut illustrer beaucoup de principes de la physique quantique, sans résoudre l'équation de Schrödinger, en considérant le modèle simple d'une particule de masse m confinée dans une boîte à 1D de longueur ℓ . Il s'agit d'un premier modèle pour décrire un électron dans un atome, un proton dans un noyau par exemple. La particule se trouvant dans la boîte, sa fonction d'onde doit être nulle partout en dehors de la boîte soit:

$$\psi = 0 \text{ pour } x \leq 0 \text{ et } x \geq \ell$$

Quantification de l'énergie (2)

On admet que **la fonction d'onde doit être continue**, elle s'annule donc aussi aux deux extrémités de la boîte. On retrouve les mêmes conditions que pour **une onde stationnaire**. Cela impose les longueurs d'ondes possibles:

$$\ell = n \frac{\lambda_{DB}}{2}, \quad \text{où } n \text{ est un entier}$$

$$\lambda_{DB,n} = \frac{2\ell}{n}, \quad \text{où } n \text{ est un entier}$$

Quantification de l'énergie (3)

L'énergie mécanique de la particule à l'intérieur du puits, $E = E_c + E_p$, se résume à son énergie cinétique $E_c = p^2/2m$ puisque l'énergie potentielle est nulle.

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

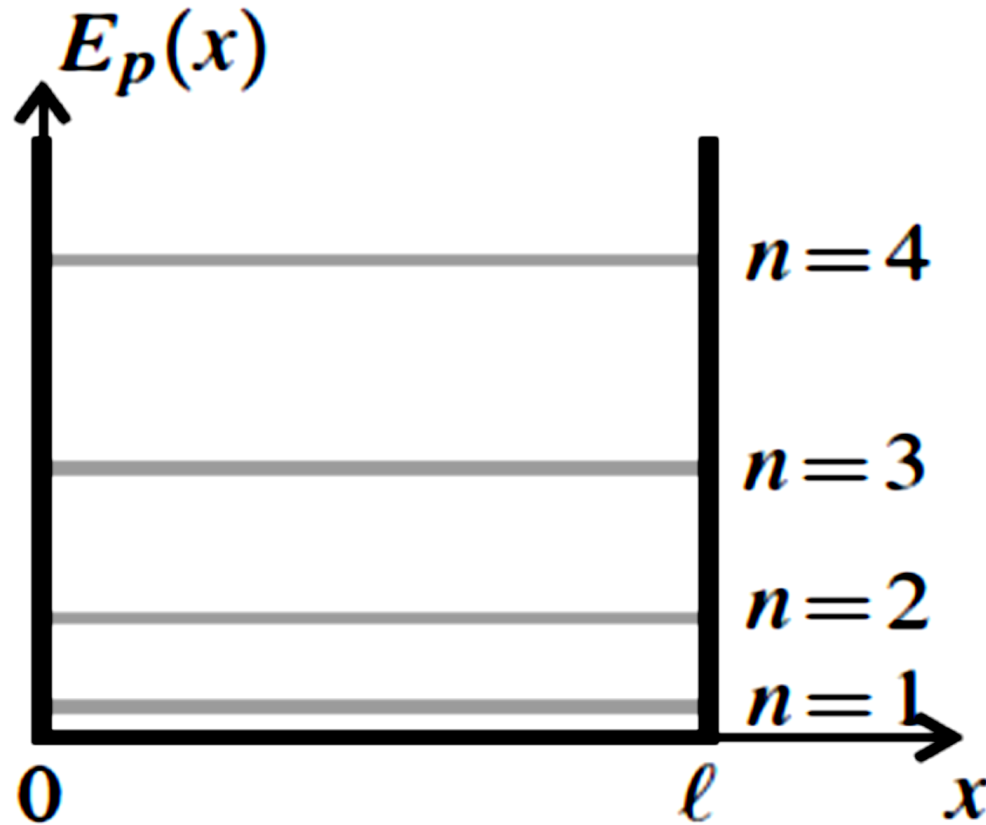
$$\lambda_{DB,n} = \frac{2\ell}{n} \Rightarrow E = \frac{h^2 n^2}{2m(2\ell)^2}$$

L'énergie ne peut prendre que l'une des valeurs suivantes :

$$\Rightarrow E_n = n^2 \frac{h^2}{8m\ell^2} \quad \text{où } n \text{ est un entier}$$

Quantification de l'énergie (4)

L'énergie de la particule dans le puits est quantifiée. Les 4 premiers niveaux d'énergie sont représentés sur la figure suivante.



Quantification de l'énergie (5)

L'écart entre deux niveaux consécutifs augmente avec n :

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1) \frac{h^2}{8m\ell^2}$$

Sa valeur minimale (niveau fondamental) est :

$$E_1 = \frac{h^2}{8m\ell^2}$$

L'énergie E_n devient donc est :

$$E_n = n^2 E_1 \text{ où } n \text{ est un entier}$$

Quantification de l'énergie (6)

□ L'énergie de la particule confinée dans ce puits est **donc quantifiée en n^2** . Ainsi seules certaines valeurs d'énergies, appelées niveaux d'énergie, sont autorisées, les valeurs entre ces niveaux sont interdites.

□ Le terme **quantique** provient de la **notion de quantification**, où seuls sont autorisés des états et des énergies à valeurs discrètes. La quantification est en opposition avec notre quotidien où tout est continu: on ne peut jamais accélérer de 0 m.s^{-1} à 20 m.s^{-1} sans passer par toutes les vitesses intermédiaires.

Quantification de l'énergie (7)

□ L'écart entre les niveaux d'énergie est de plus en plus important quand n augmente. **La quantification des niveaux d'énergie est liée au fait que la particule est confinée dans un certain espace (état lié).** En effet, ce sont les conditions aux limites qui induisent la quantification. Si la particule n'avait pas été confinée, elle aurait pu avoir des valeurs continues d'énergie (état libre).

Fonction d'onde stationnaire (1)

L'amplitude des vibrations d'une corde fixe en ses deux extrémités est donnée, comme nous l'avons vu, par:

$$A_n(x) = A_n \sin(k_n x) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

avec $A_n = cte$, $k_n = 2\pi/\lambda_n$ le nombre d'onde et $\lambda_n = 2L/n$

Par analogie, la fonction d'onde stationnaire est donnée par (la résolution exacte de l'équation Schrödinger donne le même résultat) :

$$\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

avec $k_n = 2\pi/\lambda_n = 2\pi/(2L/n) = n\pi/L$

Fonction d'onde stationnaire (2)

On peut donc écrire que:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right) \text{ avec } n \text{ appelé un nombre quantique}$$

En utilisant la condition de normalisation on montre que :

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Transitions entre niveaux d'énergie (1)

La particule doit être dans l'un des niveaux d'énergie précédemment déterminés. Elle peut passer d'un niveau E_n à un niveau plus bas $E_{n'}$ ($n' < n$) en émettant un photon dont la fréquence est donnée par la loi de conservation de l'énergie :

$$h\nu = E_n - E_{n'} = (n^2 - n'^2) \frac{h^2}{8m\ell^2}$$

Elle peut aussi passer du niveau $E_{n'}$ au niveau E_n en absorbant un photon ayant cette même fréquence.

Transitions entre niveaux d'énergie (2)

La plus petite fréquence pouvant être émise ou absorbée correspond à $n = 2$ et $n' = 1$ et son expression est :

$$\nu_0 = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{3h}{8m\ell^2}$$

