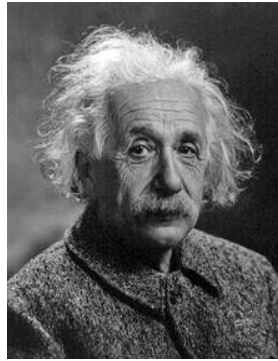


## Chapitre MQ1.Introduction à la physique quantique

Quelques « pères » de la mécanique quantique :



Planck (1858-1947)



Einstein (1879-1955)



Schrödinger (1887-1961)



De Broglie (1892-1987)

### INTRO :

A l'échelle atomique, les lois de la physique classique n'expliquent pas les phénomènes observés. C'est pourquoi, au début du XX<sup>e</sup> siècle, la communauté scientifique a développé de nouveaux concepts qui constituent la mécanique quantique. Ce chapitre donne une introduction à la mécanique quantique en décrivant des expériences prouvant l'insuffisance de la physique classique.

Buts de ce chapitre : définir ce qu'est la dualité onde-particule et énoncer les relations associées, introduire la notion de fonction d'onde, l'inégalité de Heisenberg et décrire le modèle de Bohr pour interpréter la quantification de l'énergie de l'électron d'un atome d'Hydrogène.

### Prérequis :

1<sup>e</sup> année : Mécanique classique.

2<sup>e</sup> année : O1 Optique ondulatoire et superposition d'ondes lumineuses ; O2 Interférences lumineuses par division du front d'onde

### Plan du chapitre :

A) Dualité onde-particule <i>ou onde-corpuscule</i> .....	2
1) Etat de l'art au début du XX <sup>e</sup> siècle.....	2
2) Relations de Planck-Einstein : associées à la dualité onde-particule pour la LUMIERE.....	3
3) Relation de De Broglie : associée à la dualité onde-particule pour la MATIERE.....	4
B) Introduction au formalisme quantique.....	5
1) Onde de matière : fonction d'onde et densité de probabilité de présence.....	5
2) Equation de Schrödinger .....	5
3) Inégalité de Heisenberg spatiale.....	7
C) Quantification de l'énergie .....	8
1) Spectre d'émission de l'Hydrogène .....	8
2) Modèle de Bohr de l'atome d'Hydrogène .....	9
Annexe 1 – Effet photo-électrique : expérience illustrant la nécessité de la notion de photon.....	11
Annexe 2 – Fentes d'Young : expérience illustrant la nécessité de la notion d'ondes de matière .....	13
Annexe 3 – Rayonnement du corps noir .....	15

# A) Dualité onde-particule ou onde-corpuscule

## 1) Etat de l'art au début du XX<sup>e</sup> siècle

Au début du XX<sup>e</sup> siècle, la plupart des physiciens était persuadée que l'ensemble des phénomènes physiques pouvaient être interprétés, soit par la **mécanique de Newton** (1687), soit par **l'électromagnétisme de Maxwell** (1864). Ces théories constituent ce que l'on appelle la **physique classique** qui permet de décrire les particules et les ondes.

### a) A propos des particules matérielles

Les particules sont **précisément localisées** i.e. qu'à chaque instant on peut déterminer leur position et leur vitesse (ou quantité de mouvement). On introduit alors la notion de **trajectoire** d'une particule repérée par le point M dans le référentiel  $\mathcal{R}$ .

La mécanique classique est **déterministe** : en connaissant les causes (conditions initiales, forces), l'évolution d'un système (en particulier sa trajectoire) peut être exactement déterminée par des équations dynamiques.

En outre, la mécanique classique prévoit que **l'énergie mécanique**  $E_m = E_c + E_p$  d'un système est une grandeur dont les **valeurs appartiennent à l'intervalle continu**  $[E_p, \infty[$  car  $E_c = \frac{1}{2}mv^2 \geq 0$ .

### b) A propos des ondes

Les ondes sont de nature très différente. De manière générale, **elles occupent une certaine étendue de l'espace sur laquelle leur énergie est répartie**. La **diffraction** et les **interférences** sont des signatures de la nature ondulatoire d'un phénomène.

### c) Observations expérimentales inexplicables

Cependant, dans ce contexte, plusieurs questions restaient sans réponse :

- les spectres discontinus d'émission ou d'absorption des atomes (par exemple l'hydrogène, cf § C),
- le spectre du rayonnement du corps noir,
- **l'effet photoélectrique**, cf annexe 1.

Ces phénomènes sont expliqués par la **physique quantique**, qui correspond à la description de la matière et de la lumière, en particulier à l'échelle atomique.

### d) Grandes dates de la mécanique quantique

- 1900 : loi du corps noir et les quanta d'énergie de Planck (cf annexe 3)
- 1905 : l'année Einstein : publication de l'article sur les quanta de lumière (cf A.2 et annexe 1)
- 1913 : l'atome de Bohr (cf § C.2)
- 1921 : expérience de Stern et Gerlach
- 1924 : thèse de Louis De Broglie (cf § A.3)
- 1925 : principe d'exclusion de Pauli et le spin de Uhlenbeck et Goudsmit
- 1926 : équation de Schrödinger (cf § B.2), interprétation probabiliste de Born, introduction du terme « photon » par Lewis
- 1927 : principe d'indétermination de Heisenberg (cf § B.3)

## 2) Relations de Planck-Einstein : associées à la dualité onde-particule pour la LUMIERE

En 1900, Planck propose de résoudre le problème du rayonnement du corps noir en faisant l'hypothèse que l'énergie s'échange entre la matière et le rayonnement par multiples d'une valeur minimale. Cette valeur minimale est nommée « **quantum d'énergie** ».

Ainsi se développa, par la suite, la notion de **PHOTON**, notamment pour interpréter l'effet photoélectrique, cf annexe 1.

### Propriétés du PHOTON :

- ♦ le photon a une **masse nulle** ;
- ♦ le photon se déplace à la vitesse de la lumière ( $3,00.10^8 \text{ m.s}^{-1}$  dans le vide) selon la direction et le sens de l'onde lumineuse ;
- ♦ le photon associé à une lumière de fréquence  $\nu$  et de longueur d'onde  $\lambda$  possède
  - l'énergie :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (R1)$$

- la quantité de mouvement = impulsion :

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (R2)$$

Sous forme vectorielle, avec  $\vec{k}$  le vecteur d'onde, on écrit :

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Avec  $h$  la **constante de Planck** :  $h = 6,63.10^{-34} \text{ J.s}$

et  $\hbar$  la **constante de Planck réduite** :  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05.10^{-34} \text{ J.s}$

Les relations (R1) et (R2) constituent les **RELATIONS DE PLANCK-EINSTEIN**.

Elles expriment mathématiquement la **dualité onde - particule de la lumière**.

L'ONDE décrivant la lumière est associée aux notions de **fréquence  $\nu$**  et **longueur d'onde  $\lambda$**  tandis que les PARTICULES / CORPUSCULES (photons) décrivant la lumière sont caractérisés par une **énergie  $E$**  et une **quantité de mouvement / impulsion  $p$** .

**NB** : Pour un photon dans le vide, on a la relation de dispersion  $\omega = kc$ . Ainsi, **pour un photon** :

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{et} \quad p = \frac{E}{c}$$

### 3) Relation de De Broglie : associée à la dualité onde-particule pour la MATIERE

#### Dualité onde-particule pour la MATIERE :

Pour expliquer les phénomènes **d'interférences de la matière** (cf annexe 2), **Louis De Broglie** a étendu le principe de dualité onde-particule à la matière en 1924 (prix Nobel en 1929) :

**Toute particule matérielle peut présenter un caractère ondulatoire.**

*On parle d'onde de matière.*

Ainsi, à une particule matérielle libre de quantité de mouvement  $\vec{p}$  est associée une onde de longueur d'onde  $\lambda$ . La relation entre  $p = \|\vec{p}\|$  et  $\lambda$  est nommée **RELATION DE DE BROGLIE**:

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

avec  $h$  la **constante de Planck** :  $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

et  $p = mv$  pour une particule non relativiste.

*Rq : Au ChMQ2, on revient sur cette relation ainsi qu'une relation entre l'énergie de la particule et la pulsation de l'onde associée.*

Dans quels cas est-il nécessaire de faire appel aux lois de la mécanique quantique pour décrire le comportement d'une particule matérielle ?

#### Méthode



Particule classique ou quantique ?

① Calculer la **longueur d'onde  $\lambda$  de De Broglie** de la particule.

② Comparer  $\lambda$  à la **taille caractéristique  $L$  de l'environnement** avec lequel la particule interagit :

- Si  $\lambda \ll L$ , alors les résultats expérimentaux pourront être interprétés avec la **physique classique** car les **effets quantiques sont négligeables** : on parlera de « particule classique » ;

- Si  $\lambda \approx L$ , alors il faut étudier la particule dans le cadre de la **mécanique quantique** pour expliquer les résultats expérimentaux : on parlera de « **particule quantique** ».

➔ **Application directe** : on considère les « particules » ci-après. Pour chacune, préciser si les effets quantiques sont négligeables.

- une personne « confinée » dans un couloir ;

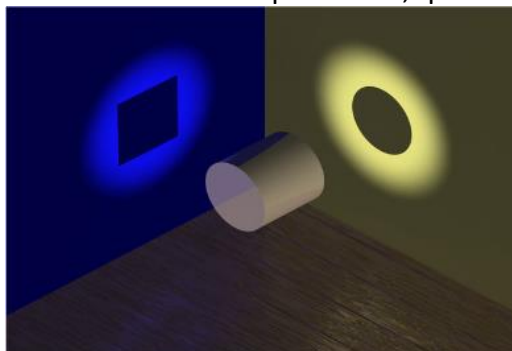
- un électron de masse  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  « confiné » dans un atome d'Hydrogène.

**Donnée** : Energie de 1<sup>e</sup> ionisation de l'atome d'Hydrogène :  $E_{i1} = 13,6 \text{ eV}$

*Rq : Pour valider les résultats obtenus selon la théorie quantique, on vérifie que l'on retrouve les résultats classiques si  $\lambda \ll L$ .*

**Bilan** § A.2 et A.3 :

**Principe de complémentarité de Bohr** : Les aspects corpusculaire et ondulatoire sont deux représentations complémentaires d'une seule et même chose. Tout dépend « où, quand et comment » on l'observe.



**Métaphore du quanton** : De même qu'un cylindre n'est ni un cercle ni un rectangle, un quanton n'est ni une onde ni une particule mais apparaît comme l'un ou l'autre suivant l'expérience.

## B) Introduction au formalisme quantique

### 1) Onde de matière : fonction d'onde et densité de probabilité de présence

◆ Pour décrire l'onde de matière associée à une particule (on parle d'état du système quantique), on définit une **FONCTION D'ONDE complexe**  $\psi(M, t)$  au point M à l'instant t.

Cette fonction d'onde  $\psi(M, t)$  est reliée à la **probabilité**, notée  $dP$ , que la particule soit présente dans un volume mésoscopique  $dV$  autour d'un point M à l'instant t :

$$dP = |\psi(M, t)|^2 \cdot dV \quad \Leftrightarrow \quad |\psi(M, t)|^2 = \frac{dP}{dV}$$

$|\psi(M, t)|^2$  est la **densité volumique de probabilité de présence de la particule au point M à l'instant t**.

◆ Dans un cas unidimensionnel : la particule ne peut se déplacer que selon l'axe (Ox) et son état est décrit par la fonction d'onde  $\psi(x, t)$ . La **probabilité que la particule soit présente entre x et x + dx à t est** :

$$dP = |\psi(x, t)|^2 \cdot dx \quad \Leftrightarrow \quad |\psi(x, t)|^2 = \frac{dP}{dx}$$

$|\psi(x, t)|^2$  représente la **densité linéique de probabilité de présence** (USI :  $m^{-1}$ ).

La fonction d'onde  $\psi$  est appelée **amplitude de probabilité**.

La relation entre fonction d'onde et probabilité de présence met en évidence le fait que la **notion de probabilité fait partie des fondements de la théorie quantique**.

Ainsi, parler de « valeur instantanée de position » ou de « trajectoire » de la particule n'a pas de sens. On peut seulement donner la probabilité qu'une mesure de la position à un t fixé donne telle ou telle valeur.

D'après cette définition probabiliste, la fonction d'onde doit vérifier les propriétés suivantes :

- ◆ La **fonction d'onde s'annule aux endroits où il est impossible que la particule se trouve**.
- ◆ La fonction d'onde est une **fonction continue**.
- ◆ Notons  $D$  le domaine d'espace accessible à la particule, dans le cas d'un problème unidimensionnel,  $D$  est un intervalle sur l'axe (Ox). La particule se trouve dans  $D$  avec certitude. On traduit cela avec la **CONDITION DE NORMALISATION** : la **probabilité intégrée sur  $D$  doit valoir 1**.

$$\int_D |\psi(x, t)|^2 \cdot dx = \int_D dP = 1$$

### 2) Equation de Schrödinger

#### a) Enoncé

Pour décrire une onde de matière, il faut résoudre l'**équation dont la fonction d'onde est solution** : il s'agit de l'**équation de Schrödinger**.

On considère le mouvement d'une particule quantique de masse  $m$ , dans un référentiel  $R$ .

La particule est en interaction avec d'autres systèmes physiques, ce qui se traduit par une énergie potentielle, notée  $V(M, t)$ , appelée par abus de langage **potentiel**.

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 en 1926 :

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

Dans le cadre du programme, on se place dans le **cas unidimensionnel** (on considère ici la direction (Ox)) et où  $V$  ne dépend pas explicitement de t. Ainsi, l'**équation de Schrödinger** se simplifie sous la forme :

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

*Rq : L'objet du ChMQ2 sera d'étudier les états stationnaires de l'équation de Schrödinger.*

**b) Principe de superposition – Interprétation des interférences d’ondes de matière**

L’équation de Schrödinger est linéaire, par conséquent le principe de superposition s’applique. Ainsi, si  $\psi_1(x, t)$  et  $\psi_2(x, t)$  sont solutions de l’équation de Schrödinger, i.e. sont des états possibles pour la particule, alors la fonction ci-après est également solution de l’équation de Schrödinger :

$$\psi(x, t) = \alpha\psi_1(x, t) + \beta\psi_2(x, t)$$

Avec  $\alpha$  et  $\beta$  des constantes complexes telles que la condition de normalisation est vérifiée. Autrement dit, la fonction d’onde  $\psi(x, t)$  correspond à un état possible pour la particule.

♦ Exploitation : interprétation de la figure d’interférences (*capacité exigible*)

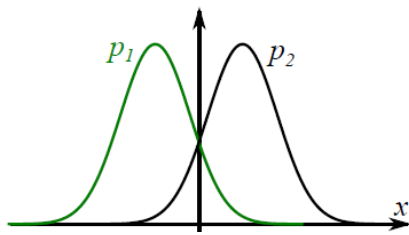
On se propose d’expliquer la figure d’interférences du § c de l’annexe 2 en utilisant l’interprétation probabiliste de la fonction d’onde.

Dans cette expérience, on ne peut pas prévoir la position de l’impact d’un électron sur l’écran. Mais lorsque leur nombre est important, ils respectent une loi de probabilité et forment le motif caractéristique des franges d’interférences. Les franges s’interprètent comme une **alternance de zones où l’électron a une probabilité de présence minimale (franges sombres) ou maximale (franges claires)**.

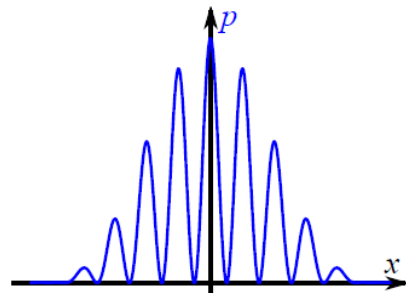
- Situation n°1 : la fente 2 est obstruée, l’électron parvient en M en passant par la fente 1. On associe à cette situation, la fonction d’onde  $\psi_1(x, t)$ .

- Situation n°2 : la fente 1 est obstruée, l’électron parvient en M en passant par la fente 2. On associe à cette situation, la fonction d’onde  $\psi_2(x, t)$ .

L’expérience est réalisée pendant une durée  $\tau$  et au bout de cette durée, on obtient expérimentalement les courbes de distribution suivantes :



Courbe  $P_i(x)$  obtenue pour la situation n°i (i = 1 ou 2).



Courbe  $P(x)$  obtenue avec les deux fentes ouvertes.

On a  $P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$  : les probabilités ne s’additionnent pas : il y a **interférences** !

Avec les deux fentes ouvertes :

D’après le principe de superposition, la fonction d’onde  $\psi(x, t)$  au point M d’abscisse  $x$  s’écrit :

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)$$

On peut alors en déduire la probabilité de détection de la particule en  $x$  en calculant :

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)|^2 = (\psi_1 + \psi_2) \cdot (\psi_1 + \psi_2)^* \\ \Leftrightarrow |\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*$$

Le terme  $\psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*$  correspond donc au terme d’interférences : il permet d’expliquer pourquoi  $P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$ .

Rq : Analogies optique – mécanique quantique :

Ondes lumineuses (ChO1 – ChO2)	Ondes de matière
<i>Signal</i>	
vibration lumineuse scalaire $s(M, t)$	fonction d’onde $\psi(M, t)$
Intensité lumineuse : $I = K' \cdot  s(M) ^2$	Densité de probabilité de présence : $ \psi(M, t) ^2$
<i>Expérience des fentes d’Young - Zones d’interférences constructives</i>	
franges brillantes i.e. où l’intensité lumineuse est maximale	zones de grande densité d’impacts i.e. où la probabilité de présence de particules est maximale

Rq : On peut retrouver l’analogie de la formule de Fresnel pour des ondes de matière.

### 3) Inégalité de Heisenberg spatiale

#### a) Enoncé

Dans la description quantique, le caractère ondulatoire de la particule a pour conséquence qu'il n'est plus possible de connaître simultanément la position et la quantité de mouvement de la particule quantique avec une précision aussi grande que l'on veut (indépendamment des incertitudes de mesure).

Soit une particule quantique astreinte à se déplacer sur (Ox).

Même avec une erreur expérimentale nulle, des mesures réalisées sur un ensemble de particules préparées dans un même état quantique présenteraient des dispersions  $\Delta x$  et  $\Delta p$  vérifiant l'**INEGALITE DE HEISENBERG** ou le **PRINCIPE D'INDETERMINATION DE HEISENBERG** :

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

$\Delta x$  l'indétermination sur la position de la particule ;

$\Delta p$  l'indétermination sur la quantité de mouvement de la particule.

On parle d'**indétermination quantique**.

*Rq* : - Interprétation de  $\Delta x$  : amplitude des fluctuations / dispersion statistique des mesures autour de  $\langle x \rangle$ .

- Dans le cas tridimensionnel, on a trois inégalités de Heisenberg spatiales :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} ; \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} ; \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Avec  $p_x, p_y$  et  $p_z$  les projections du vecteur quantité de mouvement selon (Ox), (Oy) et (Oz).

#### b) Exploitation : Interprétation de la diffraction avec l'inégalité de Heisenberg (capacité exigible)

Considérons une fente de largeur  $a$ , éclairée en incidence normale par une lumière de longueur d'onde  $\lambda$ .

♦ Si un photon passe au travers de la fente, c'est qu'il est localisé entre les abscisses  $x = 0$  et  $x = a$ , et donc sa position est mesurée avec l'indétermination  $\Delta x = \frac{a}{2}$  mais en ODG, on retiendra :  $\Delta x \approx a$ .

♦ D'après le principe d'indétermination d'Heisenberg, il existe une indétermination sur la projection selon (Ox) de la quantité de mouvement du photon telle que, en ODG, :

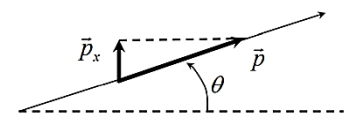
$$\Delta p_x \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{a} \quad (1)$$

Suite au passage par la fente, les photons présentent donc une variété de projections selon (Ox) de la quantité de mouvement. Ainsi,  $p_x$  peut prendre toutes les valeurs entre  $\pm \Delta p_x$ , autour de la valeur moyenne nulle liée à l'incidence normale.

♦ En considérant de petits angles :

$$p_x \approx p\theta$$

Où  $p$  est la norme de la quantité de mouvement  $\vec{p}$  du photon et  $\theta$  est l'angle entre  $\vec{p}$  et la normale à la fente.



On en déduit le lien entre l'indétermination  $\Delta p_x$  et l'indétermination  $\Delta\theta$  indiquant la gamme de directions empruntées par les photons après le passage par la fente :

$$\Delta p_x \approx p\Delta\theta$$

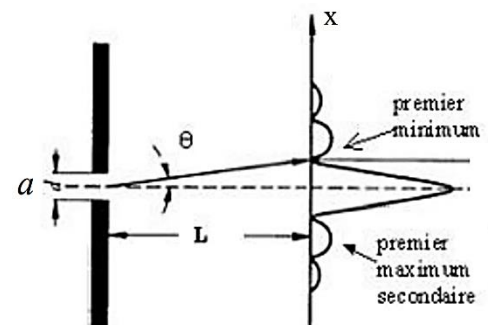
Or, d'après la relation de De Broglie, on a :  $p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow \Delta p_x \approx \frac{h}{\lambda} \Delta\theta$  (2)

$$(1) \& (2) \Rightarrow \Delta\theta \approx \frac{\lambda}{a}$$

On retrouve ainsi le résultat concernant la diffraction :

un faisceau de lumière parallèle de longueur d'onde  $\lambda$  atteignant une ouverture de taille caractéristique  $a$  diffracte dans un cône de demi-angle au sommet de l'ordre de  $\frac{\lambda}{a}$ .

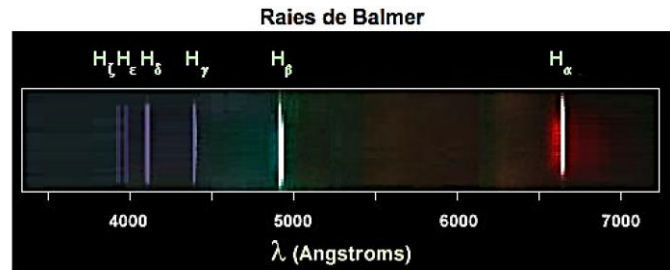
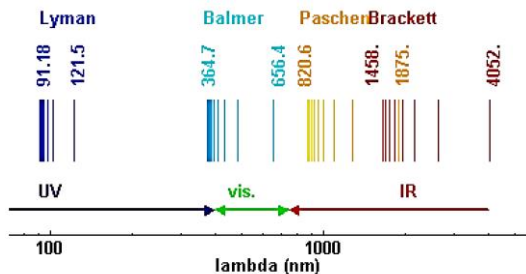
L'inégalité de Heisenberg donne ainsi une interprétation au phénomène de diffraction.



## C) Quantification de l'énergie

Pour un atome donné, les longueurs d'ondes des spectres d'émission et d'absorption prennent des valeurs bien déterminées, caractéristiques de l'atome considéré. La physique classique ne permet pas d'expliquer cette constatation expérimentale, elle relève de la physique quantique.

### 1) Spectre d'émission de l'Hydrogène



De façon empirique, l'étude spectroscopique montre que la longueur d'onde des raies émises (ou absorbées) par l'hydrogène vérifie la relation suivante, appelée **relation de Ritz-Rydberg** :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$$

Avec  $R_H$  la constante de Rydberg et  $n$  et  $p$  des entiers naturels non nuls tels que  $p > n$ .

Expérimentalement, on trouve  $R_H = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1}$ .

Si l'électron pouvait avoir n'importe quelle énergie (mécanique) au sein de l'atome (continuum d'énergie) alors le spectre d'émission serait continu. Puisque le spectre d'émission est discontinu, il faut donc conclure que l'électron ne peut pas avoir n'importe quelle énergie, i.e. que seules certaines valeurs d'énergie sont accessibles : **l'énergie des électrons au sein d'un atome est quantifiée**.



## 2) Modèle de Bohr de l'atome d'Hydrogène (cf CCINP MP 2018)

### a) Description

Le modèle de Bohr est un complément du modèle classique (dit « planétaire ») qui décrit l'atome d'hydrogène comme un proton ponctuel fixe, autour duquel gravite un électron, assimilé à un point M de masse  $m$ .

Pour expliquer les raies du spectre de l'atome d'hydrogène observées expérimentalement, Bohr a proposé un modèle qui s'appuie sur les hypothèses suivantes : dans un référentiel galiléen lié au noyau O :

- *Postulat mécanique* : le **module du moment cinétique** de M par rapport à O est **quantifié** :

$$\|\vec{L}_O(M)\| = \|\vec{OM} \wedge \vec{p}\| = n\hbar$$

Avec  $n \in \mathbb{N}^*$  et  $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$  est la constante de Planck réduite.

Cette hypothèse est reliée à l'existence d'orbites circulaires sur lesquelles l'électron, bien qu'accélééré, ne rayonne pas.

On suppose donc que **M décrit une trajectoire circulaire de centre O avec une énergie mécanique constante.**

- *Postulat optique* : le mouvement d'un électron d'une orbite à l'autre se traduit par **l'émission ou l'absorption d'énergie électromagnétique.**

### b) Orbite circulaire – Résultats classiques

Selon une **description classique** du mouvement circulaire de rayon  $r$  de l'électron, on peut exprimer :

- l'**énergie mécanique** de l'électron :  $E_m = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$

- la **norme du moment cinétique orbital** de l'électron :  $\|\vec{L}_O(M)\| = e\sqrt{\frac{mr}{4\pi\epsilon_0}}$

➔ **Démonstrations à connaître** : Etablir ces expressions en s'appuyant sur une étude de mécanique classique (cinématique et dynamique).

### c) Quantification du moment cinétique – Résultats quantiques

L'hypothèse de quantification du moment cinétique orbital impose la **quantification** :

- du **rayon** de l'orbite de l'électron :  $r_n = n^2 \cdot a_0$

avec  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 53 \text{ pm}$ , nommé **rayon de Bohr**.

- de l'**énergie mécanique** de l'électron :  $E_n = \frac{-E_0}{n^2}$

avec  $E_0 = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV}$ , nommé **énergie de Rydberg**.

➔ **Démonstrations à connaître** : Etablir ces expressions.

*Complément* : introduire la longueur d'onde de de Broglie  $\lambda$  associée à l'électron et en déduire que le périmètre du cercle décrit par l'électron est un multiple de  $\lambda$ .

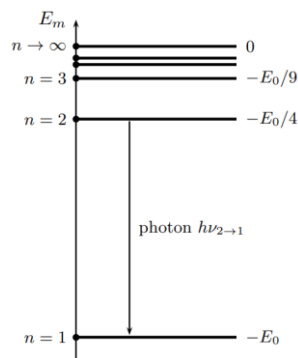


FIGURE 6 – Niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

#### **d) Succès et limites du modèle semi-classique de Bohr**

♦ Une orbite électronique correspond à une valeur de l'entier  $n$ . Elle est caractérisée par un rayon  $r_n$  et une énergie mécanique  $E_n$ .

D'après le postulat optique, l'électron échange de l'énergie électromagnétique (UV, visible, IR) avec l'extérieur lorsqu'il passe d'une trajectoire circulaire à une autre.

#### **Représentation schématique d'une transition énergétique**

Désexcitation de l'électron – émission d'un photon	Absorption d'un photon - Excitation de l'électron

**Le modèle semi-classique de Bohr permet d'interpréter le spectre de raies de l'atome d'hydrogène. À ce titre, il a eu son heure de gloire et a permis de faire accepter l'idée que la quantification des grandeurs physiques est nécessaire à l'échelle atomique.**

➔ **Exercice classique** : Montrer que les niveaux d'énergie obtenus avec le modèle de Bohr permettent de retrouver les longueurs d'onde émises par l'Hydrogène (relation de Ritz-Rydberg) :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \cdot \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Avec  $R_H = 1,097 \cdot 10^7 m^{-1}$ ,  $n_i$  et  $n_f$  les nombres quantiques des orbites de départ et d'arrivée de l'électron.

♦ Cependant, le modèle de Bohr n'est pas complètement satisfaisant :

- La quantification du moment cinétique orbital n'est pas justifiée.
- La notion de trajectoire n'est pas compatible avec l'inégalité de Heisenberg.
- L'expérience de Stern et Gerlach montre l'existence pour l'électron d'un vecteur moment magnétique intrinsèque d'origine purement quantique : spin.

La **description correcte des électrons des atomes est purement quantique** : il faut considérer l'**onde de matière** correspondant à un électron. L'état d'un électron est décrit par la **fonction d'onde**  $\psi(M, t)$  qui doit vérifier l'équation de Schrödinger. La **résolution de l'équation de Schrödinger** impose d'introduire 3 nombres entiers\* : les trois premiers nombres quantiques :  $n, l$  et  $m_l$  et le 4<sup>e</sup> nombre quantique  $m_s$  est le nombre quantique magnétique de spin.

**CCL** : L'état d'un électron au sein d'un atome est entièrement décrit par la donnée de ces **4 nombres quantiques**. Le quadruplet  $(n, l, m_l, m_s)$  correspondant à un électron caractérise une spin-orbitale atomique → *bases de l'architecture de la matière en chimie*.

\* **Rq** : Au ChMQ2, on verra une situation où la résolution de l'équation de Schrödinger implique l'introduction d'un nombre entier.

## Annexe 1 – Effet photo-électrique : expérience illustrant la nécessité de la notion de photon

La plupart des scientifiques pensaient que la théorie des quanta de Planck, bien qu'utile, n'était guère qu'une ruse mathématique. Cependant Einstein, qui débutait dans la recherche, exploita cette nouvelle interprétation en tant que telle. En 1905, il démontra que si la lumière se propage sous la forme d'un flux de particules, on pouvait alors interpréter un autre phénomène qui restait inexplicable par la physique classique : l'effet photoélectrique.

### a) Travail d'extraction

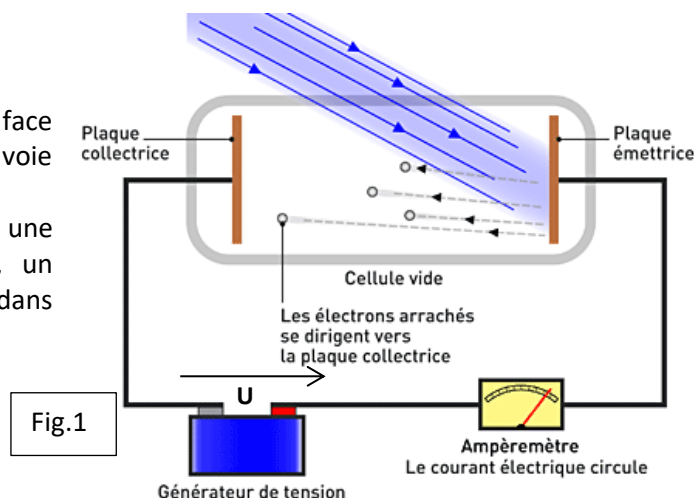
Lorsque l'on éclaire la surface d'un métal à l'aide d'un rayonnement lumineux (ou plus généralement électromagnétique), des électrons peuvent être émis par cette surface. D'un point de vue énergétique, un électron doit recevoir une certaine énergie pour pouvoir s'échapper du métal, c'est ce que l'on appelle le **travail d'extraction**  $W_{ext}$ . C'est donc le rayonnement lumineux qui fournit cette énergie à un électron émis par le métal.

Métal	Aluminium	Césium	Platine	Sodium	Zinc
$W_{ext}$ (eV)	4,08	2,1	6,35	2,28	4,5

### b) Dispositif expérimental

On place deux plaques métalliques (électrodes) face à face dans un tube à vide. Sur une des deux électrodes, on envoie de la lumière, de fréquence et d'intensité réglable.

De plus, grâce à un générateur, on peut aussi appliquer une tension réglable  $U$  entre les deux électrodes. Enfin, un ampèremètre permet de mesurer le courant qui circule dans le circuit.



### c) Intérêts du montage

- ♦ Si l'on mesure un courant non nul, c'est signe que des électrons se déplacent dans le vide de l'électrode de droite vers celle de gauche. Ces électrons ont nécessairement été arrachés par la lumière à l'électrode de droite.
- ♦ De plus, quand on applique une tension  $U$  positive (dans le sens indiqué sur le schéma), ces électrons ont tendance à être attirés par l'électrode de droite. Pour qu'ils arrivent à traverser le tube à vide (et que l'on observe un courant non nul), il faut donc qu'ils aient acquis initialement (i.e. au moment de l'extraction) une énergie cinétique supérieure à l'énergie nécessaire pour vaincre la différence de potentiel.

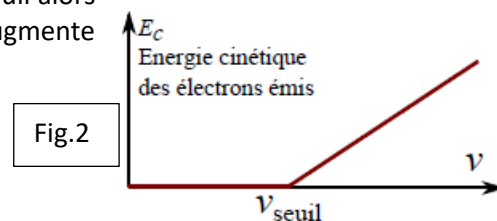
Cela impose que :  $E_c \geq eU$

- ♦ Ainsi, ce dispositif permet, à la fois, de **savoir si la lumière est capable d'arracher des électrons à la plaque métallique et ce que vaut l'énergie cinétique** (donc la vitesse) des électrons juste après avoir été arrachés.

### d) Résultats expérimentaux

- ♦ Pour un métal donné, il existe une fréquence minimale, appelée « **fréquence seuil** » notée  $\nu_{seuil}$ , de la lumière en-dessous de laquelle aucun électron n'est émis par la plaque, quelle que soit l'intensité de la lumière utilisée.
- ♦ Si l'on choisit une fréquence  $\nu$  de la lumière supérieure à la fréquence seuil alors des électrons sont émis et l'énergie cinétique des électrons arrachés augmente avec  $\nu$ .

Plus précisément, on obtient l'évolution ci-contre :



### e) Interprétation

Le paramètre d'intérêt est donc la fréquence  $\nu$  du rayonnement éclairant le métal :

- si  $\nu < \nu_{\text{seuil}}$  alors aucun électron n'est émis par le métal ;
- si  $\nu > \nu_{\text{seuil}}$  alors des électrons sont émis par le métal.

Cette notion de fréquence seuil ne s'explique pas par la physique classique. En effet, dans ce cadre, on s'attendrait plutôt à ce que des rayonnements lumineux peu intenses ne parviennent pas à fournir suffisamment d'énergie aux électrons, indépendamment de la fréquence. Le paramètre d'intérêt serait, selon cette interprétation, l'intensité du rayonnement. Or il n'en est rien.

Cette expérience s'interprète donc avec la **nature corpusculaire de la lumière**. En effet, selon cette description, l'énergie  $E$  d'un photon de fréquence  $\nu$  est :  $E = h\nu$ .

Pour pouvoir arracher un électron du métal, il faut lui fournir une énergie minimale qui correspond au travail d'extraction  $W_{\text{ext}}$ . On a ainsi :

$$W_{\text{ext}} = h\nu_{\text{seuil}}$$

Pour déterminer  $\nu_{\text{seuil}}$ , on règle  $U = 0$  et on augmente  $\nu$  jusqu'à ce que  $i > 0$ .

Si la lumière utilisée a une fréquence  $\nu$  supérieure à la fréquence seuil, des électrons vont pouvoir être arrachés car les photons ont une énergie  $E > W_{\text{ext}}$ . De plus, d'après la conservation de l'énergie, les électrons arrachés auront une énergie cinétique  $E_c$  telle que :

$$\begin{aligned} h\nu &= W_{\text{ext}} + E_c \\ \text{soit } E_c &= h\nu - W_{\text{ext}} \end{aligned}$$

(d'où la courbe de la fig.2)

A  $\nu$  fixé, on détermine  $E_c$  en faisant varier  $U$  de 0 à une valeur  $U_0 > 0$  telle que  $i = 0$  :  $E_c = eU_0$ .

➡ **Exercice classique** : Répondre aux questions suivantes :

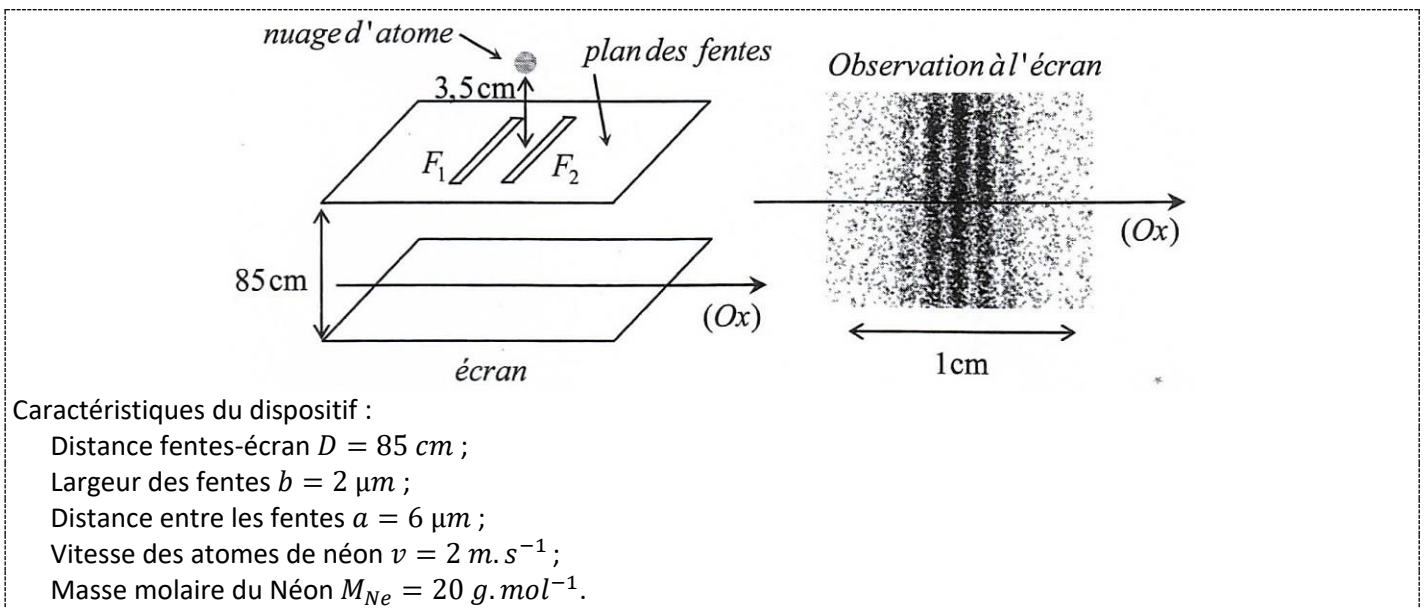
Vous pouvez vous aider de l'animation <https://phet.colorado.edu/en/simulations/photoelectric>

- \*1. Proposer une définition de l'effet photoélectrique. Faire un schéma très simple illustrant ce phénomène.
- \*2. Expliquer quel aspect de l'effet photoélectrique est en contradiction avec une théorie purement ondulatoire de la lumière, et pourquoi l'introduction de la notion de photon résout le problème.
3. Que vaut la pente de la droite de la Fig.2 ?
- \*4. Calculer la fréquence seuil de la lumière permettant une émission photoélectrique pour du Zinc, pour du Platine et pour du Césium. Dans chaque cas, donner la longueur d'onde correspondante puis indiquer de quel type de radiation il s'agit.
5. On réalise l'expérience avec une plaque de Zinc, en utilisant un rayonnement UV  $\lambda = 200 \text{ nm}$ .
  - a) Y aura-t-il des électrons arrachés ?
  - b) Si oui, quelle sera leur énergie cinétique juste après avoir été arrachés ?
  - c) Si on veut empêcher ces électrons d'atteindre l'autre électrode, quelle tension  $U_0$  faut-il appliquer entre les deux électrodes (cette tension s'appelle le « potentiel d'arrêt ») ?

## Annexe 2 – Fentes d’Young : expérience illustrant la nécessité de la notion d’ondes de matière

♦ L’expérience d’interférences réalisée en 1992 à l’université de Tokyo à l’aide d’**atomes de Néon** ultra froids a permis de valider la thèse de De Broglie selon laquelle **la matière se comporte à la fois comme des particules et comme des ondes**.

Un nuage d’atomes de Néon ultra froids est confiné dans un piège LASER à 3,5 cm du plan des fentes. Le refroidissement au milli-kelvin permet d’atteindre des vitesses de l’ordre de  $1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Lorsqu’on relâche les atomes du piège, ils chutent sur les fentes et sont détectés sur l’écran, une plaque sensible aux impacts : l’impact de chaque atome est représenté par une tache quasi-ponctuelle qui met donc en évidence le **caractère corpusculaire des atomes**. La même expérience a été menée avec des **électrons** en 1989 et plus récemment avec des molécules de **fullerène** (molécule constituée de 60 atomes de carbone) et a donné des résultats similaires.



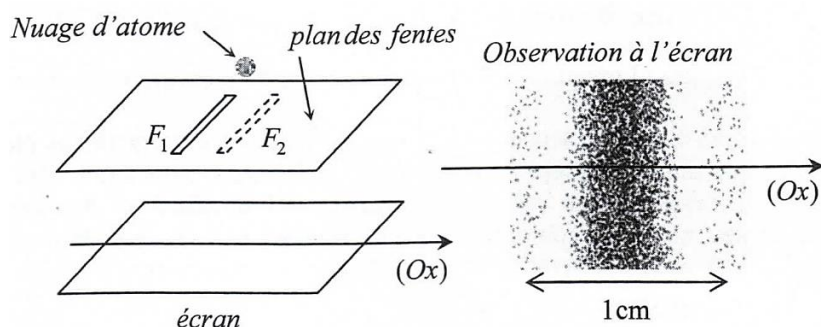
Procédons comme pour les interférences lumineuses obtenues avec les fentes d’Young, on repère  $x$  la coordonnée le long de l’axe perpendiculaire à la direction des fentes. On observe une distribution des impacts sur l’écran comparable à celle qui serait obtenue en lumière monochromatique. Ici les zones sombres correspondant à une forte densité d’impacts, alternent avec des zones claires (peu ou pas d’impacts) perpendiculaires à  $(Ox)$  : cette figure d’interférences met en évidence le **caractère ondulatoire des atomes**.

**NB** : La comparaison de l’onde de matière à une lumière monochromatique est à relier au caractère monocinétique des atomes (même vitesse thermique donc même longueur d’onde de De Broglie).

**Rq** : En toute rigueur, il faudrait tenir compte, dans le calcul de la longueur d’onde de De Broglie, de l’accélération des atomes lors de leur chute libre entre le piège et les fentes d’Young.

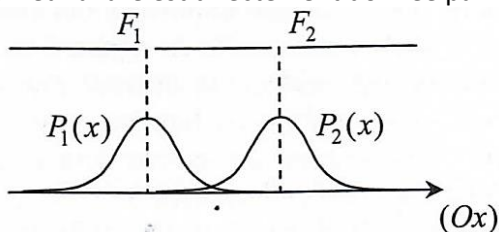
Que se passe-t-il si on obstrue une des fentes ?

Si on obstrue la fente  $F_2$ , tous les atomes passent par  $F_1$  avant d’atteindre l’écran et on obtient alors une distribution d’impacts centrée sur « l’image géométrique » de la fente  $F_1$  à l’écran (tache de diffraction). De même si on obstrue la fente  $F_1$ , on obtient la tache de diffraction relative à  $F_2$ .



♦ Interprétation purement corpusculaire

Une 1<sup>ère</sup> idée serait de considérer les atomes comme des « projectiles » classiques pour analyser les résultats. Si on note  $n(x)$  le nombre d'atomes par unité de temps qui touchent l'écran au point  $M$  d'abscisse  $x$  et  $n_{tot}$  le nombre total d'atomes touchant l'écran par unité de temps, la probabilité qu'un atome touche l'écran au point  $M$  d'abscisse  $x$  s'écrit  $P(x) = \frac{n(x)}{n_{tot}}$ . On notera ainsi  $P_1(x)$  (resp<sup>t</sup>  $P_2(x)$ ) la probabilité relative aux atomes passant par la fente  $F_1$  (resp<sup>t</sup>  $F_2$ ), l'autre fente étant obstruée. Leur allure est directement donnée par la densité d'impacts sur l'écran :

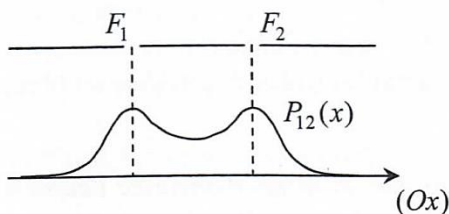


Lorsque les deux fentes sont ouvertes, on s'attend, dans cette approche corpusculaire, à une probabilité totale qui soit la somme des probabilités :  $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$ .

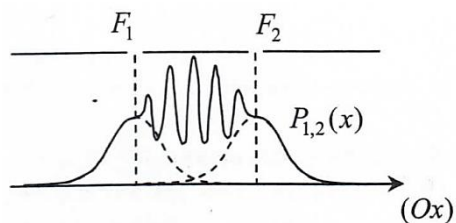
**La réalité expérimentale est très différente : on observe, dans la zone centrale de l'écran, des franges d'interférences incompatibles avec l'hypothèse  $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$ .** Ce ne sont donc pas les probabilités au sens « classique » qui s'ajoutent, cf § B.2.

Pour interpréter ce résultat, il faut **abandonner l'idée de trajectoire** i.e. que l'on ne peut pas savoir par quelle fente chaque atome est passé.

Résultat attendu selon une interprétation corpusculaire



Résultat obtenu expérimentalement

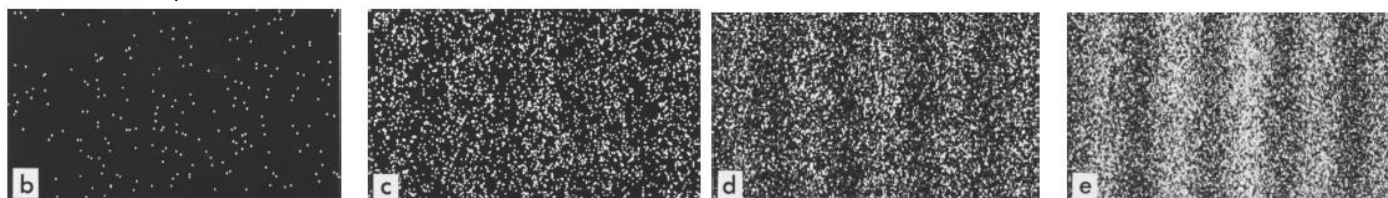


♦ Interprétation purement ondulatoire

On peut alors se demander si un atome individuel se comporte comme une onde. Pour répondre à cette question, on reprend l'expérience en réduisant le flux d'atomes de façon à ce qu'ils arrivent un à un.

Dans une approche ondulatoire, en diminuant le flux incident, par analogie avec l'optique à faible intensité, on devrait observer une figure d'interférences moins lumineuse. **Avec un flux réduit d'atomes, on observe au contraire que chaque atome donne lieu à un impact quasi ponctuel et non à une figure d'interférences.** L'approche purement ondulatoire semble donc à proscrire.

Cependant, pour un temps d'exposition suffisamment long, ces impacts ponctuels successifs reconstituent la figure d'interférences à mesure de leur arrivée à l'écran. Les figures ci-dessous représentent l'écran pour différents temps d'exposition croissants. On retrouve les franges d'interférences typiques du comportement ondulatoire (ici, les zones claires correspondent à une forte densité d'impacts et les zones sombres correspondent à une densité d'impacts faible ou nulle).



➔ **Exercice classique** : Répondre aux questions suivantes :

- \*1. En quoi l'expérience des fentes d'Young illustre-t-elle la nécessité de la notion d'ondes de matière ?
- \*2. En quoi cette expérience illustre-t-elle la notion de dualité onde-corpuscule pour la matière ?
- \*3. Calculer la longueur d'onde de De Broglie associée aux atomes de Néon, cf § A.3.

On donne l'expression de l'interfrange  $i$  lors de l'expérience des fentes d'Young :  $i = \frac{\lambda D}{a}$ .

- 4. Calculer l'interfrange pour les interférences d'atomes de Néon. Vérifier la cohérence avec la figure p.13.

Les expériences décrites ci-dessus sont illustrées par la vidéo : <https://toutestquantique.fr/dualite/>

### Annexe 3 – Rayonnement du corps noir

Un corps noir est un objet qui absorbe tout le rayonnement électromagnétique qu'il reçoit.

La **meilleure réalisation pratique d'un corps noir** correspond à une **ouverture de faible dimension** pratiquée dans une **enceinte creuse** dont les parois sont maintenues à une température fixe  $T$ . Tout rayonnement provenant de l'extérieur et qui arrive sur l'ouverture entre dans l'enceinte et subit un très grand nombre de réflexions. Du fait de l'absorption partielle des parois intérieures de la cavité, le rayonnement est absorbé avant de pouvoir sortir de la cavité.

A l'équilibre, l'enceinte émet un rayonnement, c'est le rayonnement du corps noir.

L'une des caractéristiques fondamentales du rayonnement du corps noir est que la « couleur » du rayonnement émis dépend de la température du corps noir. Dans la mesure où la « couleur » est liée à la longueur d'onde, cela signifie que l'intensité du rayonnement émis à chaque longueur d'onde dépend de la température du corps, ce qui se vérifie quotidiennement : un radiateur rayonne dans l'infrarouge sans rougir. Lorsqu'on chauffe un métal, il passe du rouge au jaune puis devient blanc (avec un maximum dans le bleu).

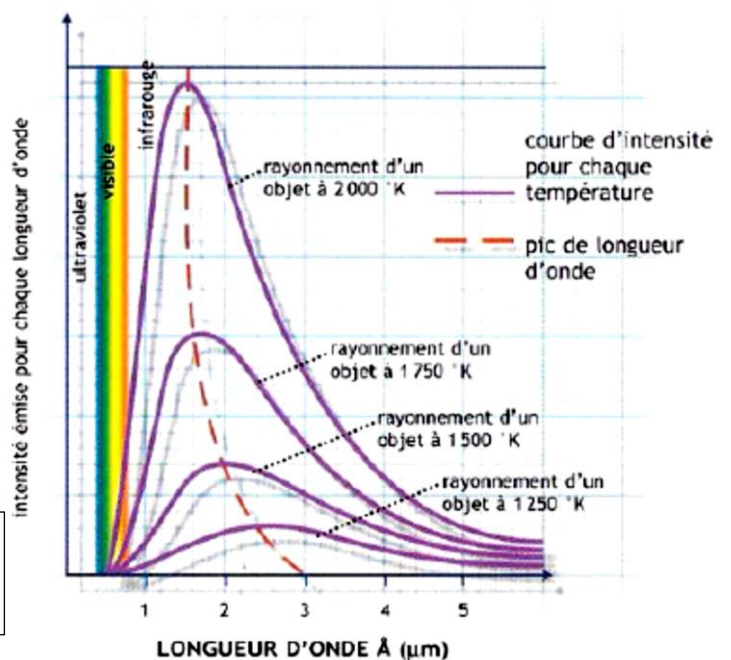
Dès les années 1890, les expériences avaient mis en évidence la relation existant entre le rayonnement d'un corps noir et sa température, la loi de Wien :

$$\lambda_m T = 3000 \mu\text{m} \cdot \text{K}$$

avec  $T$  la température du corps noir et  $\lambda_m$  la longueur d'onde du pic d'émission du corps noir i.e. la longueur d'onde qui correspond au maximum d'intensité du rayonnement.

Lorsque  $T$  augmente, le pic d'émission se déplace vers les longueurs d'onde courtes (depuis l'infrarouge vers le bleu).

Fig.1 : Spectre expérimental d'un corps noir → (on retrouve l'allure du spectre d'émission d'une lampe à incandescence)



Or, d'après la physique classique, l'intensité du rayonnement émis devrait être proportionnelle à la fréquence : plus celle-ci est grande (donc plus la longueur d'onde est courte), plus le rayonnement devrait être important, quelle que soit la température. La majeure partie de l'énergie émise devrait donc se trouver dans l'ultraviolet, et la courbe ne devrait présenter aucun pic. Or la courbe expérimentale présente bien un maximum, contrairement à la courbe théorique !

Cette « catastrophe ultraviolette » contribua à remettre en cause la physique classique et à chercher d'autres théories pour représenter le monde physique.

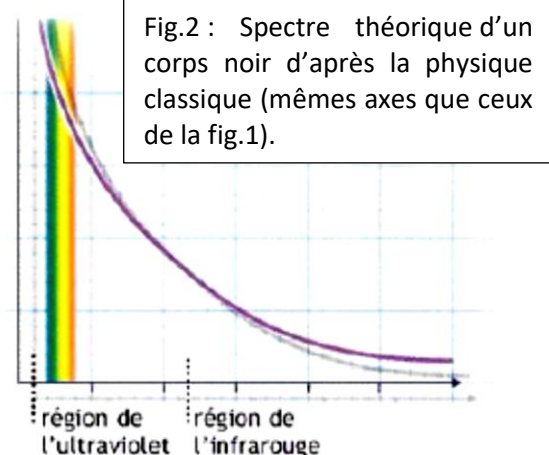


Fig.2 : Spectre théorique d'un corps noir d'après la physique classique (mêmes axes que ceux de la fig.1).