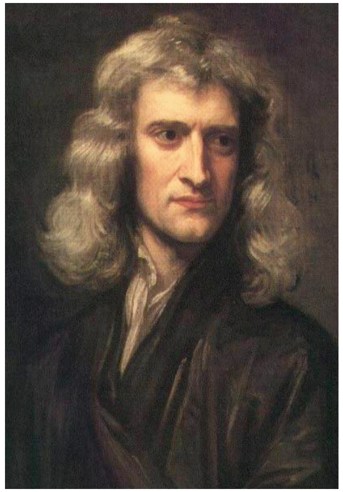
# L'avènement de la physique quantique

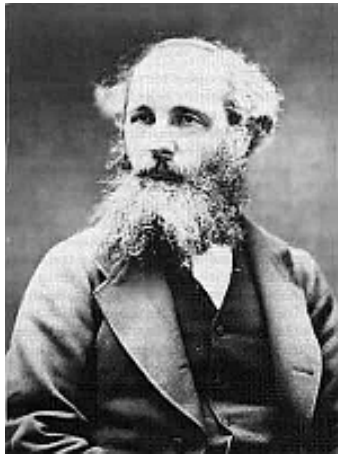
# Situation des sciences à la fin du 19e siècle

**Deux grands domaines :**

✓ les sciences de la matière :
mécanique, thermodynamique, astronomie
**Isaac Newton 1687**



✓ les sciences du rayonnement :
optique, électricité, électromagnétisme
**James Maxwell 1862**



# Equation fondamentale de la dynamique

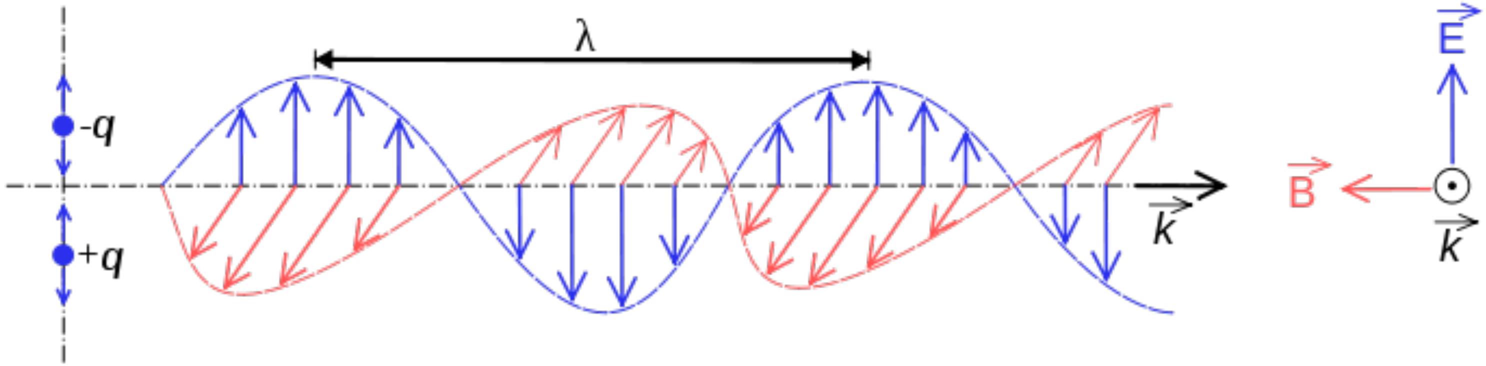
L'équation fondamentale de la dynamique classique, ou équation de Newton, permet de déterminer l'état dynamique et donc la ***trajectoire*** d'un objet matériel.

$$\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}} = m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = m\vec{\Gamma}$$

V  est l'énergie potentielle qui s'exerce sur l'objet de masse *m*
Le vecteur ***r*** = {x,y,z} donne la position de l'objet dans l'espace
Le vecteur ***v*** est la vitesse de l'objet (m.s$^{-1}$)
Le vecteur $\mathbf{\Gamma}$ est l'accélération de l'objet (m.s$^{-2}$)

# Les ondes électromagnétiques

La lumière visible ou invisible est décrite par une onde, c'est à dire une oscillation du champ électromagnétique dans le temps et l'espace :




**Equations de Maxwell:** Dans le vide, pour chaque composante de **E** ou **B** (notée Ψ)

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

# Les ondes électromagnétiques

La solution des équations de Maxwell est de la forme **:**

$$\Psi = \Psi_0 \cos\left(kx - \omega t\right)$$

*k* est le ***vecteur d'onde*** et $\omega$ la ***pulsation***.

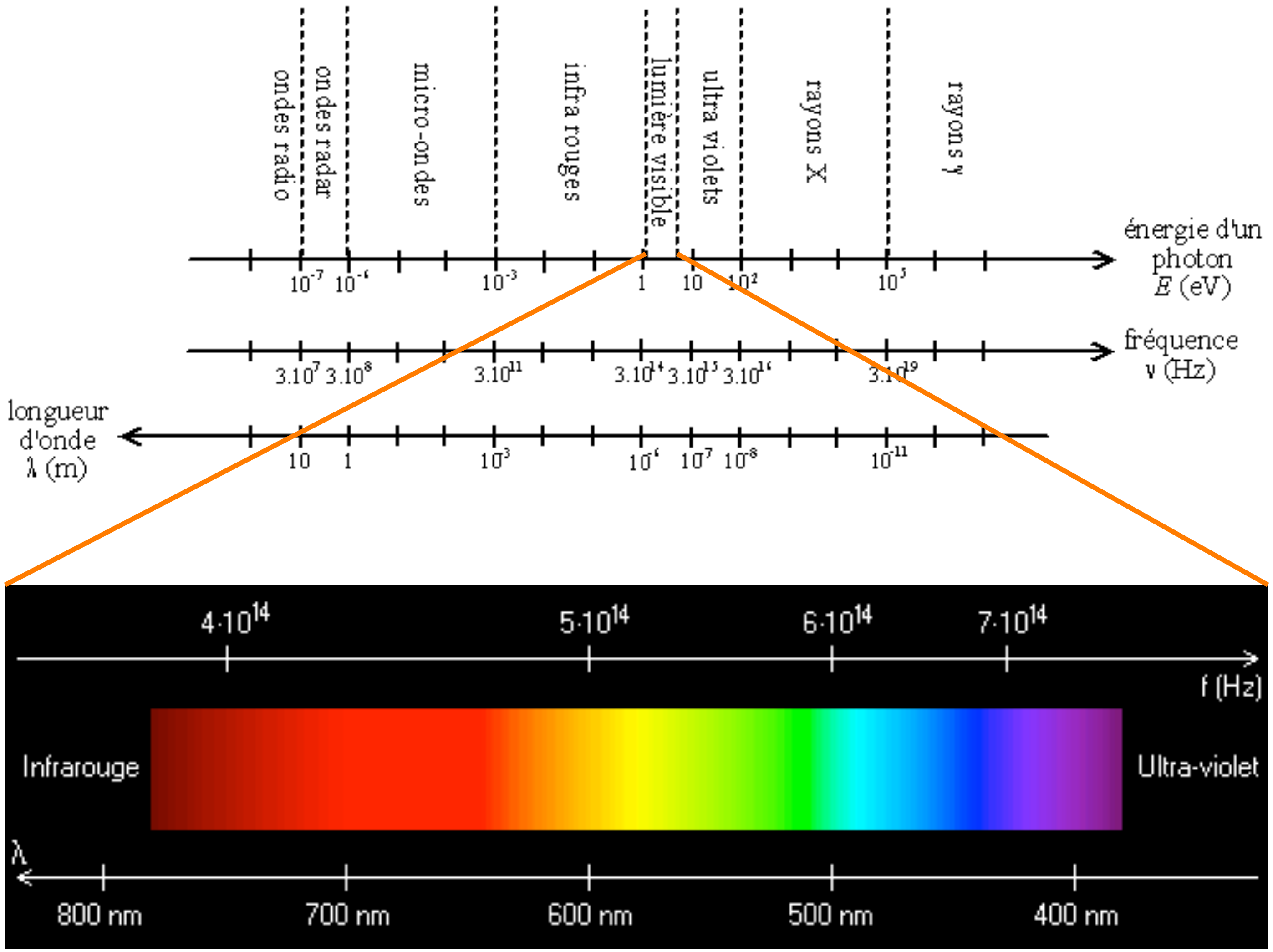
La pulsation est liée à la ***fréquence*** $\nu$ du rayonnement par la relation :

$$\omega = 2\pi\nu$$

La ***longueur d'onde*** $\lambda$ et le ***nombre d'onde*** sont définis par :

$$\lambda = 2\pi/k = c/\nu = 1/\overline{\nu}$$

# Le spectre électromagnétique



# Le spectre électromagnétique

# La fin de la physique ?

*There is nothing new to be discovered in physics now. All that remains is more and more precise measurement.*

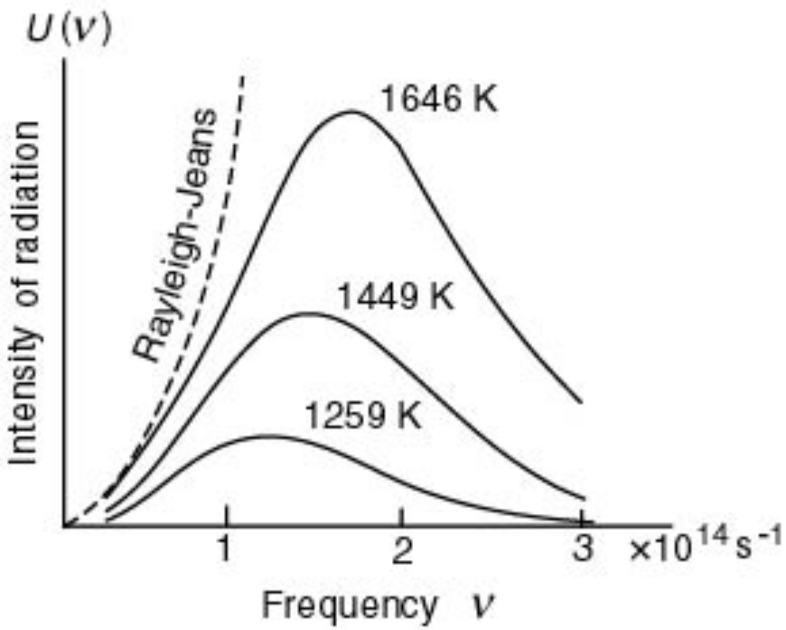
**Lord Kelvin, 1900**
*at the British Association for the advancement of Science*

# La fin de la physique ?

A l'aube du 20ème siècle, quelques expériences mettant en jeu l'interaction entre le rayonnement et la matière restent pourtant inexpliquées :

- ✓ le rayonnement thermique
- ✓ l'effet photoélectrique
- ✓ le spectre de raies de l'atome d'hydrogène

# Le rayonnement thermique



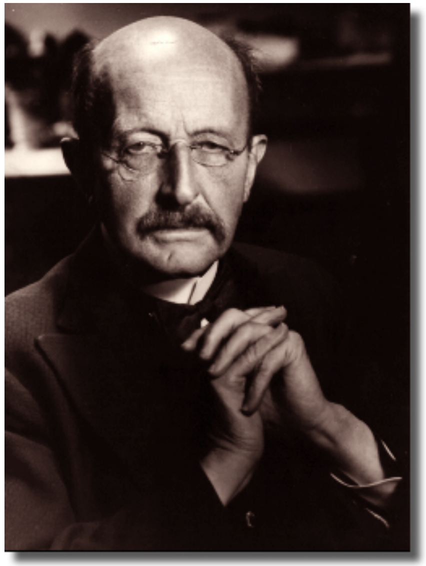

Un corps porté à haute température émet un rayonnement électromagnétique.
Si T augmente, le rayonnement se déplace vers les hautes fréquences.

**Modèle classique de Rayleigh et Jeans :**
Les ions oscillent avec un ensemble continu de fréquences autour de leur position moyenne. Ces oscillations sont responsables de l'émission du rayonnement.

**La « catastrophe » UV :** basé sur des échanges continus entre la lumière et la matière, le modèle de Rayleigh-Jeans ne décrit le comportement expérimental qu'aux basses fréquences.

# Le rayonnement thermique

**L'hypothèse de Max Planck (1900)**



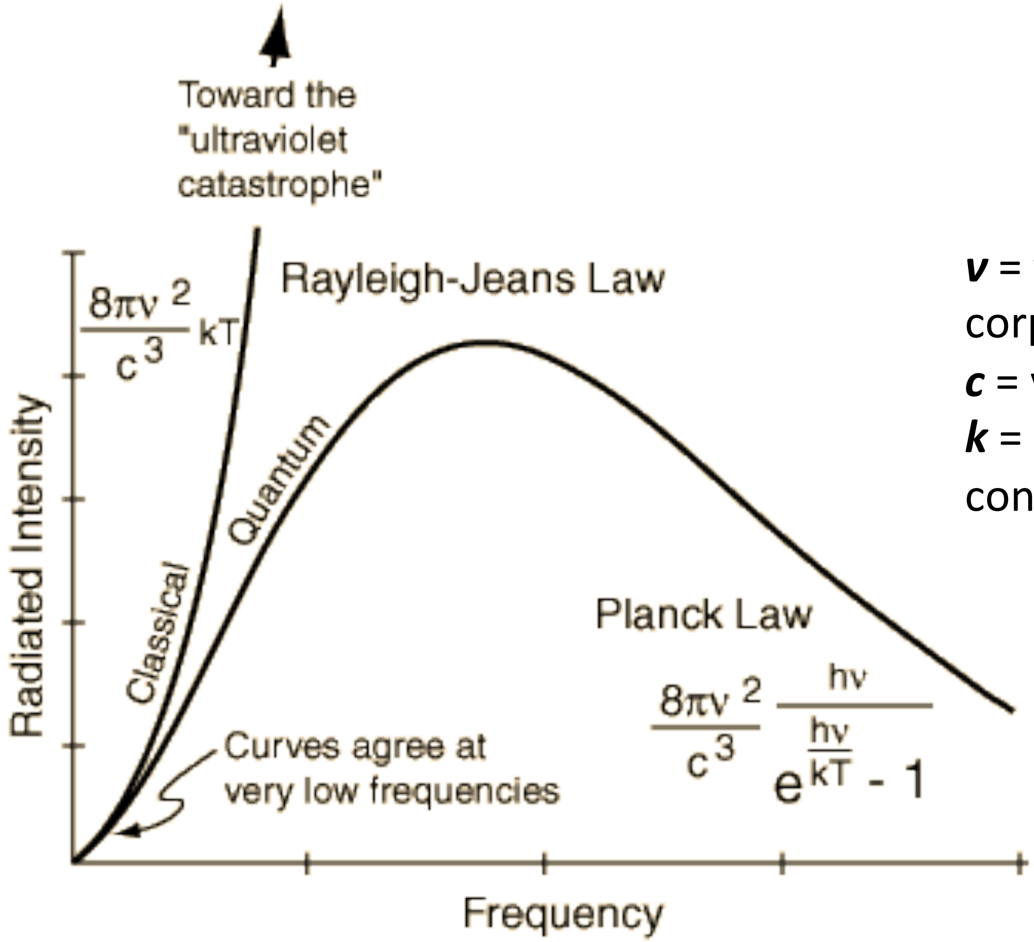
Les ions oscillants ne se comportent pas comme des oscillateurs classiques, et n'émettent pas une énergie variant de façon continue.

**Ils ne peuvent émettre qu'une énergie égale à un multiple entier d'une quantité de base hν** (le ***quantum*** d'énergie).

**E = n.hν** *avec* **n = 1, 2, 3…**

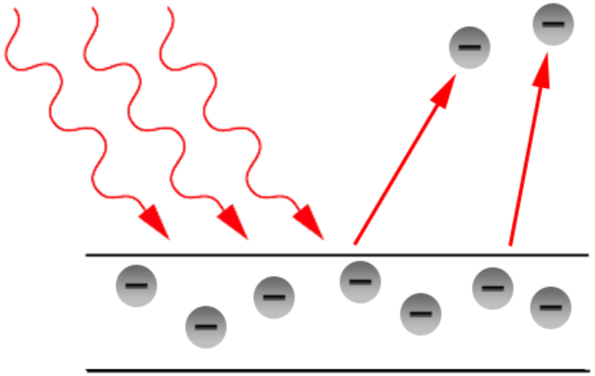
**h = 6,626 $10^{-34}$ J.s**

# Le rayonnement thermique




***ν*** = fréquence du rayonnement du corps noir, en $s^{-1}$
***c*** = vitesse de la lumière dans le vide
***k*** = 1,380 648 8(13) × $10^{-23}$ J $K^{-1}$ : constante de Boltzmann

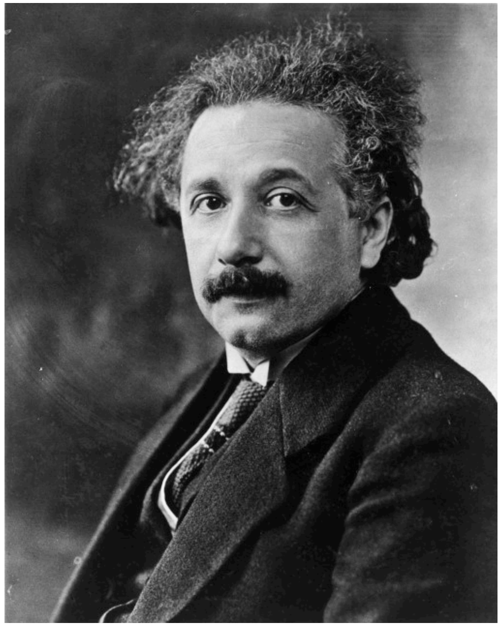
# L'effet photoélectrique



Découvert par **Heinrich Rudolf Hertz** en **1887.** Lois expérimentales énoncées par **Philipp Lenard** en **1899** :

*1 – le nombre d'électrons émis est proportionnel à l'intensité du rayonnement.*
*2 – L'énergie cinétique des électrons émis ne dépend que de la fréquence $\nu$ du rayonnement, pas de son intensité.*
*3 – L'émission d'électrons est instantanée dès que $\nu$ est supérieure à un seuil $\nu_0$ caractéristique du métal irradié*

# L'effet photoélectrique



**Interprétation d'Einstein (1905)**

La lumière est formée de grains de lumière, ***les photons***, transportant chacun un quantum d'énergie hν

L'énergie $W_o = h.\nu_o$ est l'énergie seuil nécessaire pour amener l'électron à la surface du métal. L'excédent est l'énergie cinétique de l'électron :

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2}mv^2$$

# Dualité onde-corpuscule

Les échanges d'énergie entre le rayonnement et la matière correspondent à un nombre entier de photons.

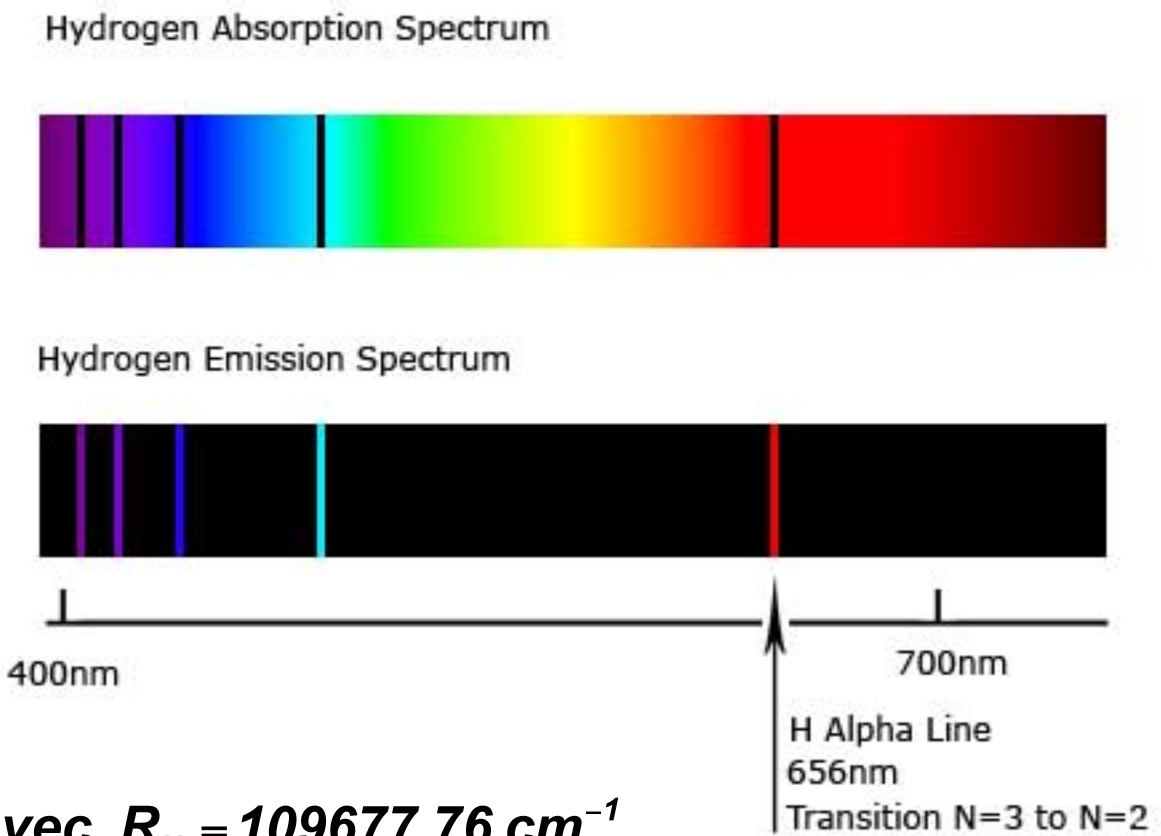
**Chaque photon est porteur d'un quantum d'énergie** :

$$\mathbf{E_{ph} = h.\nu = h.c/\lambda}$$

**Le photon n'est ni une onde, ni une particule**
**Les deux aspects, corpusculaire et ondulatoire, coexistent.**

# Le spectre de raies de l’hydrogène

**Jacob Balmer (1885)**




$$\frac{1}{\lambda_{np}} = R_H.\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right) \quad \text{avec} \quad R_H = 109677{,}76\ cm^{-1}$$

*Constante de Rydberg*

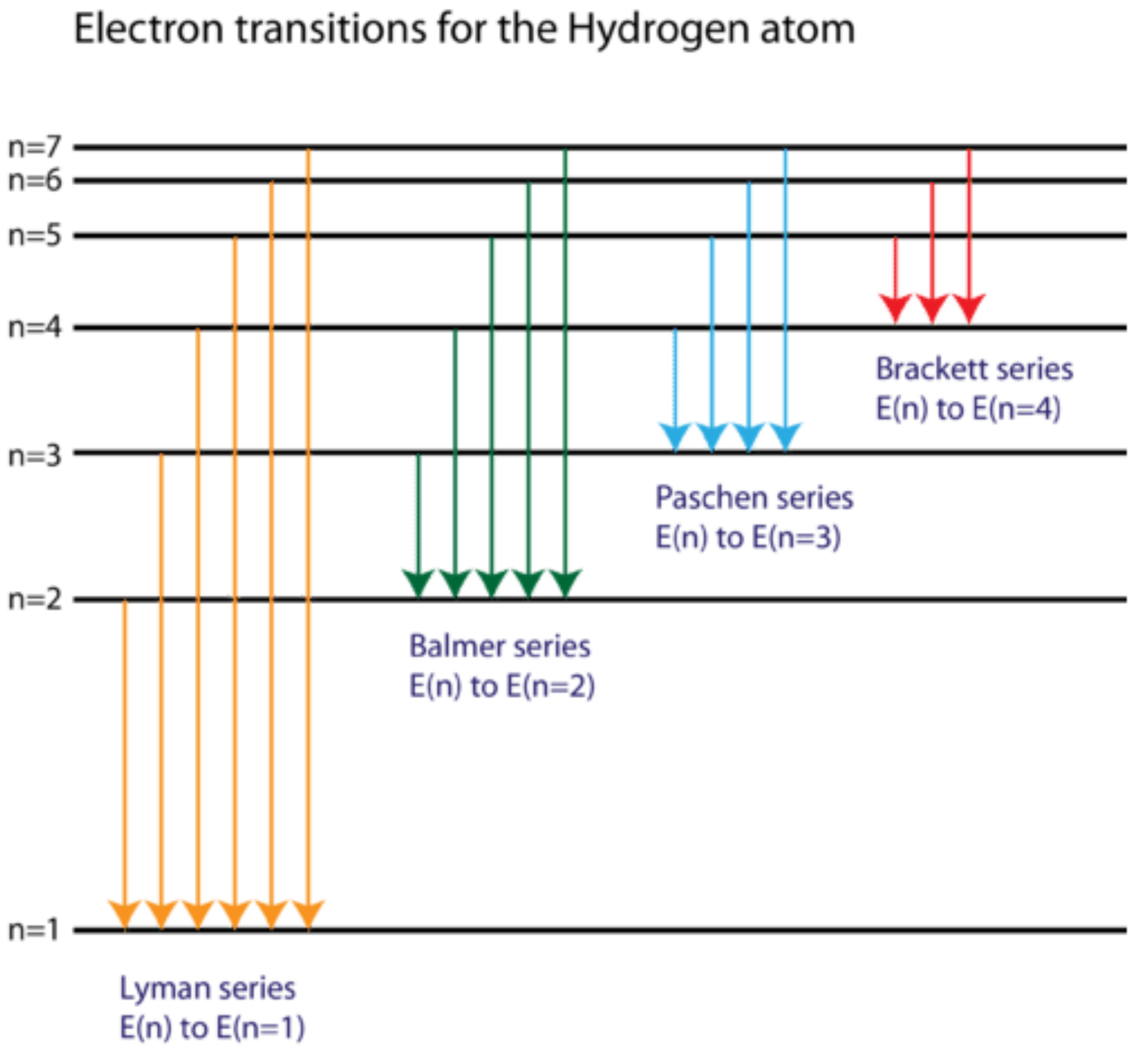
# Le spectre de raies de l'hydrogène

**Séries des raies d'émission**

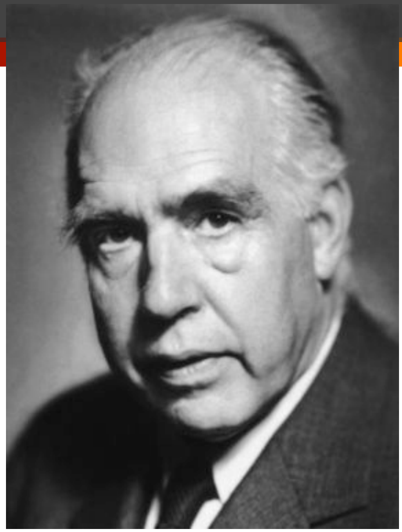
$$\frac{1}{\lambda_{np}} = R_H \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad \text{avec} \quad R_H = 109677{,}76\ cm^{-1}$$

| ***Série*** | ***n*** | ***p*** | ***Région d'émission*** |
|---|---|---|---|
| Lyman (1906) | 1 | 2,3,4… | UV |
| **Balmer (1885)** | **2** | **3,4,5…** | **visible/proche UV** |
| Pashen (1909) | 3 | 4,5,6… | IR |
| Brackett (1922) | 4 | 5,6,7… | IR |
| Pfund (1926) | 5 | 6,7,8… | IR |

# Le spectre de raies de l'hydrogène



# Le modèle de Bohr



Pour concilier le modèle planétaire et le spectre de H, **Niels Bohr** publie en 1915 un article intitulé *de la constitution des atomes et des molécules*, dans lequel il émet 3 postulats :

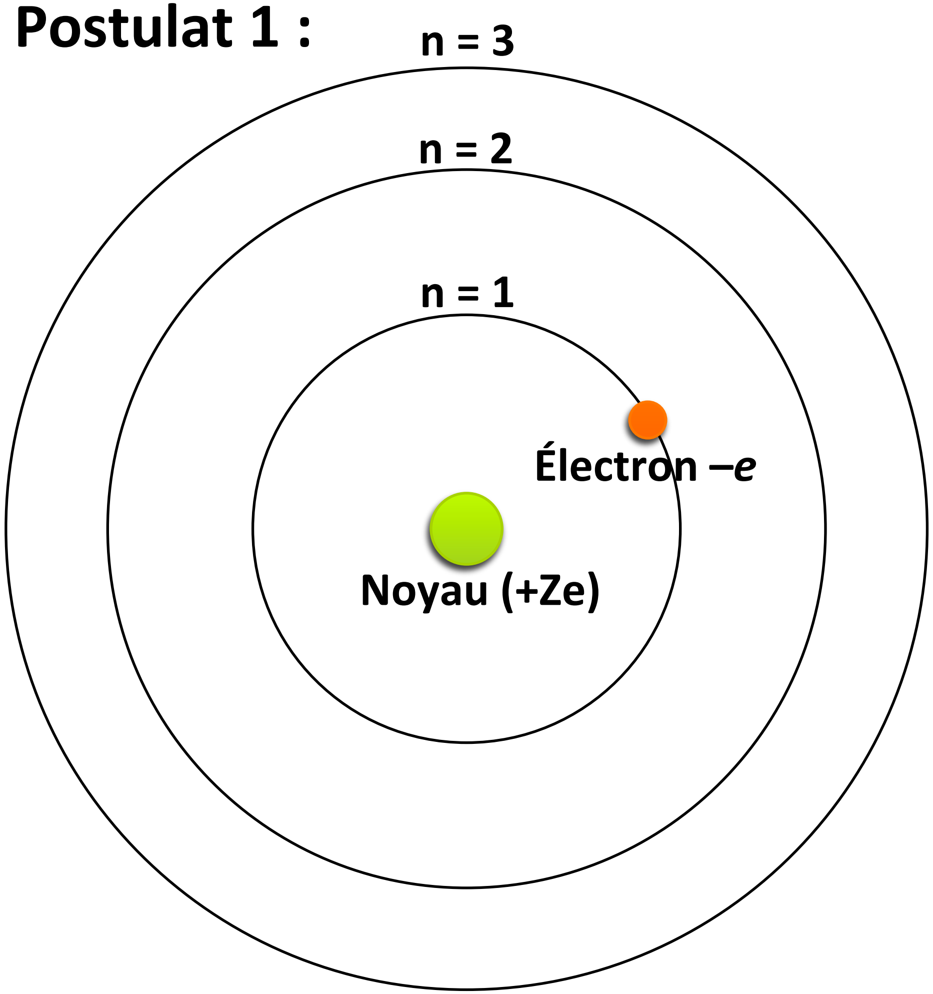
*1. L'électron circule à vitesse et énergie constante sur des orbites circulaires particulières pour lesquelles il y a exacte compensation entre l'attraction coulombienne du noyau et la force centrifuge.*

*2. Ces orbites particulières se limitent à celles pour lesquelles le produit de la quantité de mouvement par la longueur de l'orbite est un multiple entier de la constante de Planck h.*

*3. Le changement d'orbite se produit par absorption ou émission d'un photon. L'énergie du photon absorbé ou émis correspond à la différence d'énergie des deux orbites.*

# Le modèle de Bohr

**Postulat 1 :**




**Postulat 2 :**

**$2\pi r \times mv = nh$ avec $n = 1, 2, 3\ldots$**

**Conséquences :**

*Quantification des rayons orbitaux :*

$$r_n = a_0 . n^2$$

*et des niveaux d'énergies associés:*

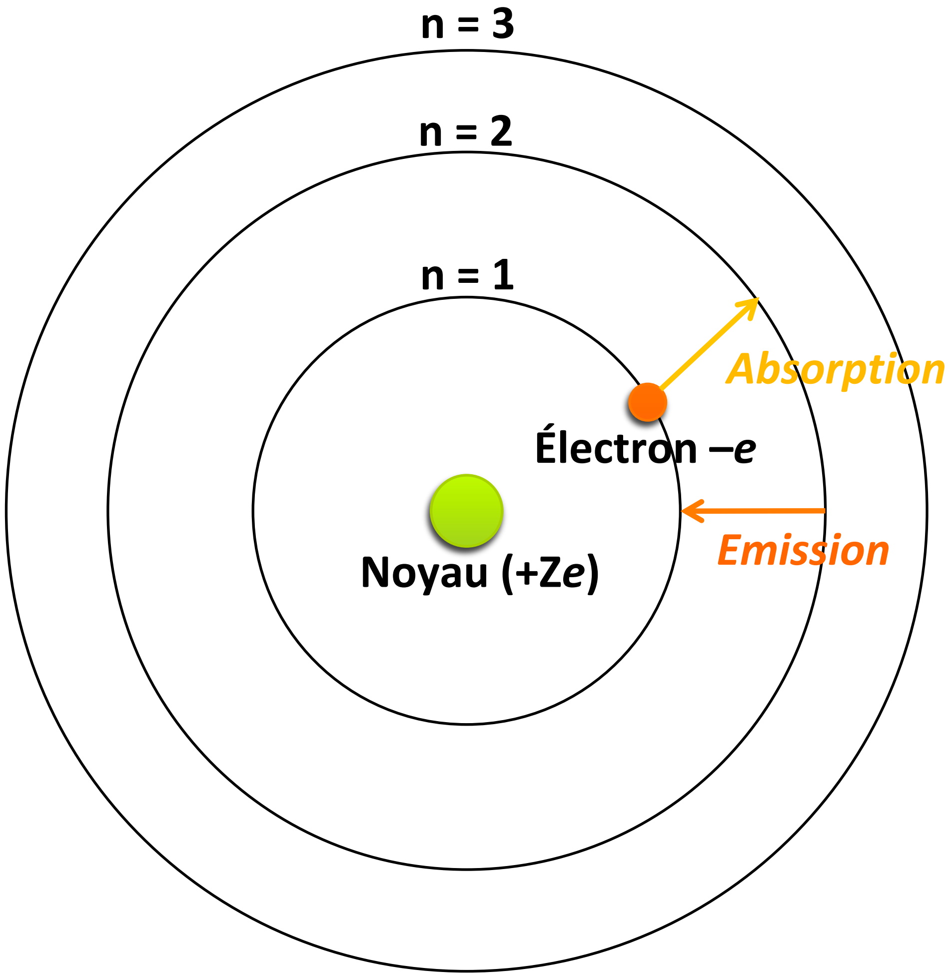
$$E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2} \cdot \frac{Z^2}{2n^2} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

n=1 : niveau fondamental

n>1 : niveaux excités

# Le modèle de Bohr

## Postulat 3 : transitions électroniques




L'absorption ou l'émission de photon correspond à un changement d'orbite de l'électron

L'énergie du photon absorbé (ou émis) est égale à la différence d'énergie entre les deux niveaux :

$$E_{photon} = h\nu = |E_n - E_p|$$

# Le modèle de Bohr permet de retrouver l'expression établie par Balmer

$$E_n = -\frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2}\cdot\frac{Z^2}{2n^2} \qquad E_p = -\frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2}\cdot\frac{Z^2}{2p^2}$$

$$\Delta E_{np} = E_p - E_n = \frac{me^4Z^2}{2(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2}\cdot\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{p^2}\right)$$

$$\Delta E_{np} = \frac{hc}{\lambda_{np}}$$

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = R_H.\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{p^2}\right) \quad \text{avec } R_H = 109677{,}76\ cm^{-1}$$

# Aspect ondulatoire de la matière

En 1905, Einstein écrit que l'énergie d'un photon : $E = h.\nu$.
En relativité restreinte, la relation entre l'énergie $E$, la quantité de mouvement (impulsion) $p$ et la masse $m$ des particules s'écrit : $E^2 = c^2.p^2 + m^2.c^4$. Les photons étant des particules de masse nulle, $E = c.p$.

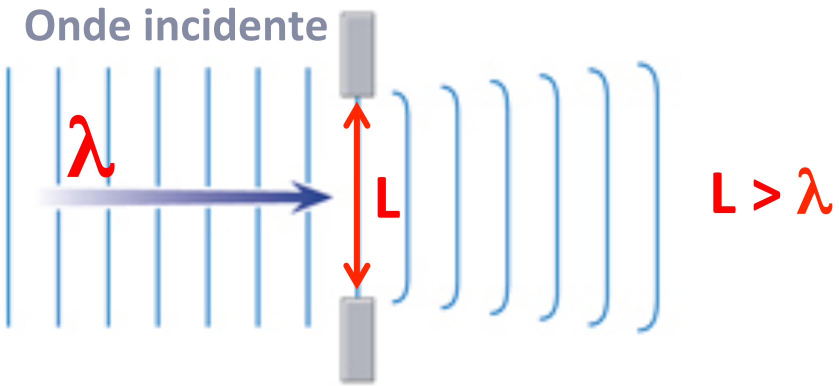
On a donc: $\mathbf{E = h.\nu = h.c/\lambda = c.p}$

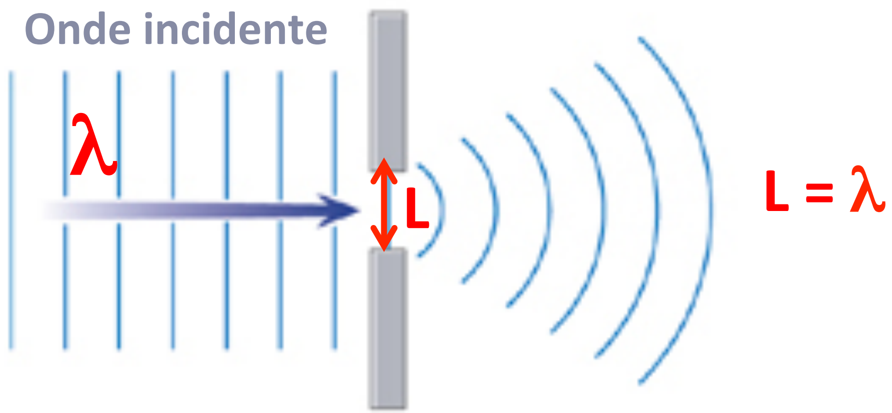
Soit : $\boldsymbol{\lambda = h/p}$

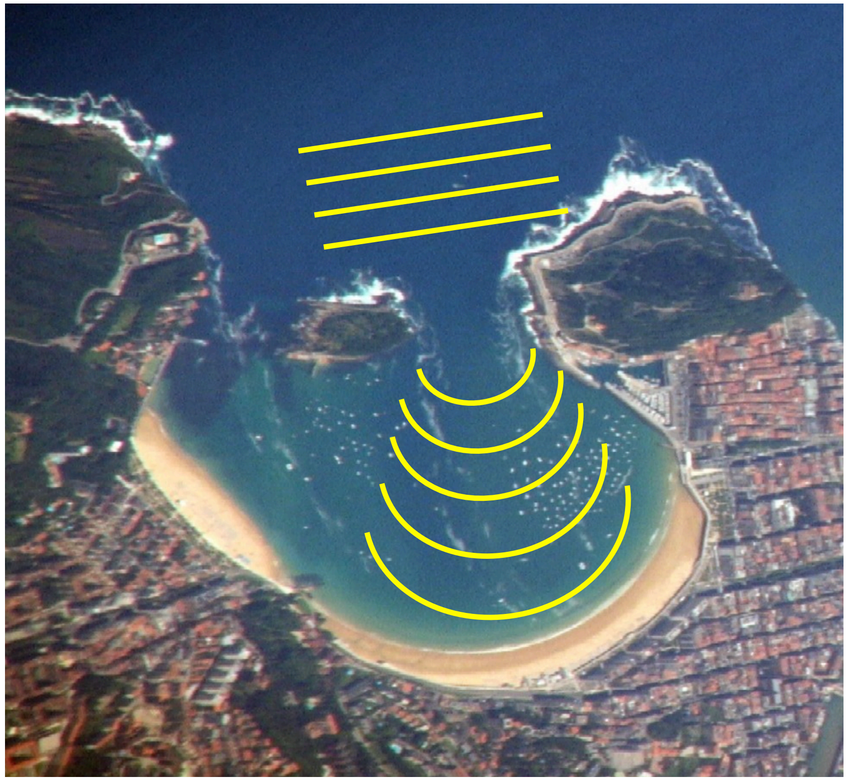
En 1924, **Louis de Broglie** pose une relation analogue **pour toute particule matérielle** :

$$\boldsymbol{\lambda = h/m.v = h/p}$$

# Le phénomène de diffraction



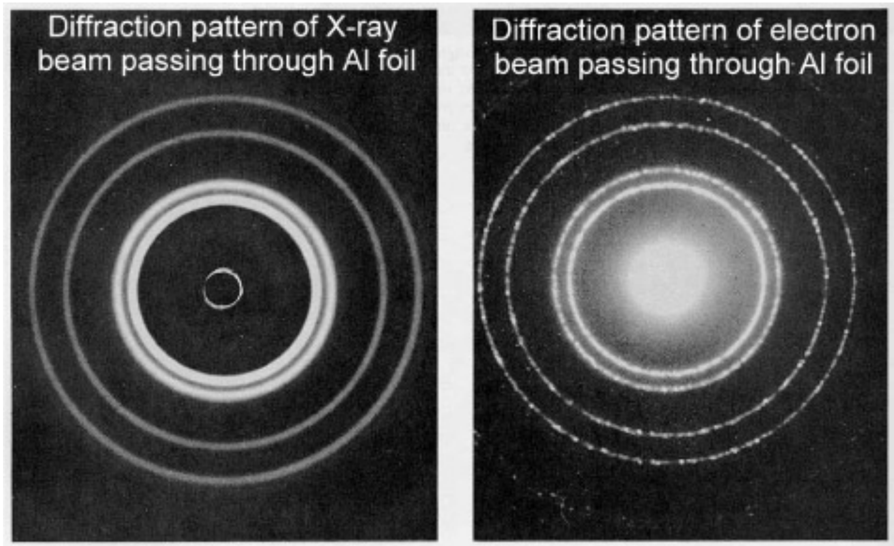



Baie de la Concha, Saint Sébastien

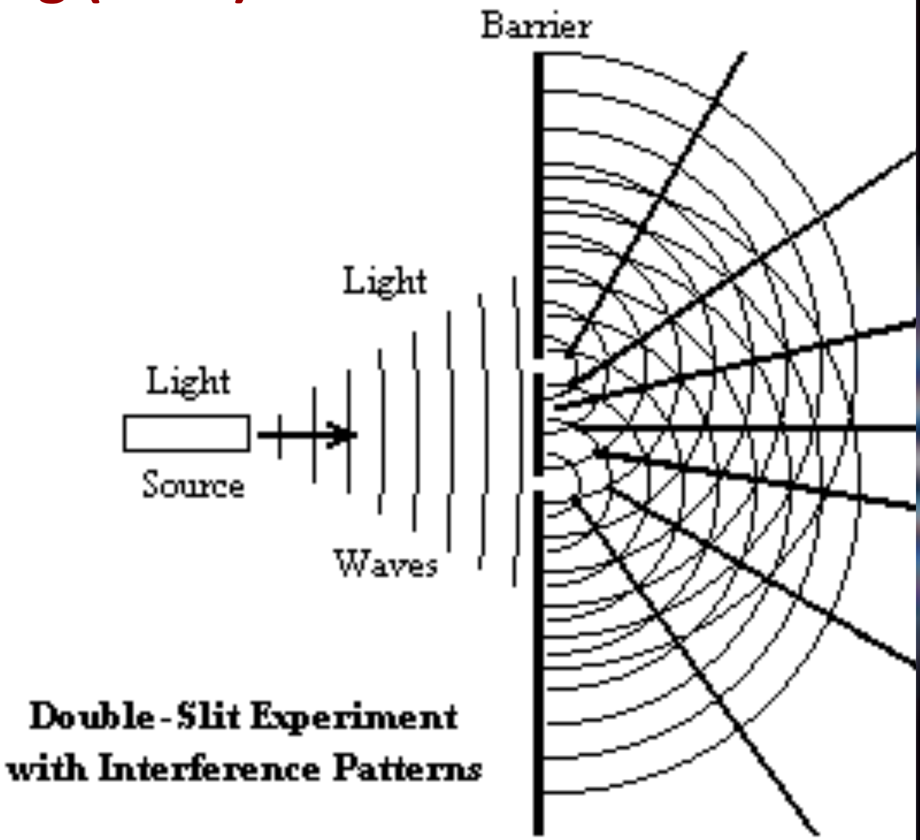
# 1927 : Les expériences de Davison et Germer

En bombardant un cristal de Nickel par un faisceau d'électrons, **Davison et Germer** observent une figure de diffraction typique d'un comportement ondulatoire, et confirment la théorie de de Broglie.



# Le phénomène d'interférences

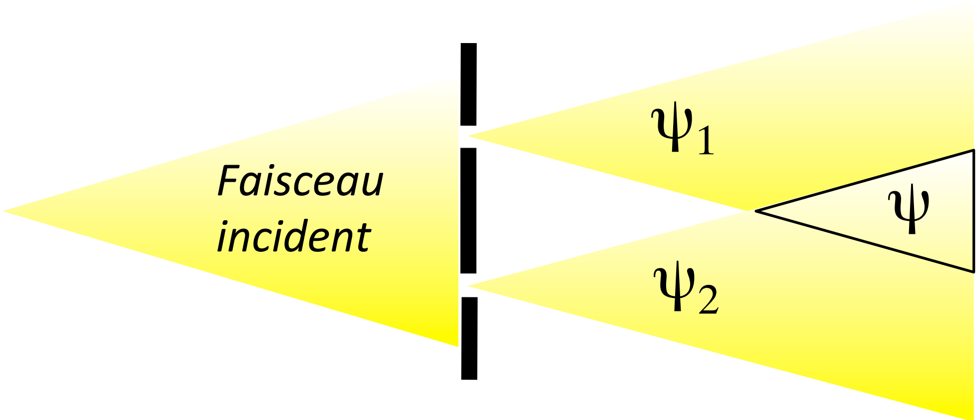
**Expérience de Young (1801)**




# Le phénomène d'interférences

## Interprétation du phénomène

$\Psi(\boldsymbol{r},t) = A.cos(\omega t - \boldsymbol{k}\boldsymbol{r})$




Principe de superposition :

$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$

Intensité :

$I = |\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$

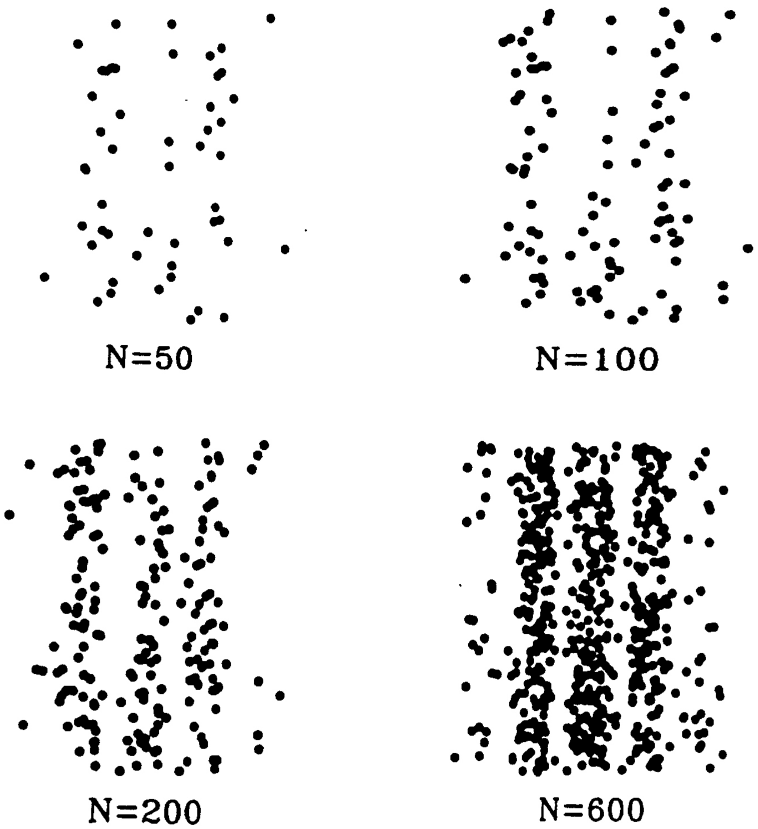
$I = \Psi_1^2 + \Psi_2^2 + \underbrace{2\,\Psi_1\Psi_2}_{\textit{Terme d'interférences}}$

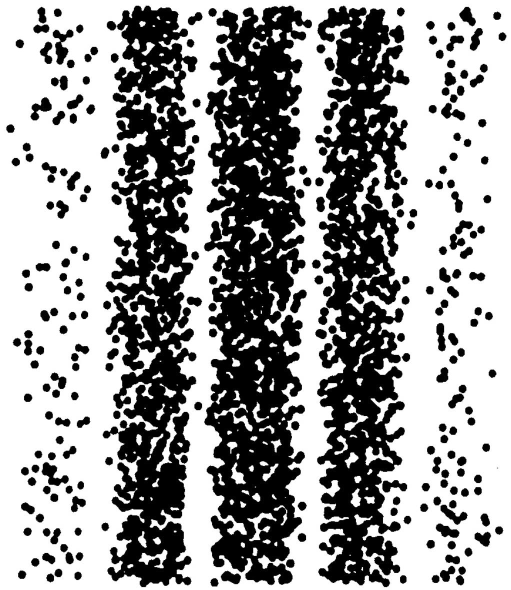
$2\,\Psi_1\Psi_2 > 0$ *interférences* **constructives** : $I > I_1 + I_2$

$2\,\Psi_1\Psi_2 < 0$ *interférences* **destructives** : $I < I_1 + I_2$

# Le phénomène d'interférences

**Que se passe-t-il si l'on remplace la source lumineuse par une source d'électrons ?**

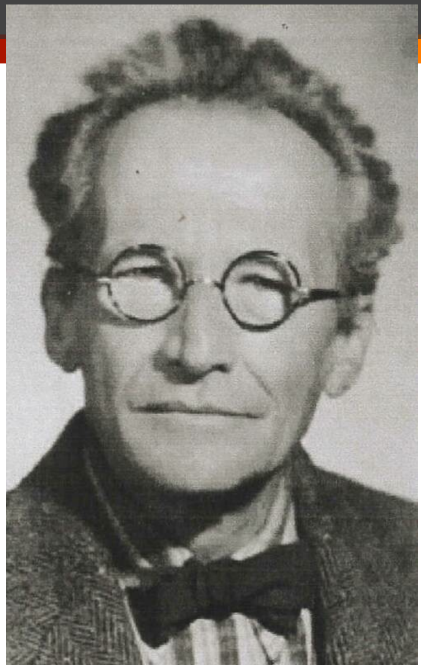


N=4000

**La dualité onde / particule existe aussi pour la matière !**

# L'équation de Schrödinger



En 1925, **Schrödinger** établit l'expression de l'évolution dans le temps d'une particule massive non-relativiste.

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E-V\right)\Psi=0$$

C'est l'équation fondamentale de la mécanique quantique.
Elle permet de déterminer la ***fonction d'onde*** du système étudié.

***La fonction d'onde traduit le comportement ondulatoire de la matière***

# La fonction d'onde

## Analogie avec les ondes lumineuses

**Ondes lumineuses**

*Intensité* :
**$I = |\Psi|^2$**

$\Psi$ = *amplitude du rayonnement électromagnétique*

**Particules**

*Densité de probabilité de présence :*
**$dP/dV = |\Psi|^2$**

$\Psi$ = *amplitude de probabilité de présence de la particule* ***(fonction d'onde)***

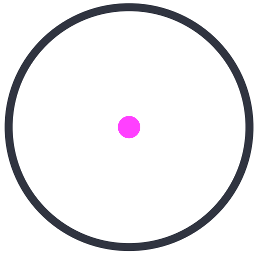
# L'équation de Schrödinger

L'équation de **Schrödinger** n'est soluble de manière exacte que pour les systèmes hydrogénoïdes (1 noyau + 1 électron).

Pour les systèmes polyélectroniques, les solutions ne sont qu'approchées.

***Les solutions de l'équation de Schrödinger pour H (les fonctions d'onde) sont appelées orbitales.***

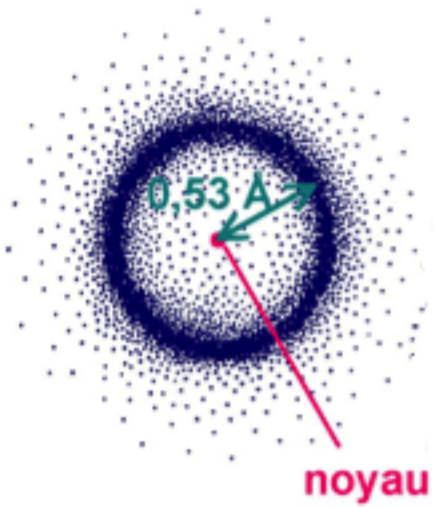
# Le concept d'orbitale



*Modèle planétaire*

***Orbite***

*L'électron se trouve à une distance d du noyau, il ne peut en aucun cas se trouver ailleurs.*




*Modèle quantique*

***Orbitale***

*L'électron a une probabilité donnée de se trouver à une distance d du noyau.*
*L'orbitale définit la région de l'espace dans laquelle cette probabilité est constante.*
*La notion de trajectoire n'est plus définie.*

# Le principe d'indétermination

**Heisenberg**
Il n'est pas possible de prédire la trajectoire d'une particule en mesurant simultanément sa position et sa vitesse à un instant donné.

***Le concept même de trajectoire n'est plus valable à l'échelle des particules élémentaires.***

Soit $\Delta x$ l'indétermination sur la position d'une particule
et $\Delta p$ l'indétermination sur sa quantité de mouvement ($p = mv$):

$$\Delta x . \Delta p > h/2\pi \quad \text{soit} \quad \Delta x . \Delta v > h/2\pi m$$

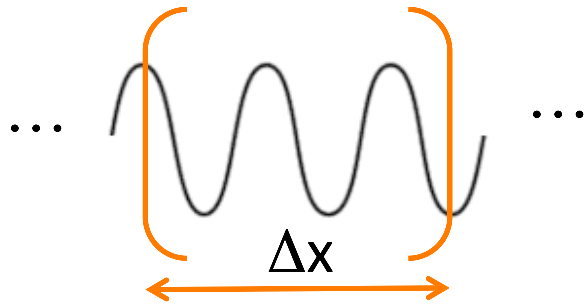
# Le principe d'indétermination

*Une onde de longueur d'onde $\lambda$ possède une extension spatiale infinie.*

**Le principe d'indétermination est lié au fait que la particule est décrite comme une onde *localisée dans l'espace*.**

$\Delta x$ comporte un nombre fini **n** de périodes
que l'on ne peut connaître (au mieux) qu'à 1 unité près : $\Delta n > 1$

Longueur d'onde moyenne : $\lambda = \Delta x/n$
Fréquence moyenne : $\nu = c/\lambda = n.c/\Delta x$




Indétermination sur la fréquence : $\Delta\nu = \Delta n.c/\Delta x > c/\Delta x$
D'où : $\Delta\nu \,.\, \Delta x > c$ **(1)**

D'après la relation de de Broglie : $p = h/\lambda = h\nu/c$
Indétermination sur la quantité de mouvement : $\Delta p = h\Delta\nu/c$
D'où : $\Delta\nu = c.\Delta p/h$ **(2)**

D'après (1) et (2) **:** $\Delta p.\ \Delta x > h$