Physique quantique – chapitre 1

Introduction à la physique quantique

> *Those who are not shocked when they first come across quantum theory cannot possibly have understood it.*
>
> Niels Bohr, 1952, Copenhague

Sommaire

I Introduction **2**
- I/A Un peu d'histoire 2
- I/B Comportements ondulatoires 3

II Dualité onde-corpuscule **3**
- II/A Nature corpusculaire de la lumière 4
- II/B La matière : onde et corpuscule 5
- II/C Modèle semi-classique de Bohr 6

III Formalisme quantique **7**
- III/A Retour sur l'expérience 7
- III/B Notion de fonction d'onde 7
- III/C Inégalité d'Heisenberg 8

Capacités exigibles

- ☐ Décrire un exemple d'expérience mettant en évidence la nécessité de la notion de photon.
- ☐ Décrire un exemple d'expérience mettant en évidence le comportement ondulatoire de la matière.
- ☐ Évaluer des ordres de grandeurs typiques intervenant dans des phénomènes quantiques.
- ☐ Interpréter une expérience d'interférences (matière ou lumière) « particule par particule » en termes probabilistes.
- ☐ Inégalité de Heisenberg spatiale : établir par analogie avec la diffraction des ondes lumineuses, l'inégalité en ordre de grandeur : $\Delta p \Delta x \geq \hbar$.
- ☐ Modèle de Bohr : exploiter l'hypothèse de quantification du moment cinétique orbital pour obtenir l'expression des niveaux d'énergie électronique de l'atome d'hydrogène.

L'essentiel

Définitions

- ☐ MQ1.1 : Diffraction 3
- ☐ MQ1.2 : Interférence 3
- ☐ MQ1.3 : Onde et corpuscule 3
- ☐ MQ1.4 : Photons 4
- ☐ MQ1.5 : Types de transitions 4
- ☐ MQ1.6 : Longueur d'onde de de Broglie 5
- ☐ MQ1.7 : Fonction d'onde 7

Propriétés

- ☐ MQ1.1 : Transitions atomiques 4
- ☐ MQ1.2 : Probabilité de présence 7
- ☐ MQ1.3 : Indétermina° quantique intrinsèque 8
- ☐ MQ1.4 : Inégalité de Heisenberg spatiale 8

Implications

- ☐ MQ1.1 : Conséquence de la fonction d'onde 8

Exemples

- ☐ MQ1.1 : Vidéo 5
- ☐ MQ1.2 : Fonction d'onde et effondrement 7

Points importants

- ☐ MQ1.1 : Modèle de Bohr 6
- ☐ MQ1.2 : Fentes d'Young et probabilité 7

Erreurs communes

- ☐ MQ1.1 : Écart-type vs. incertitude 8

I Introduction

I/A Un peu d'histoire

Dans notre vie quotidienne, nous interagissons avec des systèmes à une échelle macroscopique, qu'on modélise assez correctement en physique par un assemblage de systèmes à l'échelle mésoscopique. L'idée de trouver une brique élémentaire à ce qui compose notre monde, qui nous donnerait des clés pour le comprendre en le prédire en totalité, est naturellement une idée ancienne. Le concept premier d'« atome », du grec *atomos*, « insécable », pensé par DÉMOCRITE et ÉPICURE, traduisait cette brique fondamentale hypothétique. Cependant, l'accès expérimental à cette potentielle réalité physique est resté difficile pendant de nombreux siècles.

En attendant, la majeure partie du monde physico-chimique tel qu'on le concevait a été étudié et décrit : la mécanique des solides et la mécanique des fluides, la thermodynamique et la thermochimie, les ondes sonores et l'optique géométrique… mais les questions sur la nature profonde de certains phénomènes restent ouvertes, et de vifs débats enflamment les plus grands esprits.

Au début du XXe siècle, la lumière échappe à cette compréhension profonde. Les outils existant sont ceux de la mécanique de NEWTON (fin du XVIIe siècle) et l'électromagnétisme de MAXWELL (milieu et fin du XIXe siècle) : c'est la physique **classique**, description du monde alors très robuste et complètement déterministe, donnant une raison infiniment claire à toute observation du monde réel. Cette vision est très ancrée dans l'esprit des plus éminent-es penseur-euses, comme l'atteste cette citation de LAPLACE (encore lui) :

> « *Nous devons donc envisager l'état présent de l'Univers comme l'effet de son état antérieur et comme la cause de celui qui va suivre. Une intelligence qui, pour un instant donné, connaîtrait toutes les forces dont la nature est animée, et la situation respective des êtres qui la composent, si d'ailleurs elle était assez vaste pour soumettre ces données à l'Analyse, embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'univers et ceux du plus léger atome : rien ne serait incertain pour elle et l'avenir, comme le passé serait présent à ses yeux.* »
>
> Pierre-Simon LAPLACE, *Essai philosophique sur les probabilités*, 1840

Cependant, quelques expériences les mettent en défaut :

- **L'effet photoélectrique** : exposer une plaque métallique exposée à de la lumière permet d'en arracher des électrons. Cependant, et ce **peu importe l'intensité du faisceau**, aucun électron n'est arraché si la lumière en question est au-dessus d'une certaine longueur d'onde (couleur) : l'éjection **n'apparaît qu'en-dessous d'une longueur d'onde seuil** λ_0, ce que la physique classique n'explique alors pas encore.

  Une proposition de résolution proposée par EINSTEIN est le modèle du photon (voir plus loin), **quantifiant l'énergie** en « grains », avec $\mathcal{E}$ **proportionnelle à leur fréquence**, et en supposant qu'un électron ne peut absorber *qu'un photon à la fois*. Ainsi, augmenter l'intensité du faisceau ne fait qu'augmenter le nombre, mais pas l'énergie individuelle.

  FIGURE MQ1.1 – Éjection des électrons d'un métal sous l'effet d'un faisceau lumineux.

- **Raies atomiques** : en excitant un gaz d'un élément unique (comme l'hydrogène ou le néon) avec une tension électrique, le milieu dégage de la lumière. En la décomposant par un prisme, on obtient alors des raies très définies, à l'opposé des spectres continus qu'on observe généralement comme celui du soleil par exemple. Cette précision de longueur d'onde émise échappe à la physique classique.

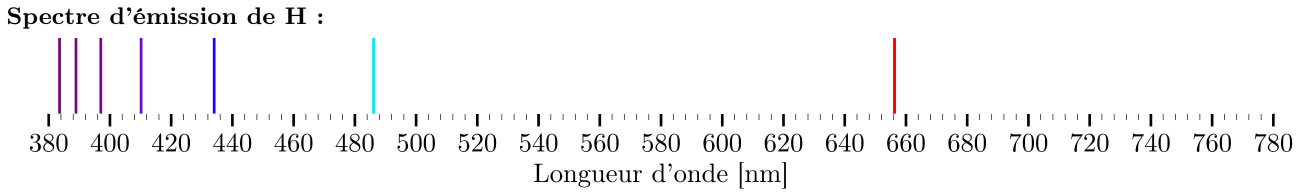


FIGURE MQ1.2 – Spectre *discret* d'émission des raies de l'hydrogène.

La résolution de ces incompréhensions va mener à la naissance de la mécanique **quantique**, issu du latin *quanta*, qui permet une description des phénomènes physiques non pas comme un ensemble de phénomènes continus, mais comme un ensemble de phénomènes **quantifiés**, notamment *via* des états d'énergie discrets et définis. Par exemple, c'est comme si on pouvait aller à 50 **ou** 70 $\mathrm{km \cdot h^{-1}}$ en voiture, mais pas à une valeur intermédiaire.

Cette nouvelle approche du monde va bouleverser la façon de comprendre certains phénomènes, et est à l'origine d'innombrables applications : le laser, l'énergie nucléaire, l'IRM, les semi-conducteurs et donc de toute l'électronique, mais aussi toute la matière plus généralement et donc les interactions chimiques. Avant d'en établir les fondements, rappelons quelques notions sur les phénomènes ondulatoires que l'on a vus en physique classique.

I/B Comportements ondulatoires

I/B) 1 Diffraction

Une goutte d'eau seule ne fait pas une marrée : c'est la collection d'objets tangibles qui se meuvent de manière cohérente qui créé les vagues. On étudie alors la vague comme un ensemble mais dont on comprend l'origine individuelle. Une onde présente des propriétés particulières, dont une dont on a déjà parlé au début de l'année : la **diffraction**.

Définition MQ1.1 : Diffraction

Lorsqu'une onde progressive rencontre un obstacle donc les dimensions sont de l'ordre de la longueur d'onde, la partie de l'onde qui la passe subit un **étalement circulaire**, qu'on appelle **diffraction**.

Une onde plane de longueur d'onde λ arrivant sur une fente de taille $a \lesssim \lambda$ est diffractée *majoritairement* dans un cône, de demi-angle d'ouverture

$$\boxed{\sin\theta = \frac{\lambda}{a}} \quad \text{soit} \quad \boxed{\theta \underset{\theta \ll 1}{\sim} \frac{\lambda}{a}} \quad \text{en \textbf{radians}}$$

Ce comportement décrit très bien les ondes de matière comme les ondes sonores ou les vagues arrivant dans un port, mais correspond également à ce que subit la lumière en passant dans une fente.

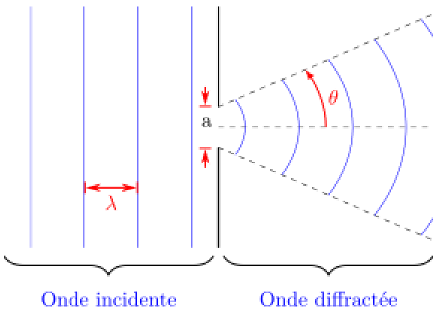


FIGURE MQ1.3 – Diffraction par une fente. Les traits bleus représentent les maxima de l'onde.

I/B) 2 Interférences

Une autre particularité des ondes est le phénomènes d'interférences :

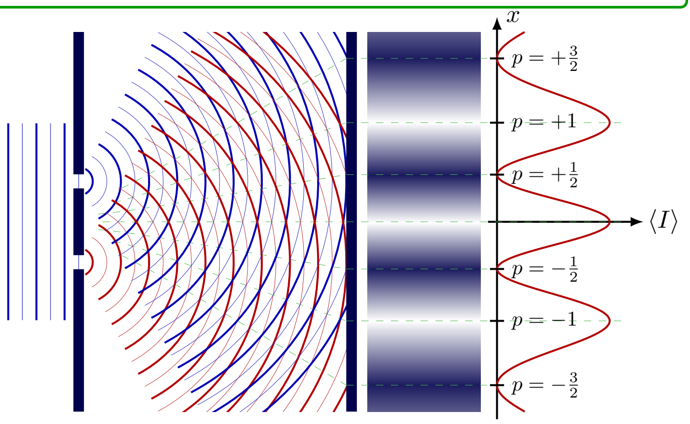
Définition MQ1.2 : Interférence

Deux ondes de même nature se rencontrant en un point M se superposent en **sommant leurs signaux**.

Également décrite plus tôt dans l'année, l'expérience des **fentes d'Young** en est le meilleur exemple.

La zone de l'espace où les faisceaux se superposent est appelé **champ d'interférences**. Sur un écran, on observe alors la figure ci-contre, avec des variations d'intensité lumineuse :

- ◇ au milieu des zones claires (**maximum** local d'intensité) on a des **interférences constructives** ;
- ◇ au milieu des zones sombres (**minimum** local d'intensité) on a des **interférences destructives**.



Conclusion

Ainsi, il est clair que la lumière a un comportement ondulatoire. On peut donc songer que ce comportement est issu d'une collection d'objets individuels qui la composerait, des « corpuscules » de lumière : les photons.

II Dualité onde-corpuscule

En physique classique (au XIX^{e}), le mouvement d'un corpuscule et d'une onde sont très différents :

♥ Définition MQ1.3 : Onde et corpuscule

- ◇ Un **corpuscule** est **localisé**, est soumis à des forces, et obéit aux lois de NEWTON ;
- ◇ Une **onde** n'est **pas localisée** mais est **étendue** dans l'espace, peut être diffractée et interférer.

II/A Nature corpusculaire de la lumière

En 1900, Max Planck, pour expliquer le spectre des corps chauffés, puis Einstein, en 1905, pour expliquer l'effet photoélectrique, font émerger l'hypothèse que la lumière est composés de petits grains de lumières : les photons. Le plus petit paquets d'énergie échangé avec une radiation de fréquence ν vaut $\Delta E = h\nu$ où h est la constante de Planck.

Définition MQ1.4 : Photons

La lumière correspond au déplacement de particules appelées **photons** qui :

◇ sont **sans masse** : $m_{\text{photon}} = 0$;

◇ se déplaçent à la célérité de la lumière (c dans le vide, c/n sinon) ;

◇ transportent **chacun** une énergie :

◇ ont comme quantité de mouvement

Application MQ1.1 : Énergie d'un photon

Calculer l'énergie transportée par un photon « bleu », puis un photon « rouge », en J d'abord puis en eV ensuite [1].

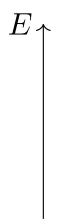
◇

◇

Pour expliquer l'effet photoélectrique, il faut encore justifier l'absorption quantifiée. Pour cela, on établit (et ici on admet) le modèle suivant :

Propriété MQ1.1 : Transitions atomiques

L'énergie des électrons autour d'un atome ne peut prendre que certaines valeurs précises et est **quantifiée** en niveaux, entre le **fondamental** quand il est au repos et les niveaux **excités** sinon.



Définition MQ1.5 : Types de transitions

◇ **Absorption** : un photon d'énergie $h\nu$ arrive sur un atome dont un électron est sur le niveau d'énergie $\mathcal{E}$. Le photon peut alors être absorbé **seulement** s'il existe un autre niveau d'énergie $\mathcal{E}'$ où il atterrit, tel que

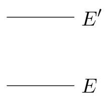


Figure MQ1.4

Ainsi, **seules certaines longueurs d'ondes** peuvent être absorbées, dépendant des composition atomiques.

◇ **Émission spontanée** : à l'inverse, un électron dans un état excité $\mathcal{E}'$ peut se **désexciter en émettant un photon**, en arrivant à l'état d'énergie $\mathcal{E}$. Le photon émis vérifie alors

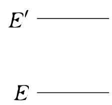
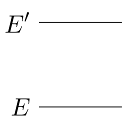


Figure MQ1.5

Ici aussi, il n'y a que **certaines longueurs d'ondes** pouvant être émises.

◇ **Émission stimulée** : dans certains cas, un électron à un niveau excité $\mathcal{E}'$ peut **recevoir un photon et en émettre deux identiques**, en descendant l'électron à un niveau $\mathcal{E}$.

C'est l'origine du LASER (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, soit « amplification de la lumière par émission stimulée de radiation ».)



1. $1\,\text{eV} = 1{,}602 \times 10^{-19}\,\text{J}$

II/B La matière : onde et corpuscule

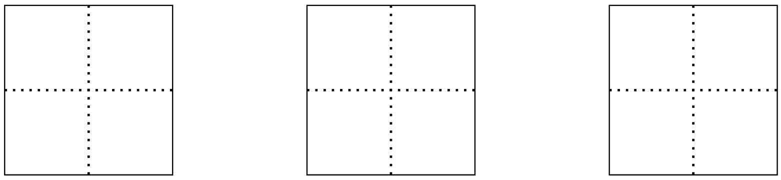
Nous venons de voir que la lumière présentait un comportement à la fois ondulatoire et à la fois corpusculaire. Cette dualité onde-corpuscule peut aussi être étendue à la matière. Il est en effet possible d'observer avec des électrons ou des petites molécules des franges d'interférences.

Exemple MQ1.1 : Vidéo

Une vidéo explicative de qualité est disponible à partir du site https://toutestquantique.fr/dualite/. Dans cette vidéo, les particules sont projetées sur une surface composée de deux fentes et on observe une figure d'interférences sur l'écran derrière. Si on bouche un des trous, la figure est radicalement différente, et signe de l'absence d'interférences.

On observe alors que ces interférences n'émergent que si les particules « passent par les deux trous » : ainsi, **la particule se comporte comme une onde**.

En effet, si on a affaire à une particule matérielle, en laissant les deux fentes ouvertes on devrait observer les deux séries d'impacts. Or, l'expérience montre l'émergence d'impacts correspondants aux interférences :



1 ouverte / 2 fermée   1 et 2 ouvertes   1 fermée / 2 ouverte

« Pire » encore, l'**observation perturbe la mesure** et semble « annuler » les effets quantiques.

Avant d'entamer la suite, un rapide rappel de mécanique classique s'impose. Dans toutes les théories établies jusque-là[2], le mouvement d'une particule matérielle ($m \neq 0$ donc électrons, protons, balle de tennis...) est décrit par :

1) Sa quantité de mouvement $\vec{p} = m\vec{v}$;
2) son énergie cinétique $\mathcal{E}_c = \frac{1}{2}mv^2$.

Pour quantifier les effets ondulatoires d'une particule de masse m et de vitesse v, on lui associe une longueur d'onde :

Définition MQ1.6 : Longueur d'onde de de Broglie

Une onde de matière associée à une particule matérielle :

- ◇ se propage à la vitesse v de déplacement de la « particule » ;
- ◇ a pour longueur d'onde la longueur d'onde de de Broglie :

On a alors diffraction de matière possible si la fente est de largeur $a \lesssim \lambda_{\text{DB}}$.

Application MQ1.2 : Longueur d'onde de matière

1) Vérifier l'homogénéité de la formule précédente.

2) Calculer la longueur d'onde de de Broglie d'une balle de tennis d'une part, puis d'un électron allant à la vitesse $c/10$ d'autre part. Les effets quantiques peuvent-ils se manifester à ces échelles ?

2. **Attention**, en mécanique **non-relativiste** uniquement : $v < \frac{1}{10}c$.

II/C Modèle semi-classique de Bohr

On considère le mouvement d'un électron en orbite, au sens classique du terme, autour d'un atome, mais on suppose que **son moment cinétique est quantifié** :

$$\mathcal{L}_z = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}$$

Hypothèses

- ◇ On néglige le mouvement du proton par rapport à celui de l'électron ($\|\vec{a}_e\|/\|\vec{a}_p\| = m_p/m_e \approx 1800$) ;
- ◇ On néglige la force gravitationnelle devant la force électrostatique ($\|\vec{F}_g\|/\|\vec{F}_e\| = (4\pi\varepsilon\mathcal{G}m_em_p)/(e^2) \approx 10^{-40}$) ;
- ◇ On suppose le mouvement circulaire.

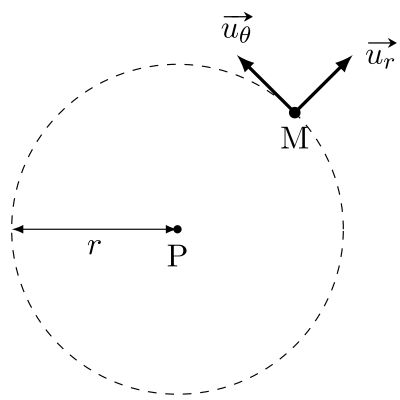
On étudie le mouvement de l'électron, assimilé à un point matériel M dans le référentiel du proton, supposé galiléen. On utilise une base cylindrique $(\vec{u_r},\vec{u_\theta},\vec{u_z})$ autour du proton.

Repérage : $\vec{v} =$

$\vec{a} =$

Bilan des forces : $\vec{F}_e =$

PFD : $\left\{ \right.$ soit $\left\{ \right.$



On détermine les orbites accessibles en utilisant l'hypothèse de quantification, $\mathcal{L}_z = n\hbar$. Avec les données, on a

L'énergie correspondante est alors

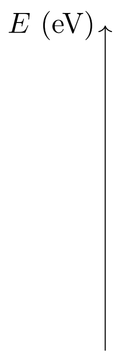


Figure MQ1.6

Important MQ1.1 : Modèle de Bohr

Même si cette approche a des défauts, elle a le mérite de **redonner le spectre d'absorption de l'hydrogène** entre deux couches m et n, décrites par le physicien Johannes Rydberg :

avec

Ainsi, une seule quantification permet rapidement de franchir un gap énorme de compréhension sur la structure du monde physico-chimique.

III Formalisme quantique

III/A Retour sur l'expérience

Dans l'expérience des fentes d'Young, on peut se poser la question suivante : « détecte-t-on la particule en un point M ? ». On introduit pour cela la **probabilité de présence** :

Propriété MQ1.2 : Probabilité de présence

La probabilité de présence est une quantité mathématique, d'intégrale égale à 1 sur son domaine de définition, telle qu'entre x et $x + \mathrm{d}x$ elle s'écrive

avec $p(x)$ la *densité de probabilité de présence* (ou « probabilité ponctuelle »).

Si une fente est fermée Si l'une des fentes est fermée, on observe une densité de probabilité de présence d'une forme pour le passage d'un obstacle :

Si les deux fentes sont ouvertes Il se passe alors quelque chose de phénoménal pour une particule de matière, la densité de probabilité de présence a l'allure suivante :

Important MQ1.2 : Fentes d'Young et probabilité

Lors du passage d'une particule par deux fentes de faible largeur, **les densités de probabilités de présence ne se somment pas** :

La densité totale semble donc émerger d'une grandeur plus fondamentale.

III/B Notion de fonction d'onde

La grandeur qui s'additionne lorsque l'on superpose les situations 1 et 2 n'est pas la densité de probabilité, mais la **fonction d'onde** (similaire aux ondes « classiques » : ce ne sont pas les amplitudes qui se somment, mais les signaux) :

Définition MQ1.7 : Fonction d'onde

On associe à une particule quantique une **fonction d'onde**, notée $\psi(\mathrm{M},t)$, de **valeurs complexes**, avec :

la probabilité de *détecter* la particule au point M et à l'instant t.

Exemple MQ1.2 : Fonction d'onde et effondrement

Figure MQ1.7 – Avant mesure.

Figure MQ1.8 – Après mesure.

Application MQ1.3 : Fonction d'onde pour les trous d'Young

Cette définition permet d'interpréter les trous d'Young. Soit $\psi(\mathrm{M},t)$ la fonction d'onde de la superposition :

Implication MQ1.1 : Conséquence de la fonction d'onde

Depuis l'introduction de cette notion, les débats sur l'interprétation de cet « effondrement » (ou plutôt « réduction du paquet d'onde ») font rage entre les physicien-nes « empiristes » (Bohr, Heisenberg, Born, Dirac… cf. interprétation de Copenhague) et « rationalistes » (cf. interprétation des « Mondes Multiples »). Pour une approche vulgarisée, voir la vidéo de Science Étonnante – Le plus gros problème de la mécanique quantique.

Quoiqu'il en soit, même loin de cette spécificité-là, la description de la matière par fonction d'onde rend **obsolète l'idée-même de trajectoire**, puisqu'il devient impossible de connaître précisément la position d'une particule quantique.

III/C Inégalité d'Heisenberg

Une autre implication majeure de cette définition réside dans une autre propriété de la mesure quantique :

Propriété MQ1.3 : Indétermination quantique intrinsèque

La mesure d'une grandeur X sur un système quantique donne *a priori* un résultat aléatoire, pris dans la distribution de la densité de probabilité $p(x)$, caractérisée par son écart quadratique ΔX :

Attention MQ1.1 : Écart-type vs. incertitude

Il est facile de plonger dans l'interprétation de cet écart comme une limite des instruments, mais ça serait passer à côté de toute la physique quantique. Tout aussi précis soit-il, un instrument mesurant de l'aléatoire plein de fois aura des valeurs aléatoires !

En mécanique quantique, la nécessité de prendre en compte le caractère ondulatoire implique une indétermination sur la position et la quantité de mouvement de la particule (une onde ne peut pas être parfaitement localisée), et ce indépendamment de toute problématique de précision des mesures.

Propriété MQ1.4 : Inégalité de Heisenberg spatiale

Soit une particule quantique repérée par sa position x et par sa quantité de mouvement $p_x = mv_x$. Leurs écarts-types respectifs ne sont **pas indépendants**, et vérifient l'**inégalité de Heisenberg** (dite spatiale) :

La relation est presque vérifiée pour un système quantique.

Démonstration MQ1.1 : Inégalité de Heisenberg

Par analogie avec la diffraction lumineuse, on peut appliquer le raisonnement de la fente unique à une particule quantique. La limitation de son mouvement par une fente de largeur $a = \Delta x$ donne $\theta \approx \frac{\lambda}{\Delta x}$; par contre, cela s'accompagne d'une incertitude sur la quantité de mouvement de la particule : alors qu'elle était 100% selon x au départ, elle s'étale avec $\Delta p \approx p\theta$. En combinant ces deux relations avec la longueur d'onde de de Broglie :

Remarque MQ1.1 : Vidéo

Pour un point de vue plus général sur cette inégalité et aller en profondeur sur son origine et *les* inégalités de Heisenberg, je vous conseille infiniment vivement la vidéo de 3Blue1Brown – The more general uncertainty principle, regarding Fourier transforms.