

Introduction au monde quantique

Ce cours s'inscrit dans la continuité du programme de terminale S. Les concepts essentiels abordés sont la dualité onde-corpuscule et l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde.

1. Nécessité de la mécanique quantique

Au début du XX^{ème} siècle 2 théories coexistent :

- la mécanique de Newton (1687)
- et l'électromagnétisme de Maxwell (1864).

Ces deux théories constituent ce que l'on appelle la mécanique classique.

■ Les lois de la mécanique classique sont déterministes :

Si à $t = 0$, on connaît, la position et la vitesse d'une particule, son mouvement futur est parfaitement déterminé (*il n'y a qu'une évolution possible à partir de CI données*).

Le déterminisme bannit le hasard de la mécanique classique.

Une série d'expériences conduites au tout début du XX^{ème} siècle vont bouleverser cet ordre établi et ouvrir la voie à une vision toute nouvelle des particules, photons ou particules de matière.

■ Expériences non expliquées par la mécanique classique:

- L'effet photo-électrique
- Le spectre du corps noir
- Les spectres de raies
- La non existence de l'éther (*les ondes électromagnétiques n'ont pas de support matériel pour se propager. La vitesse de la lumière est invariante par changement de référentiel*).

Ces expériences vont donner naissance à des théories physiques radicalement différentes :

La mécanique relativiste et La mécanique quantique.

2. Dualité onde-particule

2.1. Approche documentaire de l'effet photoélectrique

L'effet photoélectrique est dans notre vie de tous les jours : nous trouvons des cellules photo-électriques dans les systèmes de sécurité ; les caméras TV et vidéo, les appareils pour la vision dans l'obscurité utilisent largement l'effet photo-électrique.

DOCUMENT

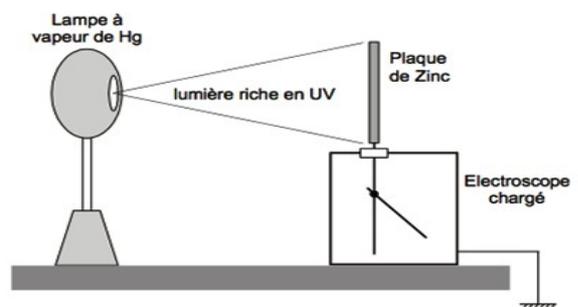
1. Mise en évidence de l'effet photo-électrique

1.1. Expérience de Hertz (1887)

Heinrich **Hertz** réalise l'expérience intitulée :

« effet photoélectrique »

Une plaque de zinc, découpée, montée sur un électroscope est chargée, puis éclairée par la lumière émise par une lampe à vapeur de mercure (émettant un rayonnement riche en UV, visible et IR) ou par une lampe à UV.



Expérience et observations:

1^{ère} étape : La plaque de zinc et l'électroscope sont chargés négativement : l'aiguille de l'électroscope dévie.

Quand on éclaire la plaque de zinc, l'électroscope se décharge.

2^{ème} étape : La plaque de zinc et l'électroscope sont chargés négativement et une plaque de verre est interposée entre la lampe et le zinc.

Quand on éclaire la plaque de zinc, il ne se passe rien. La lame de l'électroscope reste écartée.

3^{ème} étape : La plaque de zinc et l'électroscope sont chargés positivement, puis éclairée .

Quand on éclaire la plaque de zinc, il ne se passe rien. La lame de l'électroscope reste écartée.

1.2. Interprétation de l'expérience de Hertz

La lumière, éclairant la plaque de zinc, permet d'extraire des électrons du métal : c'est l'effet photoélectrique.

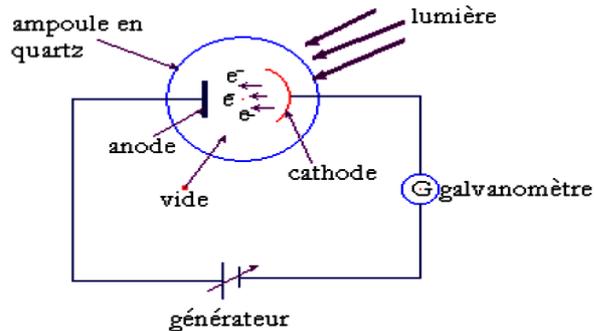
1^{ère} étape : les électrons, une fois extraits de la lame de zinc, sont repoussés par la lame qui se charge positivement. Les charges négatives de l'électroscope viennent neutraliser les charges positives de la lame : la décharge s'effectue.

3^{ème} étape : la plaque de zinc, chargée positivement, attire les électrons émis : la décharge n'est pas observée.

2^{ème} étape : la lumière ayant traversé le verre n'a plus l'énergie nécessaire (le rayonnement ultraviolet a été absorbé par le verre) pour extraire des électrons du zinc. Seules certaines radiations sont capables de provoquer l'effet photoélectrique.

1.3. Cas de la cellule photoélectrique

Lorsqu'elle est éclairée par une lumière convenable la cathode C émet des électrons. Ces électrons sont captés par l'anode A qui est portée à un potentiel positif. Il en résulte dans le circuit extérieur un courant de faible intensité décelé par le galvanomètre G.



2. Interprétation de l'effet photoélectrique

2.1. Hypothèse d'Einstein (en 1905)

Pour extraire un électron d'un métal, il faut lui fournir l'énergie appelée énergie d'extraction. Einstein interprète l'effet photoélectrique en formulant les hypothèses suivantes :

- La lumière est constituée par un ensemble de corpuscules, appelés photons, transportant chacun un quantum (des quantas) d'énergie.
- Un photon a une charge nulle et une masse nulle, il se déplace à la vitesse de la lumière, soit $c = 3.10^8 \text{ m.s}^{-1}$.
- Chaque photon d'un rayonnement monochromatique de fréquence ν et de longueur d'onde λ transporte un quantum d'énergie $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$, $h = 6,63.10^{-34} \text{ J.s}$ étant la constante de Planck.
- L'effet photoélectrique correspond à l'interaction entre un photon incident et un électron du métal avec transfert de l'énergie du photon à l'électron extrait.

2.2. Seuil photoélectrique

L'effet photoélectrique ne se produit que si l'énergie du photon incident est supérieure au travail d'extraction W_0 d'un électron du métal.

- $W_0 = h\nu_0$ ne dépend que de la nature du métal
- $\nu_0 = \frac{c}{\lambda_0}$ est la fréquence seuil et λ_0 la longueur d'onde seuil
- Si $W < W_0$ ($\nu < \nu_0$ et $\lambda > \lambda_0$) le photon est réfléchi et l'électron n'est pas éjecté du métal.
- Si $W > W_0$ toute l'énergie du photon est utilisée pour extraire l'électron qui sort du métal avec une vitesse d'éjection souvent non nulle.

On peut évaluer la vitesse d'éjection des électrons du métal en utilisant le principe de conservation de l'énergie :

On note E_{cmax} l'énergie cinétique maximale des électrons à la sortie du métal .

D'après la conservation de l'énergie : $W = W_0 + E_{cmax}$

Or $E_{cmax} = \frac{1}{2} m v_{max}^2$ $m = 9,1.10^{-31} \text{ kg}$ étant la masse de l'électron.

$$\text{d'où } h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2} m v_{max}^2 \text{ d'où } \boxed{\frac{1}{2} m v_{max}^2 = h\nu - h\nu_0 = hc\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right)}$$

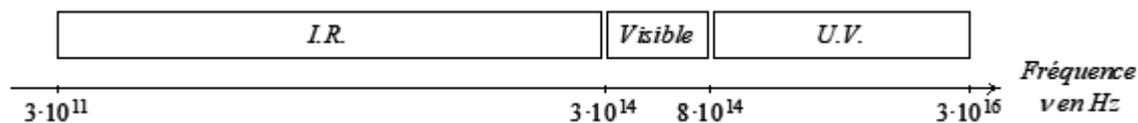
2.2. Exploitation: ordres de grandeur

En vous aidant du document ci-joint :

1. Donner la définition de l'effet photo électrique .

2. Retour sur l'expérience de Hertz :

- Calculer la fréquence de seuil du métal zinc pour en extraire un électron sachant que l'énergie nécessaire pour libérer un électron d'un atome de zinc et le transformer en ion zinc Zn^+ est $9,394 \text{ eV}$ (cette énergie est appelée énergie de première ionisation).
- A quel type de rayonnement cette fréquence correspond-elle ?



- Est-ce en accord avec l'expérience de Hertz ?
- L'énergie cinétique de l'électron libéré dépend-elle de l'intensité de la lumière ?

Donnée complémentaire au document : $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

2.3. De la lumière et de la matière

a. Comportement de la lumière : relation de Planck-Einstein

Grâce aux expériences sur l'effet photo électrique. Einstein postule qu'un rayonnement de fréquence ν , de longueur d'onde λ se comporte comme s'il était constitué de *grains de matière appelés photons* possédant les propriétés suivantes :

Les photons sont des particules de masse nulle.

Les photons se déplacent dans le vide à la vitesse de la lumière.

Un photon de fréquence ν possède une énergie donnée par la formule de Planck-Einstein :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \text{ où } h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J.s est la constante de Planck.}$$

b. Comportement de la matière : relation de Louis de Broglie

En 1924, Louis de Broglie étend aux particules matérielles la dualité onde-particule admise pour la lumière. Il postule qu'à toute particule de masse m de vitesse v , on associe une onde, de longueur d'onde λ , donnée par **la relation de Louis de Broglie**:

$$\lambda = \frac{h}{p} \text{ où } p = mv \text{ est la quantité de mouvement de la particule.}$$

c. Aspect ondulatoire ou corpusculaire?

Propriété :

Si la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que la taille de l'obstacle on privilégie le modèle ondulatoire.

Exemple cours 1:

Une personne de 50kg se déplace à la vitesse $v = 1 \text{ m.s}^{-1}$. Observe-t-on un phénomène d'interférence lorsqu'un flot d'individus se précipite vers la porte d'entrée d'un grand magasin un jour de soldes ?

Exemple de cours 2:

Déterminer la longueur d'onde d'un neutron de masse $m = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ d'énergie cinétique $E_c = 0,0843 \text{ eV}$. Justifier que l'on peut observer le comportement ondulatoire de ces neutrons en les envoyant sur un cristal dont les atomes sont distants de $a = 398 \text{ pm}$.

Donnée : $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

3. La fonction d'onde et son interprétation probabiliste

3.1 La fonction d'onde

En mécanique classique : Une particule peut être suivie au cours de son mouvement. L'ensemble des points de l'espace successivement occupés constitue la trajectoire.

En mécanique quantique : La notion de trajectoire n'a plus de sens. La notion de probabilité fait partie des fondements de la mécanique quantique.

Définition : A toute particule on associe une fonction d'onde $\psi(M, t)$ au point M et à l'instant t, cette fonction d'onde est aussi appelé amplitude de probabilité.

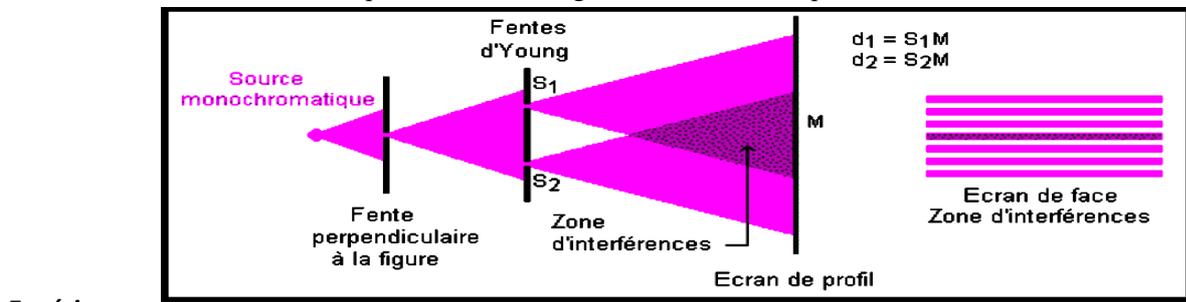
Propriété : La probabilité $dP(M)$ de trouver la particule dans le volume élémentaire $d\tau$ centré en M est :

$dP = \psi \psi^* d\tau = |\psi|^2 d\tau$. Une particule étant avec certitude dans tout l'espace, on a : $\iiint_{\text{espace}} \psi \psi^* d\tau = 1$. On dit que la fonction d'onde est normée.

3.2 Interprétation probabiliste : expérience des fentes d'Young

L'expérience des fentes d'Young

On envoie un faisceau lumineux sur une plaque percée de deux fentes S_1 et S_2 jouant le rôle de sources secondaires en phase. Les deux ondes interfèrent pour donner la figure d'interférence présentée ci-dessous.



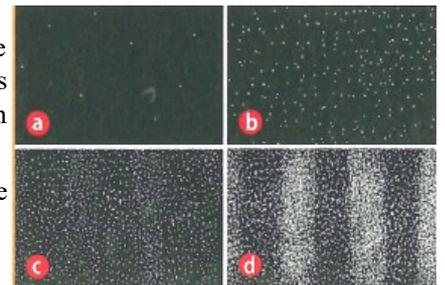
d'interférences par les fentes d'Young

La figure sur l'écran résulte de l'interférence des deux ondes, elle est constituée d'une succession de franges claires et de franges sombres.

- Les franges claires correspondent à des interférences constructives (les deux ondes arrivent en phase $|d_2 - d_1| = p\lambda$).
- Les franges sombres correspondent à des interférences destructives (les deux ondes arrivent en opposition de phase $|d_2 - d_1| = \frac{\lambda}{2} + p\lambda$.

Afin de mettre en évidence la dualité onde-particule, on réalise la même expérience en réduisant très fortement l'intensité lumineuse de la source éclairant les fentes jusqu'à ce qu'elle émette les photons 1 à 1. Ces photons viennent alors frapper l'écran l'un après l'autre.

Les résultats obtenus sont indiqués pour différents nombres N d' impacts de photons : a) N=8, b) N=270, c) N=2000, d) N=6000 photons.



Observations : dualité onde-particule :

en physique quantique, la dualité onde-particule exprime le fait que la lumière et la matière présentent simultanément des propriétés d'ondes et de particule.

→ Pour un petit nombre de photons :

- Les impacts montrent la nature corpusculaire
- Le comportement semble aléatoire, l'aspect ondulatoire n'apparaît pas.

→ Pour un grand nombre de photons :

- L'existence de franges sombres et brillantes montre qu'on ne peut pas se contenter d'une interprétation purement corpusculaire.
- Au fur et à mesure de leur arrivée les photons reconstituent la figure d'interférence en venant frapper très rarement l'écran aux endroits où les franges sont sombres , et très souvent au niveau des franges brillantes.
- L'interprétation des franges montre la nécessité du modèle ondulatoire.

Interprétation quantique : comment se forme la figure d'interférence ?

→ A chaque photon on associe une fonction d'onde. La fonction d'onde permet de déterminer sa probabilité de présence en différents points de l'espace. Cette probabilité est grande sur une frange claire, quasi nulle sur une frange sombre.

→ La figure d'interférence due au comportement statistique d'un grand nombre de photons révèle la nature probabiliste du comportement des photons.

Pour aller plus loin :

Un des principes les plus importants de la théorie quantique est le **principe de superposition**. Si deux états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont accessibles à un système, alors l'état $\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle$ est également accessible au système. Ce principe de superposition intervient dans de nombreuses expériences de physique quantique.

L'interférence observée dans un dispositif de trous d'Young, s'interprète en disant que la particule est dans un état qui est la superposition du passage par le trou 1 et du passage par le trou 2.

4. Quantification de l'énergie d'une particule libre confinée dans un puits de potentiel ∞

4.1 Analogie avec les modes propres d'une corde vibrante

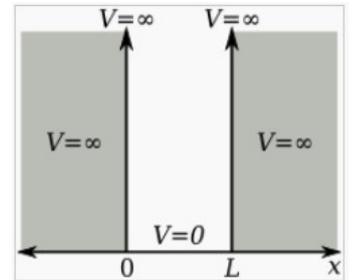
On considère une particule contrainte à être confinée dans un certain domaine spatial de largeur L .

Un puits de potentiel rectangulaire infini de largeur L permet de décrire cette situation. Il est représenté ci-contre.

Le potentiel $V(x)$ (sous entendu énergie potentielle) est : nul dans le puits où la particule est libre de se déplacer librement entre $x = 0$ et $x = L$.

Le potentiel $V(x)$ est infini si $x < 0$ ou $x > L$.

Tout se passe comme si la particule était emprisonnée entre 2 murs de hauteur infranchissable.



Situation classique :

Si on place une particule dans un tel puits avec une vitesse initiale non nulle, quelle est son évolution ?

Approche quantique qualitative :

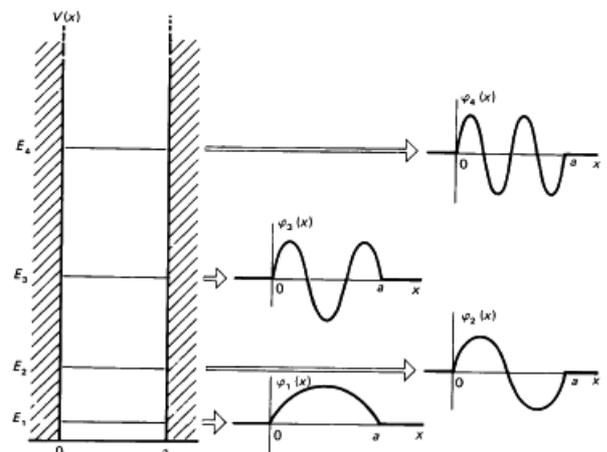
D'un point de vue ondulatoire, les allers-retours de la particule correspondent à la superposition d'une onde aller et d'une onde retour de même amplitude.

Les conditions aux limites imposent à la fonction d'onde $\psi(0) = \psi(L) = 0$ car la fonction d'onde est continue et la probabilité de présence de la particule en 0^- et L^+ est nulle.

Il apparaît une onde stationnaire dont les 2 extrémités sont des nœuds comme les extrémités d'une corde vibrante fixée aux 2 bouts immobiles.

Si L est la longueur du puits, le système d'ondes stationnaires ne peut s'établir qu'à la condition (paragraphe sur la corde de Melde) : $L = n \cdot \lambda / 2$ avec $n \in \mathbb{N}^*$. Les longueurs d'onde quantifiées sont à l'origine de la quantification de l'énergie.

Énergie associée :



Conclusion :

Une particule libre confinée unidirectionnelle a un comportement très similaire à une corde vibrante fixée aux deux extrémités.

Sa fonction d'onde est une onde stationnaire de même forme et de longueur d'onde : $\lambda_n = \frac{2n}{L}$ où L est la longueur du confinement.

Chaque mode de vibration détermine un état énergétique différent.

Cette étude montre le lien entre confinement, énergie minimale non nulle et quantification de l'énergie.

L'énergie associée est quantifiée: $E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

Rem : le niveau fondamental possède une énergie $E_1 \neq 0$, contrairement à celui d'une particule classique dans le même potentiel.

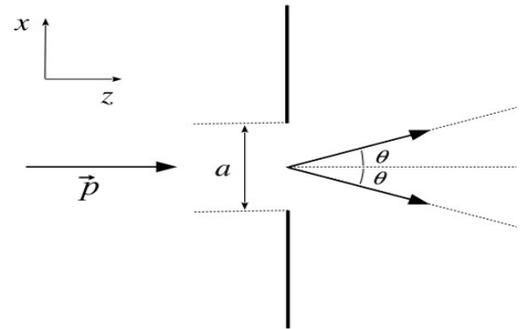
Ce résultat est en accord avec l'inégalité d'Heisenberg que l'on verra au paragraphe suivant .

5. Inégalité de Heisenberg spatiale

5.1. Interprétation quantique de la diffraction par une fente

Revenons à l'expérience de diffraction citée en optique. Considérons cette expérience pas nécessairement réalisée avec des photons mais avec toutes particules auxquelles on associe une onde de longueur d'onde λ .

par une fente fine de largeur a. Plus la fente est fine, plus la tache de diffraction est large. On note θ la demi-largeur angulaire de la tache centrale de diffraction.



Interprétation quantique :

Une particule passe au travers de la fente si elle est localisée entre $x = 0$ et $x = a$ et donc sa position est mesurée avec l'incertitude $\Delta x = a/2$. Travaillant en ordre de grandeur, posera $\Delta x = a$

La composante $p_x = \vec{p} \cdot \vec{u}_x$ de la quantité de mouvement de la particule considérée varie de $-p \sin \theta$ à $p \sin \theta$ (en considérant la largeur angulaire de la tache centrale où se concentre la majorité des particules diffractées).

Or, $\sin \theta \approx \frac{\lambda}{a}$, avec λ la longueur d'onde de de Broglie. L'ordre de grandeur de l'incertitude sur la mesure de p_x est donc de l'ordre de $\Delta p_x \approx p \sin \theta = p \frac{\lambda}{a}$. D'après la relation de Louis De Broglie $p = \frac{h}{\lambda}$ d'où $\Delta p_x \approx \frac{h}{a}$ d'où $\Delta x \Delta p_x \approx h$

Conclusion : Plus la fente est fine, plus la tache de diffraction est large.

On a raisonné sur des ordres de grandeur.

Cette égalité vérifie une relation plus générale connue sous le nom d'incertitude d'Heisenberg .

5.2. Inégalité d'Heisenberg

La relation d'incertitude d'Heisenberg s'écrit sous la forme : $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$

Cette relation s'applique aux autres directions de l'espace : $\Delta y \Delta p_y \geq \frac{h}{4\pi}$ et $\Delta z \Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi}$

On ne peut donc pas mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement (donc la vitesse) avec une précision arbitrairement grande.

La notion classique de trajectoire, pour laquelle la position et la vitesse sont déterminées à chaque instant disparaît.

- Si on confine des particules, leurs vitesses seront très dispersées.
- Inversement, si on prépare des particules de manière à ce que leur vitesse soit bien déterminée, alors l'indétermination sur leur localisation sera grande (les particules seront délocalisées).

5.3. Énergie minimale de l'oscillateur harmonique quantique

a) Préliminaire : Incertitude statistique

Quand on observe la figure d'interférence produite photon par photon, on constate que les maxima d'intensité correspondent aux zones où la probabilité de présence du photon est maximum : **la mécanique quantique est une théorie probabiliste.**

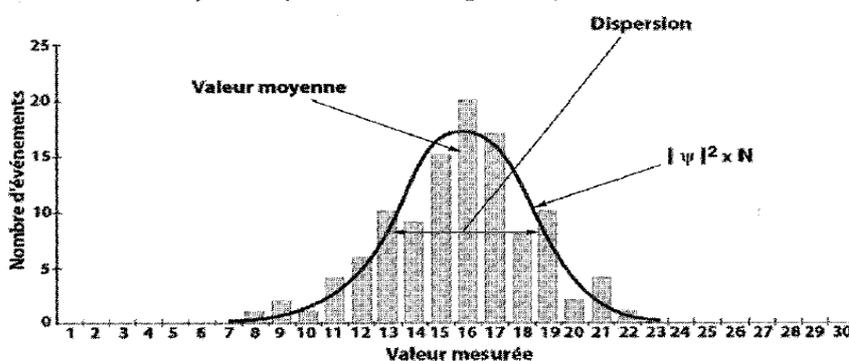
Le caractère aléatoire de la détection fait que toute mesure si précise soit-elle s'accompagnera toujours d'une incertitude de type statistique (on parle aussi d'indétermination quantique).

Plaçons nous à une dimension. Si on mesure la valeur de x , en répétant N fois la même mesure sur N particules préparées dans le même état, on obtient une dispersion des mesures.

L'ensemble des mesures se distribue suivant la densité de probabilité $|\psi(x, t)|^2$.

La valeur moyenne est : $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx$

On admet que l'écart quadratique moyen, qui mesure la dispersion des mesures autour de la valeur moyenne, est donné par : $\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.



Exemple simple d'histogramme de la distribution des résultats de mesure de position de particules préparées dans le même état ψ .

On peut définir de même l'incertitude statistique pour p_x la composante suivant \vec{u}_x de la quantité de mouvement : $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$

b) L'oscillateur harmonique classique

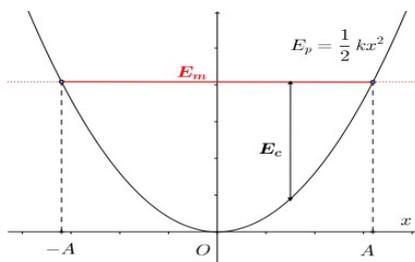
On a étudié en début d'année le mouvement harmonique.

Si on note x l'écart par rapport à la position d'équilibre, le mouvement harmonique est caractérisé par

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \varphi)$$

$$v(t) = -A\omega_0 \sin(\omega_0 t + \varphi)$$

- la position x est comprise entre $-A$ et A
- la vitesse v est comprise $-\omega_0 A$ et $\omega_0 A$



L'énergie de l'oscillateur harmonique (correspondant à son énergie mécanique) est donnée par

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$$

On a montré que $E = \frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 A^2$ avec $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ pulsation propre de l'oscillateur.

Le modèle de l'oscillateur harmonique a de nombreuses applications :

- en général, le mouvement conservatif d'un point au voisinage d'une position d'équilibre stable est du type harmonique.
- au niveau microscopique, les forces d'interactions entre les atomes d'une molécule sont modélisées par des forces élastiques. On peut donc se ramener au modèle de l'oscillateur harmonique pour étudier les vibrations de molécules.

Classiquement, quelle peut-être la valeur minimale de l'énergie ?

Dans ce cas la particule est en O, avec une vitesse nulle : elle est au repos au niveau de la position d'équilibre. Sa position et sa vitesse sont donc parfaitement définies. On aura donc $\Delta x = 0$ et $\Delta p_x = 0$.

Ce résultat est en total désaccord avec l'inégalité de Heisenberg .

L'énergie minimale de l'oscillateur harmonique quantique ne peut pas être nulle.

c) L'oscillateur harmonique quantique

L'étude quantitative des vibrations de molécules nécessite un traitement quantique. Il faut, pour trouver les niveaux d'énergie de l'oscillateur, résoudre l'équation de Schrödinger. Cette résolution dépassant largement le cadre du programme, on se contentera d'un raisonnement semi-classique. L'inégalité d'Heisenberg va nous permettre de évaluer l'ordre de grandeur de l'énergie minimale d'un oscillateur harmonique quantique. Pour une énergie donnée, le mouvement est borné. On peut alors évaluer les ordre de grandeurs des incertitudes Δx et Δp_x .

$$\text{Classiquement : } E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2A^2$$

$$\langle x \rangle = 0, \langle p_x \rangle = 0;$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}A^2 = \frac{E}{m\omega_0^2};$$

$$\langle p_x^2 \rangle = m^2 \langle v_x^2 \rangle = m^2 A^2 \omega_0^2 \langle \sin^2(\omega_0 t + \varphi) \rangle = m^2 \frac{A^2 \omega_0^2}{2} = mE$$

On en déduit les incertitudes sur x et p :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\frac{E}{m\omega_0^2}}$$

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle} = \sqrt{mE}$$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\sqrt{\frac{E}{m\omega_0^2}} \sqrt{mE} \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$E \geq \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

Notre calcul, très grossier, ne permet en toute rigueur que d'obtenir un ordre de grandeur de l'énergie minimale. Cependant, en résolvant l'équation de Schrödinger on trouve que les niveaux d'énergie de l'oscillateur sont quantifiés. Les valeurs des énergies des différents niveaux s'expriment sous la forme :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}$$

On constate que le niveau d'énergie minimale (pour $n = 0$) vaut bien $E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.