

S10 : Introduction à la mécanique quantique

Table des matières

1	La dualité onde-particule de la lumière	2
1.1	Introduction	2
1.2	Historique de la découverte du photon	2
1.2.1	Le rayonnement thermique	2
1.2.2	L'effet photoélectrique	2
1.3	Le photon	3
1.3.1	Définition	3
1.3.2	Ordres de grandeur de l'énergie d'un photon	4
1.3.3	Nombre de photons	4
1.4	Franges d'interférences et photons	4
2	La dualité onde-particule de la matière	5
2.1	La longueur d'onde de de Broglie	5
2.1.1	L'onde de matière	5
2.1.2	Première vérification expérimentale	5
2.1.3	Applications actuelles	7
2.2	Expériences d'interférences de particules	8
2.2.1	Interférences d'électrons	8
3	Fonction d'onde et probabilités	9
3.1	Analyse d'une expérience d'interférences quantiques	9
3.2	Notion de fonction d'onde	10
3.3	Principe de superposition	10
4	L'inégalité de Heisenberg	11
4.1	Indétermination quantique	11
4.2	Diffraction d'une particule par une fente	12
4.3	Principe d'indétermination de Heisenberg	13
5	Quantification de l'énergie	14
5.1	Origine de la quantification	14
5.2	Spectres atomiques	14
5.3	Le modèle de Bohr	14
5.3.1	Hypothèses de Bohr et quantification du moment cinétique et du rayon de la trajectoire	14
5.3.2	Quantification de l'énergie mécanique de l'électron	16
5.4	Formule de Rydberg	18
5.5	Particule dans un puits infini à une dimension	18
5.5.1	Puits infini à une dimension	18
5.5.2	Longueurs d'onde autorisées	19
5.5.3	Quantification de l'énergie	19

La mécanique quantique s'est construite au cours de la première moitié du XX^e siècle grâce aux travaux de nombreux physiciens, parmi lesquels N. Bohr, L. de Broglie, P. Dirac, A. Einstein, W.K. Heisenberg, M. Planck et E. Schrödinger.

Elle est indispensable pour décrire les phénomènes à l'échelle atomique et subatomique. Ses prédictions ont été confirmées avec une précision remarquable et sont à l'origine de nombreuses applications technologiques : laser, microprocesseur, horloge atomique, imagerie par résonance magnétique nucléaire, etc.

Les phénomènes quantiques sont souvent déroutants car ils ne correspondent pas à notre intuition issue du monde macroscopique. Les notions centrales sont la dualité onde-particule, l'onde de matière, l'indétermination de Heisenberg et la quantification de l'énergie.

1 La dualité onde-particule de la lumière

1.1 Introduction

Les chapitres précédents ont mis en évidence la nature ondulatoire de la lumière à travers les phénomènes d'interférences et de diffraction, étudiés dès le XIX^e siècle.

Cependant, certains phénomènes découverts au XX^e siècle ne peuvent être interprétés qu'en supposant que la lumière est constituée de particules appelées **photons**. La lumière possède donc aussi un aspect corpusculaire.

Ce double comportement porte le nom de **dualité onde-particule**. Il échappe au cadre de la mécanique classique mais trouve une interprétation naturelle en mécanique quantique.

1.2 Historique de la découverte du photon

1.2.1 Le rayonnement thermique

En 1900, pour expliquer l'émission thermique d'un corps chauffé, essentiellement dans le domaine infrarouge, Max Planck proposa que les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement ne se font pas de manière continue, mais par paquets élémentaires appelés **quanta d'énergie**.

L'énergie échangée est alors :

$$E = h\nu$$

où ν est la fréquence du rayonnement et h la constante de Planck. Sa valeur admise est :

$$h = 6,626\,069\,57 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

1.2.2 L'effet photoélectrique

L'**effet photoélectrique** correspond à l'émission d'électrons par un métal éclairé par un rayonnement visible ou ultraviolet.

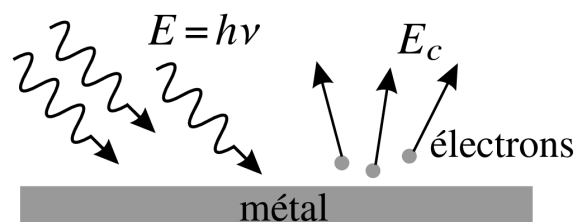


Figure 1 – Effet photoélectrique.

Le phénomène n'apparaît que si la fréquence du rayonnement est supérieure à une fréquence seuil ν_S , qui dépend du métal. Si $\nu < \nu_S$, aucun électron n'est arraché, même avec un faisceau très intense.

En 1905, Einstein reprit l'idée de Planck et supposa que le rayonnement est constitué de quanta de lumière, les photons, chacun portant l'énergie :

$$E = h\nu$$

Un électron du métal peut absorber un seul photon. Il est extrait si l'énergie du photon dépasse le travail d'extraction W du métal :

$$E > W$$

La condition d'apparition de l'effet photoélectrique devient donc :

$$\nu > \nu_S = \frac{W}{h}$$

L'énergie cinétique maximale des électrons émis est alors telle :

$$E_{c,\max} = E - W = h(\nu - \nu_S)$$

Les expériences de Millikan, réalisées entre 1905 et 1915, confirmèrent cette relation et donnèrent une valeur de la constante de Planck compatible avec celle obtenue par l'étude du rayonnement thermique. Einstein reçut le prix Nobel de physique en 1921 pour son interprétation de l'effet photoélectrique.

1.3 Le photon

1.3.1 Définition

La particule associée à la lumière est appelée **photon**.

Photon

Le photon est une particule de masse nulle qui se déplace dans le vide à la vitesse de la lumière :

$$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

Un photon associé à une onde lumineuse de fréquence ν et de longueur d'onde $\lambda = \frac{c}{\nu}$ possède l'énergie :

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

et la quantité de mouvement :

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

où $\vec{u}$ est le vecteur unitaire donnant la direction de propagation.

1.3.2 Ordres de grandeur de l'énergie d'un photon

La notion de photon s'étend à tous les rayonnements électromagnétiques. L'aspect corpusculaire est d'autant plus marqué que l'énergie du photon est grande. Il est donc important pour les rayonnements γ et X, mais presque imperceptible pour les ondes hertziennes.

Inversement, l'aspect ondulatoire domine lorsque la longueur d'onde est grande.

Rayonnement	λ en m	ν en Hz	E en eV
Rayons gamma	$< 2 \times 10^{-11}$	$> 1,5 \times 10^{19}$	> 60000
Rayons X	2×10^{-11} à 10^{-8}	3×10^{16} à $1,5 \times 10^{19}$	125 à 60000
Ultraviolets	10^{-8} à 4×10^{-7}	$7,5 \times 10^{14}$ à 3×10^{16}	3 à 125
Visible	4×10^{-7} à $7,5 \times 10^{-7}$	4×10^{14} à $7,5 \times 10^{14}$	1,5 à 3
Infrarouges	$7,5 \times 10^{-7}$ à 3×10^{-4}	10^{12} à 4×10^{14}	4×10^{-3} à 1,5
Ondes hertziennes	$> 3 \times 10^{-4}$	$< 10^{12}$	$< 4 \times 10^{-3}$

1.3.3 Nombre de photons

Dans les expériences usuelles d'optique, l'aspect granulaire de la lumière n'apparaît pas car un très grand nombre de photons intervient chaque seconde.

Considérons par exemple un laser hélium-néon de longueur d'onde $\lambda = 633$ nm et de puissance $P = 1,0$ mW. Pendant $\Delta t = 1$ s, l'énergie délivrée vaut :

$$E_{\text{laser}} = P\Delta t = 1,0 \times 10^{-3} \text{ J}$$

L'énergie d'un photon est :

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6,63 \times 10^{-34} \times 3,0 \times 10^8}{633 \times 10^{-9}} = 3,1 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Le nombre de photons émis est donc :

$$N = \frac{E_{\text{laser}}}{E} \simeq 3,2 \times 10^{15}$$

Ce nombre est très grand, même s'il reste bien inférieur au nombre d'Avogadro.

1.4 Franges d'interférences et photons

On peut réaliser une expérience de fentes d'Young ¹ avec une source très atténuée, envoyant les photons un à un. Les impacts sont enregistrés avec un capteur CCD très sensible.

On observe alors :

- chaque photon produit un point lumineux localisé sur l'écran, mais en une position aléatoire ;
- lorsque le nombre de photons augmente, les impacts dessinent progressivement les franges d'interférences prévues par l'optique ondulatoire.

La probabilité de recevoir un photon en un point est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde lumineuse en ce point.

1. <https://www.youtube.com/watch?v=PaTgZrc5iYk>

Dualité onde-particule de la lumière

La lumière possède un double aspect ondulatoire et corpusculaire. Les photons sont détectés en des points aléatoires, mais la probabilité de détection en un point est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde lumineuse en ce point.

2 La dualité onde-particule de la matière

2.1 La longueur d'onde de de Broglie

2.1.1 L'onde de matière

Longueur d'onde de De Broglie

La lumière possède un double comportement ondulatoire et corpusculaire. Louis de Broglie proposa en 1923 que les particules matérielles, comme les électrons, les protons ou les neutrons, puissent elles aussi présenter un comportement ondulatoire.

Il associa à toute particule une **onde de matière** dont la longueur d'onde vaut :

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

où p est la quantité de mouvement de la particule. Cette relation fondamentale est appelée **relation de de Broglie**.

Remarque

Une relation identique a déjà été obtenue pour le photon.

Dans le cadre classique, si $v \ll c$, on peut écrire $p = mv$, donc :

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

Si la vitesse n'est pas très petite devant c , il faut utiliser l'expression relativiste de la quantité de mouvement. En pratique, la formule classique est acceptable lorsque :

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

2.1.2 Première vérification expérimentale

En 1927, Davisson et Germer vérifièrent expérimentalement l'idée de de Broglie en observant la diffraction d'un faisceau d'électrons par un monocristal de nickel. La diffraction étant un phénomène caractéristique des ondes, cette expérience montra que les électrons possèdent bien un comportement ondulatoire.

Les solides cristallins présentent un arrangement périodique à l'échelle atomique, avec des périodes de l'ordre de 10^{-10} m. Ils peuvent donc diffracter des ondes dont la longueur d'onde est du même ordre.

De la même manière, la diffraction d'un faisceau d'électrons par un cristal de nickel permit de vérifier quantitativement la relation de de Broglie.

Longueur d'onde de de Broglie dans l'expérience de Davisson et Germer

Les électrons sont accélérés sous une tension de 54 V. Leur énergie cinétique vaut :

$$E_c = 54 \text{ eV} = 8,6 \times 10^{-18} \text{ J}$$

En supposant la mécanique classique valable :

$$v = \sqrt{\frac{2E_c}{m_e}} = \sqrt{\frac{2 \times 8,6 \times 10^{-18}}{9,11 \times 10^{-31}}} = 4,35 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

Cette vitesse est inférieure à $\frac{c}{10}$, donc l'approximation classique est acceptable.
On obtient alors :

$$\lambda_{\text{DB}} = \frac{h}{m_e v} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{9,11 \times 10^{-31} \times 4,35 \times 10^6} = 1,68 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Cette valeur est bien de l'ordre de 0,1 nm.

En 1927 également, le physicien britannique **George Paget Thomson** apporte une nouvelle preuve expérimentale de l'hypothèse de de Broglie selon laquelle toute particule matérielle est associée à une onde.

Dans son expérience, un faisceau d'électrons accélérés sous une différence de potentiel de quelques dizaines de kilovolts traverse une très fine feuille métallique (or, aluminium ou celluloid recouvert de métal). Les électrons sont alors diffractés par les plans atomiques du matériau (figure 2).

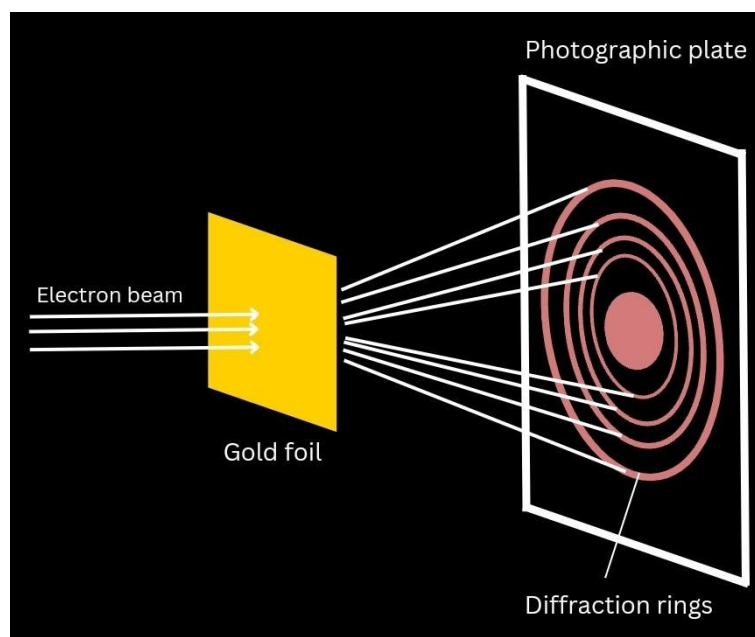


Figure 2 – Schéma de l'expérience de diffraction des électrons par une feuille d'Or

L'écran placé derrière la feuille ne présente pas une simple tache d'impact mais une série d'**anneaux concentriques de diffraction**, analogue aux figures obtenues avec des rayons X.

Cette observation met en évidence le caractère ondulatoire des électrons (figure 3).

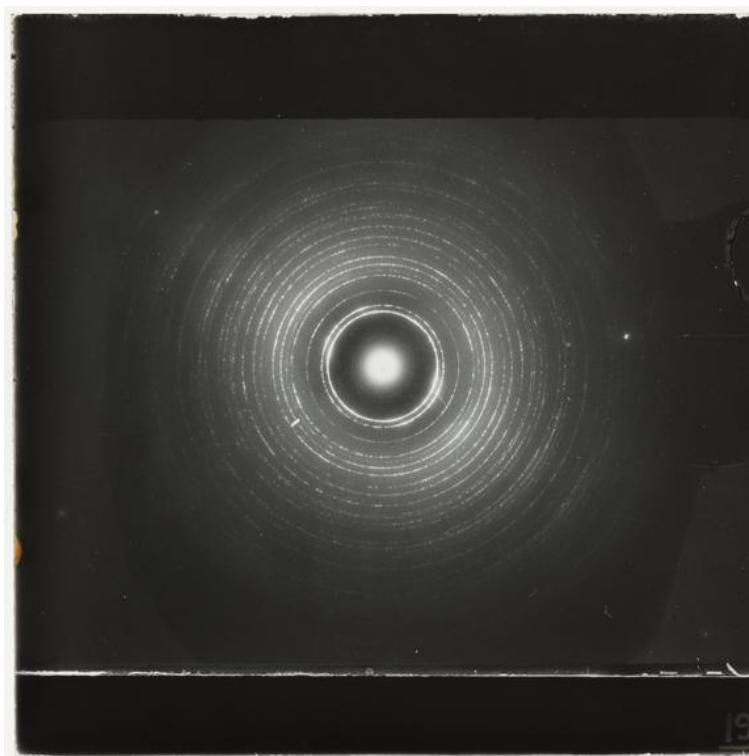


Figure 3 – Figure de diffraction de l'expérience de diffraction des électrons par une feuille d'Or

Les rayons des anneaux permettent de mesurer la longueur d'onde associée aux électrons. Les résultats expérimentaux sont en excellent accord avec la relation proposée par de Broglie :

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

où h est la constante de Planck et p la quantité de mouvement de l'électron.

Cette expérience, réalisée la même année que celle de Davisson et Germer sur un cristal de nickel, constitue l'une des premières confirmations expérimentales de la dualité onde-corpuscule de la matière.

Caractère ondulatoire des électrons

Les électrons produisent une figure de diffraction caractéristique des ondes, ces particules possèdent donc un comportement ondulatoire.

2.1.3 Applications actuelles

Microscopie électronique :

La résolution d'un microscope est limitée par la longueur d'onde utilisée. La lumière visible possède des longueurs d'onde comprises entre environ 400 nm et 800 nm. Il est donc difficile d'observer des détails beaucoup plus petits.

Les électrons accélérés possèdent au contraire des longueurs d'onde de de Broglie extrêmement faibles. Par exemple, des électrons d'énergie cinétique voisine de 100 eV possèdent une longueur d'onde de l'ordre de 0,1 nm et des électrons accélérés sous plusieurs dizaines de

kilovolts peuvent atteindre des longueurs d'onde de **quelques picomètres**.

Les microscopes électroniques utilisent cette propriété pour observer la matière à l'échelle atomique.

Diffraction des neutrons :

Les neutrons thermiques possèdent également des longueurs d'onde de de Broglie comparables aux dimensions atomiques. Ils constituent ainsi des sondes particulièrement adaptées à l'étude de la structure de la matière condensée.

Ordre de grandeur pour un neutron thermique

À température ambiante ($T \simeq 300 \text{ K}$), l'énergie cinétique moyenne d'un neutron est :

$$E_c = \frac{3}{2} k_B T$$

où :

$$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

et

$$m_n = 1,675 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

désigne la masse du neutron.

La vitesse quadratique moyenne vaut alors :

$$v = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_n}} = 2,7 \times 10^3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

La relation de de Broglie conduit à :

$$\lambda_{\text{DB}} = \frac{h}{m_n v} \simeq 1,5 \times 10^{-10} \text{ m}$$

soit une valeur du même ordre de grandeur que la taille d'un atome.

2.2 Expériences d'interférences de particules

2.2.1 Interférences d'électrons

La théorie de de Broglie reçoit une confirmation spectaculaire grâce aux expériences d'interférences réalisées avec des électrons. En 1989, Akira Tonomura et ses collaborateurs réalisèrent une expérience analogue à celle des fentes d'Young mais avec des électrons². Les électrons traversent un dispositif comportant deux ouvertures puis viennent frapper un écran détecteur. Chaque électron est détecté individuellement sous la forme d'un point lumineux. Le flux d'électrons est suffisamment faible pour qu'un seul électron soit présent à la fois dans l'appareil.

2. <https://www.youtube.com/watch?v=41cYC2tsDDE>

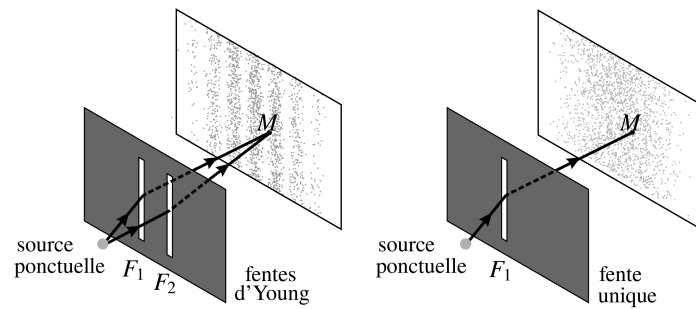


Figure 4 – Construction progressive d'une figure d'interférences d'électrons.

Les observations conduisent aux conclusions suivantes :

- chaque électron est détecté en un point aléatoire de l'écran ;
- lorsque le nombre d'électrons détectés augmente, les impacts dessinent progressivement une figure d'interférences ;
- cette figure est analogue à celle obtenue avec une onde lumineuse.

Ces résultats montrent qu'un électron possède simultanément des propriétés corpusculaires et ondulatoires.

Interférences d'électrons

Même lorsqu'ils traversent l'expérience un par un, les électrons produisent à long terme une figure d'interférences.

Ils possèdent donc un comportement ondulatoire.

3 Fonction d'onde et probabilités

3.1 Analyse d'une expérience d'interférences quantiques

Considérons une expérience de fentes d'Young réalisée avec des particules (électrons, neutrons, atomes...) représentée sur la figure 4.

On note $p(M)$ la probabilité de détecter une particule au point M de l'écran.

Pour comprendre l'origine des interférences, on peut comparer trois situations :

- seule la fente F_1 est ouverte ;
- seule la fente F_2 est ouverte ;
- les deux fentes sont ouvertes simultanément.

On note respectivement :

$$p_1(M) \quad \text{et} \quad p_2(M)$$

les probabilités de détection lorsque seule l'une des deux fentes est ouverte.

Une idée naturelle serait d'écrire $p(M) = p_1(M) + p_2(M)$ mais les expériences montrent que cette relation est fausse.

Résultat expérimental

Dans une expérience d'interférences quantiques :

$$p(M) \neq p_1(M) + p_2(M)$$

La probabilité de détection n'obéit donc pas à la règle classique d'addition.

On observe même des positions où $p(M) = 0$ alors que $p_1(M) \neq 0$ et $p_2(M) \neq 0$.
Ces résultats sont impossibles à interpréter dans le cadre de la mécanique classique.

3.2 Notion de fonction d'onde

La grandeur fondamentale qui se superpose lorsqu'on ouvre simultanément les deux fentes n'est pas la probabilité mais la fonction d'onde. On associe à chaque particule une fonction $\psi(M, t)$ dépendant de la position et du temps. Cette fonction prend en général des valeurs complexes.

Fonction d'onde

À une particule quantique est associée une fonction d'onde $\psi(M, t)$ qui décrit complètement son état physique. La probabilité de détecter la particule en M à l'instant t est proportionnelle au carré du module de cette fonction :

$$p(M, t) \propto |\psi(M, t)|^2$$

Cette interprétation probabiliste fut proposée par Max Born en 1926.

3.3 Principe de superposition

Soient $\psi_1(M, t)$ la fonction d'onde associée au passage par la fente F_1 , et $\psi_2(M, t)$ celle associée au passage par la fente F_2 .
Lorsque les deux fentes sont ouvertes simultanément, la fonction d'onde totale est :

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

La probabilité de détection est alors :

$$p(M, t) \propto |\psi_1 + \psi_2|^2$$

Or :

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1\psi_2^* + \psi_1^*\psi_2$$

Les deux derniers termes constituent les **termes d'interférences**. Ils expliquent pourquoi :

$$p(M) \neq p_1(M) + p_2(M)$$

et permettent l'apparition des franges observées expérimentalement (figure 5)

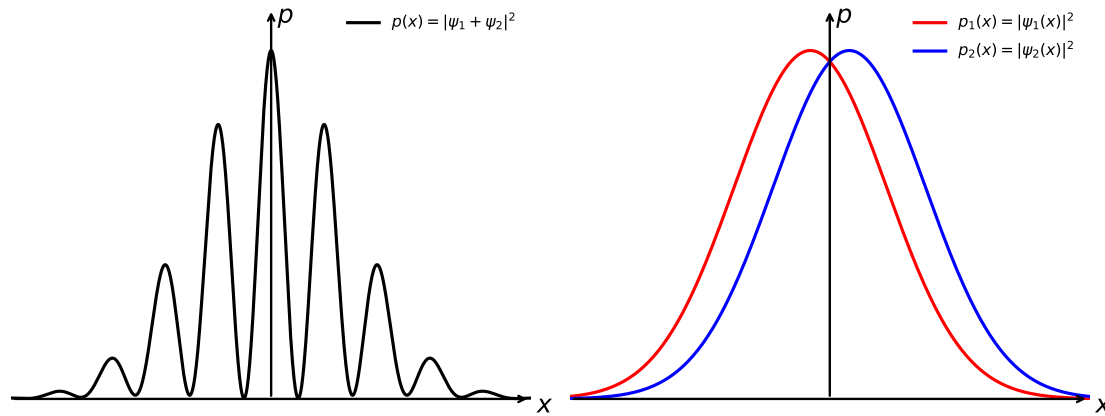


Figure 5 – Figure d'interférences d'électrons.

Origine des interférences quantiques

Les interférences résultent de la superposition des fonctions d'onde.

La probabilité de détection est liée au carré du module de la fonction d'onde et non à la somme des probabilités individuelles.

4 L'inégalité de Heisenberg

4.1 Indétermination quantique

Les expériences d'interférences montrent qu'une particule quantique n'est pas détectée toujours au même endroit. Même lorsque toutes les particules sont préparées dans les mêmes conditions, les résultats des mesures présentent une dispersion intrinsèque. Cette dispersion n'est pas due à un défaut expérimental mais constitue une propriété fondamentale des systèmes quantiques.

Indétermination quantique

La mesure d'une grandeur physique sur un système quantique donne en général un résultat aléatoire. La dispersion des résultats possibles est appelée **indétermination quantique**.

Pour une grandeur physique X , on définit la valeur moyenne :

$$\langle X \rangle$$

et l'écart quadratique moyen :

$$\Delta X = \sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle}$$

On montre que cette expression peut également s'écrire :

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

La quantité ΔX mesure l'étalement des résultats possibles lors d'une mesure de X .

Attention

L'indétermination quantique ne doit pas être confondue avec l'incertitude de mesure. L'incertitude de mesure dépend de l'appareil utilisé tandis que l'indétermination quantique est une propriété intrinsèque du système étudié.

La notation ΔX utilisée en mécanique quantique ne désigne pas une incertitude de mesure. Il s'agit de l'écart-type de la distribution des résultats obtenus lors de la mesure de la grandeur X sur un grand nombre de systèmes identiquement préparés.

4.2 Diffraction d'une particule par une fente

Considérons une particule de quantité de mouvement :

$$\vec{p} = p \vec{u}_z$$

arrivant perpendiculairement sur une fente de largeur a .

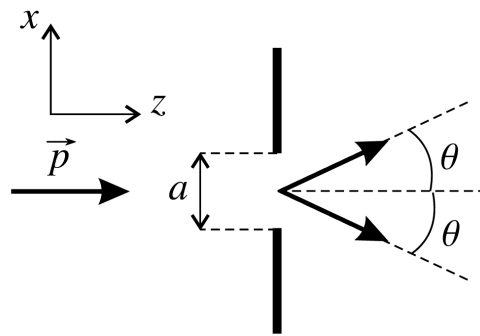


Figure 6 – Diffraction d'une particule par une fente.

La particule possède une longueur d'onde de de Broglie :

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

Comme toute onde, elle est diffractée par la fente. Le demi-angle d'ouverture du faisceau diffracté vérifie :

$$\sin \theta = \frac{\lambda_{\text{DB}}}{a}$$

Lorsque la largeur de la fente diminue, l'ouverture angulaire augmente. Ainsi, plus la position de la particule est connue précisément, plus sa direction de propagation devient incertaine.

Supposons que l'on mesure la position de la particule immédiatement après son passage dans la fente. La particule est alors localisée dans une zone de largeur voisine de a :

$$\Delta x \sim a$$

Après la diffraction, les directions possibles du mouvement sont comprises entre $-\theta$ et $+\theta$. La composante transverse de la quantité de mouvement vérifie alors :

$$\Delta p_x \sim p \sin \theta$$

En utilisant la relation de diffraction :

$$\sin \theta = \frac{\lambda_{\text{DB}}}{a}$$

et :

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

on obtient :

$$\Delta p_x \sim p \frac{\lambda_{\text{DB}}}{a} = \frac{h}{a}$$

Comme $\Delta x \sim a$, il vient :

$$\Delta x \Delta p_x \sim h$$

Cette relation constitue une première approche du principe d'indétermination.

4.3 Principe d'indétermination de Heisenberg

L'analyse précédente conduit à l'un des résultats fondamentaux de la mécanique quantique.

Principe d'indétermination de Heisenberg

Les mesures de la position x et de la quantité de mouvement p_x selon un même axe ne peuvent pas être simultanément connues avec une précision arbitraire. Le produit des indéterminations vérifie :

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar$$

avec :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

la constante de Planck réduite.

Cette inégalité traduit une limite fondamentale de la nature et non une imperfection des instruments de mesure.

Si la position est connue avec une très grande précision, alors la quantité de mouvement est nécessairement mal déterminée.

Inversement, une particule dont la vitesse est très bien connue possède une position fortement indéterminée.

Conséquence importante

À l'échelle microscopique, la notion classique de trajectoire perd son sens.

Il n'est plus possible de connaître simultanément la position et la vitesse exactes d'une particule.

Échelle macroscopique

Pour les objets du quotidien, la constante de Planck est extrêmement petite. L'inégalité de Heisenberg devient alors totalement négligeable et la mécanique classique fournit une excellente approximation.

5 Quantification de l'énergie

5.1 Origine de la quantification

L'un des résultats majeurs de la mécanique quantique est que certaines grandeurs physiques ne peuvent prendre qu'un ensemble discret de valeurs.

Contrairement à la mécanique classique, où l'énergie peut varier continûment, de nombreux systèmes microscopiques ne possèdent que certains niveaux d'énergie autorisés.

Cette propriété est appelée **quantification**.

Quantification

Une grandeur physique est dite quantifiée lorsqu'elle ne peut prendre qu'un ensemble discret de valeurs. Dans un système quantique lié, l'énergie est généralement quantifiée.

Les premières manifestations expérimentales de cette propriété apparaissent dans l'étude des spectres atomiques.

5.2 Spectres atomiques

Lorsqu'un gaz atomique est excité puis observé à l'aide d'un spectroscopie, on constate que le spectre de la lumière émise n'est pas continu.

Le spectre est constitué d'un ensemble de raies lumineuses bien définies.

Chaque raie correspond à une fréquence particulière. L'existence de ces raies montre que l'atome ne peut échanger que certaines quantités d'énergie bien déterminées. Cette observation a conduit au développement des premiers modèles quantiques de l'atome.

5.3 Le modèle de Bohr

5.3.1 Hypothèses de Bohr et quantification du moment cinétique et du rayon de la trajectoire

La première preuve expérimentale de la quantification de l'énergie est venue de l'étude des **spectres de raies** observés à la fin du XIX^e siècle.

En 1888, Johannes Rydberg montra que les longueurs d'onde émises par l'atome d'hydrogène vérifient la relation empirique :

$$\frac{1}{\lambda_{m,n}} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

avec : $n > m$ et $R_H = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, appelée **constante de Rydberg**.

L'origine physique de cette relation demeura longtemps inconnue. En 1913, Niels Bohr proposa un modèle semi-classique de l'atome d'hydrogène permettant d'expliquer cette loi.

Dans ce modèle :

- le noyau est supposé fixe ;
- l'électron de masse m_e décrit une orbite circulaire de rayon r ;
- la force exercée sur l'électron est la force électrostatique attractive du noyau ;
- le moment cinétique de l'électron est quantifié.

L'électron de charge $-e$ subit donc la force :

$$\vec{F} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{u}_r$$

où $r = OM$ est la distance électron-noyau.

Cette force étant centrale, le moment cinétique de l'électron par rapport au noyau est conservé. Bohr introduit alors son hypothèse fondamentale de quantification du moment cinétique de l'électron.

Quantification du moment cinétique

La norme du moment cinétique orbital ne peut prendre que certaines valeurs discrètes :

$$L = n\hbar$$

où n est un entier strictement positif.

Appliquons maintenant le principe fondamental de la dynamique à l'électron.
Pour un mouvement circulaire uniforme :

$$\vec{a} = -\frac{v^2}{r} \vec{u}_r$$

et

$$m_e \vec{a} = \vec{F}$$

donc

$$-m_e \frac{v^2}{r} \vec{u}_r = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{u}_r$$

On en déduit

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

soit

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}$$

et finalement :

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}}$$

Le moment cinétique orbital vaut :

$$L = m_e r v$$

En remplaçant v :

$$L = m_e r \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}}$$

d'où :

$$L = \sqrt{\frac{m_e e^2 r}{4\pi\epsilon_0}}$$

La condition de quantification de Bohr impose alors :

$$\sqrt{\frac{m_e e^2 r}{4\pi\epsilon_0}} = n\hbar$$

En élevant au carré :

$$\frac{m_e e^2 r}{4\pi\epsilon_0} = n^2 \hbar^2$$

On obtient alors les rayons autorisés :

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$

On définit le rayon de Bohr :

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5,29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

Les rayons possibles s'écrivent donc :

$$r_n = n^2 r_1$$

L'orbite de l'électron est donc quantifiée.

5.3.2 Quantification de l'énergie mécanique de l'électron

Calculons maintenant son énergie mécanique. L'énergie cinétique vaut :

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2$$

Or

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r}$$

donc

$$E_c = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

L'énergie potentielle électrostatique est :

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Ainsi :

$$E_m = E_c + E_p = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

En remplaçant r par $r_n = n^2 r_1$:

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 n^2 r_1}$$

On obtient finalement :

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

avec :

$$E_1 = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_1} = -13,6 \text{ eV}$$

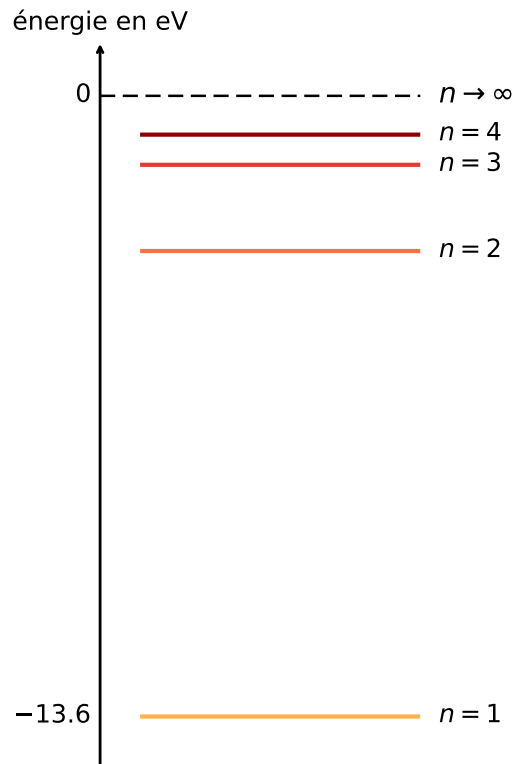


Figure 7 – Niveau d'énergie de l'électron de l'atome d'hydrogène.

Niveaux d'énergie de l'électron de l'hydrogène

L'énergie mécanique de l'électron de l'atome d'hydrogène ne peut prendre que les valeurs quantifiées :

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV} \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

5.4 Formule de Rydberg

Lorsqu'un atome émet un photon de longueur d'onde λ et d'énergie $E_{\text{photon}} = \frac{hc}{\lambda}$, la conservation de l'énergie impose qu'il passe d'un état excité d'énergie E_n initial à un état d'énergie plus faible E_m final, tels que :

$$E_{\text{photon}} + (E_m - E_n) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad E_{\text{photon}} = E_n - E_m$$

On a donc :

$$\frac{hc}{\lambda} = \frac{E_1}{n^2} - \frac{E_1}{m^2}$$

soit

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_1}{hc} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = -\frac{E_1}{hc} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Le modèle permet donc de retrouver la loi expérimentale de Rydberg et fournit une expression théorique de la constante de Rydberg :

$$R_{H,\text{th}} = -\frac{E_1}{hc} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = 1,098 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

Cette valeur est très proche de la valeur expérimentale (le faible écart est dû à l'hypothèse d'un proton fixe). Malgré sa simplicité, le modèle de Bohr permet donc de retrouver le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

5.5 Particule dans un puits infini à une dimension

5.5.1 Puits infini à une dimension

Définition du puits infini

Le modèle du **puits de potentiel infini à une dimension** est défini par l'énergie potentielle :

$$E_p(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0, \\ 0 & \text{si } 0 < x < \ell, \\ +\infty & \text{si } x > \ell. \end{cases}$$

La particule est donc libre de se déplacer dans l'intervalle $[0, \ell]$ mais ne peut en aucun cas franchir les deux barrières de potentiel situées en $x = 0$ et $x = \ell$.

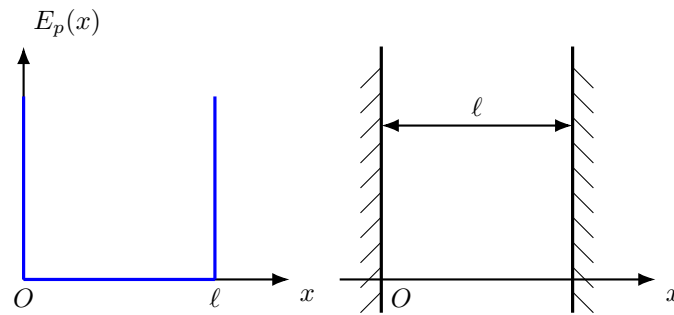


Figure 8 – Modèle du puits infini à une dimension.

5.5.2 Longueurs d'onde autorisées

L'onde de matière associée à la particule est confinée dans l'intervalle $0 < x < \ell$. Comme toute onde confinée, elle doit former une onde stationnaire. De plus, la probabilité de présence étant nulle à l'extérieur du puits, la fonction d'onde doit également s'annuler aux frontières :

$$\psi(0) = \psi(\ell) = 0$$

Les points $x = 0$ et $x = \ell$ sont donc des nœuds de vibration.

Or la distance entre deux nœuds consécutifs d'une onde stationnaire vaut une demi-longueur d'onde. La largeur du puits doit ainsi vérifier :

$$\ell = n \frac{\lambda_{\text{DB}}}{2}$$

où n est un entier strictement positif.

On obtient alors les longueurs d'onde de de Broglie possibles, par analogie avec une corde vibrante fixée à ses deux extrémités :

$$\lambda_{\text{DB},n} = \frac{2\ell}{n} \quad (n \geq 1)$$

5.5.3 Quantification de l'énergie

L'énergie mécanique de la particule est uniquement cinétique car le potentiel est nul :

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

En utilisant la relation de de Broglie

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

on obtient :

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

En remplaçant λ_{DB} par les valeurs autorisées :

$$\lambda_{\text{DB},n} = \frac{2\ell}{n}$$

on trouve :

$$E_n = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{n}{2\ell} \right)^2$$

Finalement :

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8m\ell^2} \quad (n \geq 1)$$

Les niveaux d'énergie sont donc quantifiés. L'écart entre deux niveaux consécutifs vaut :

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

Cet écart augmente avec n .

Le niveau fondamental correspond à $n = 1$:

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

Cette énergie est non nulle.