

Mécanique Quantique

- **EL OUARDI EL MOKHTAR**
- **LABORATOIRE MÉCANIQUE & ÉNERGÉTIQUE**
- **SPÉCIALITÉ : PROCÈDES & ÉNERGÉTIQUE**
- **E-MAIL : dataelouardi@**
- **Site Web : dataelouardi.com**

La Physique c'est quoi déjà?

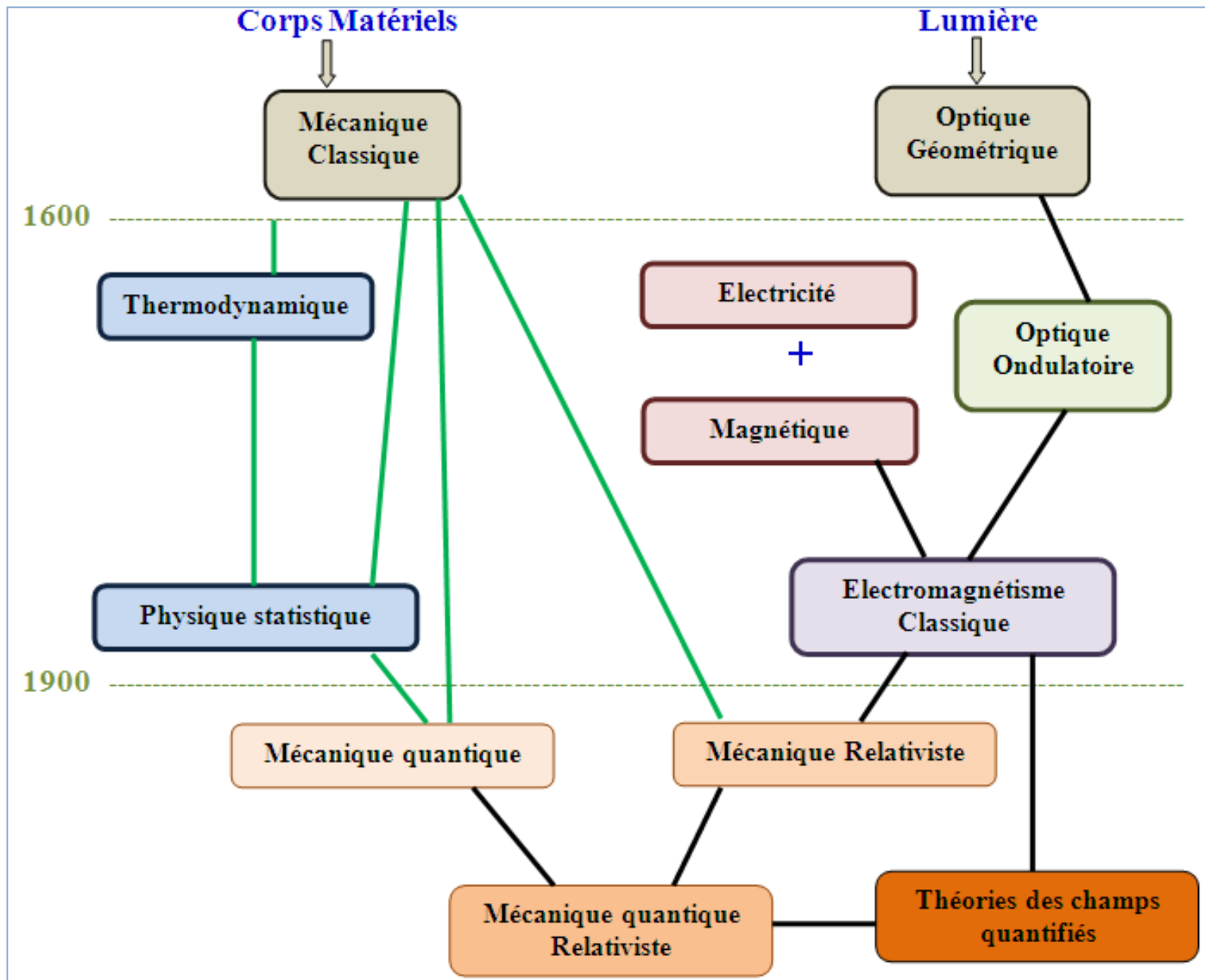
...en deux mots...

- *C'est avant tout une façon de voir le monde*
- *Cette représentation s'articule autour de deux éléments essentiels:*
 - *L' Observation (Expérience: Un mode d'interrogation de la Nature) qui fournit des données factuelles (Ex: données sensorielles) condensées en principes*
 - *La Théorie: c'est une explication formalisée construite sur la base des principes induits de l'expérience.*

Cette vision date du XVIIème siècle, initiée par Galilée et Newton....

Développement en //

L'évolution de la physique

 $\hbar$  $\hbar$

Bibliographie

I- Fondement physique de la mécanique quantique

II- Puits de potentiels et systèmes quantiques

III- Outils mathématiques

IV- Les postulats de la mécanique quantique

- CAPES de Science physique – Tome 1
- Cours de Mécanique quantique (A. Ducasse)
- E. Kartheuser, Elements de Mécanique quantique – Tome 1
- C. Cohen Tanoudji, B. Diu, F. Laloé « Mécanique Quantique »
Tome 1.
- Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard, Mécanique quantique
Cours de l'Ecole polytechnique
- <http://alpha.univ-mlv.fr/meca/mecaQ.html>

I- Introduction & Historique

Pourquoi a-t-on besoin de la mécanique Quantique ?

- A la fin du XIXème siècle, les lois de la nature semblaient totalement connues à travers la théorie de la gravitation (Newton) et de l'électromagnétisme (Maxwell). Deux types de mouvements *mutuellement exclusifs* étaient connus :
 - **Mouvement ondulatoire** :
 - Caractérisé par la *fréquence* et la *longueur d'onde* d'un signal oscillant.
 - La lumière est considérée comme une onde à cause des phénomènes d'interférences (Young).
 - **Mouvement d'un solide** :
 - Caractérisé par sa *masse*, sa *position* et sa *quantité de mouvement*.



La limite de la mécanique classique

$\hbar$

La physique classique qui explique le comportement des systèmes physiques grâce à des modèles mécaniques à l'échelle humaine (jusqu'à la fin du 19^e siècle) n'arrive pas à expliquer les éléments suivants:

- L'électromagnétisme appliqué à des référentiels en mouvement;
- Le comportement des particules se déplaçant à de grandes vitesses;
- La notion de vitesse de la lumière mesurée par rapport à un référentiel absolu (l'éther);
- Le spectre d'émission du corps noir;
- L'effet photoélectrique;
- Le modèle atomique,

$\hbar$

II- Origines de la physique quantique

Insuffisances de la mécanique classique d'exploiter les résultats de :

- La théorie quantique est née alors que les physiciens voulaient expliquer les derniers points:
 - Rayonnement du corps noir;
 - L'effet photoélectrique;
 - les spectres atomiques.

➤ La théorie quantique s'applique à l'infiniment petit. C'est une modélisation qui rend compte des phénomènes de l'infiniment petit.

C'est en découvrant les réponses à ces problématiques les physiciens ont franchit la distance séparant la physique classique de la physique quantique.

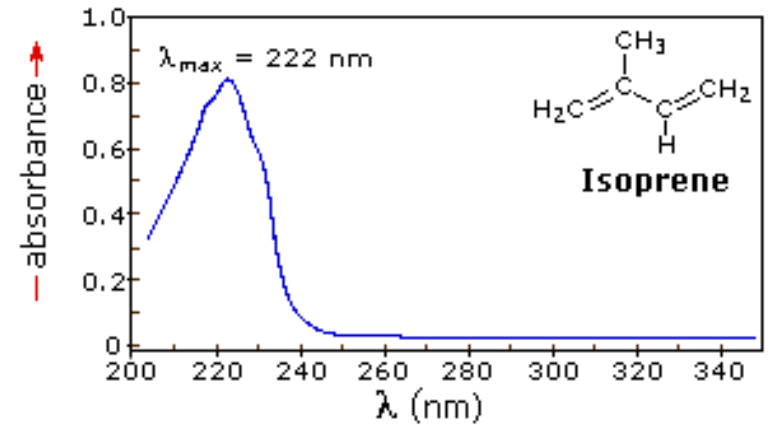
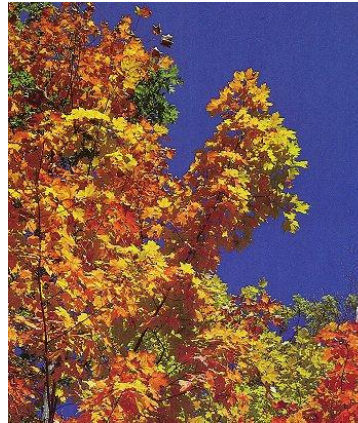
➤ C'est donc dans le cadre interactions matière/lumière que la physique quantique s'est développée au début du XXème .

- + Transistor (1948);
- + Laser (1960) ;
- + Des microprocesseurs (1971);
- + De la microscopie à effet Tunnel (1981);
- + Des nanotechnologies (1990);
- + Des ordinateurs quantiques qui sont en cours de développement;
- + La chimie théorie.

Phénomènes quantiques en chimie

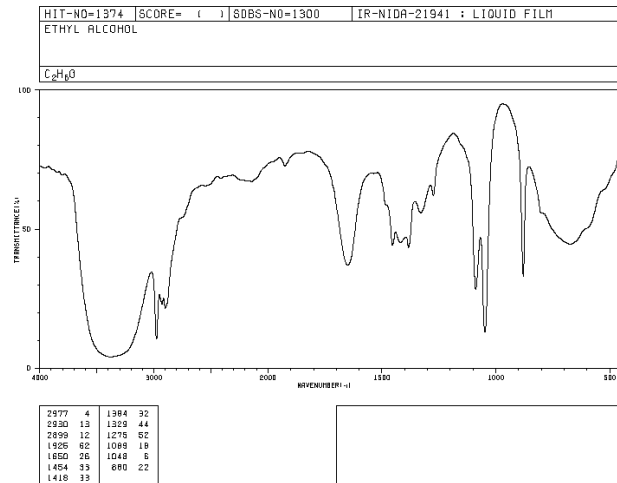
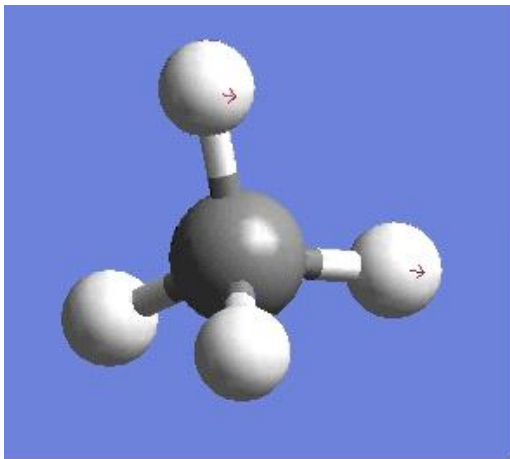
VS

Flammenfärbung

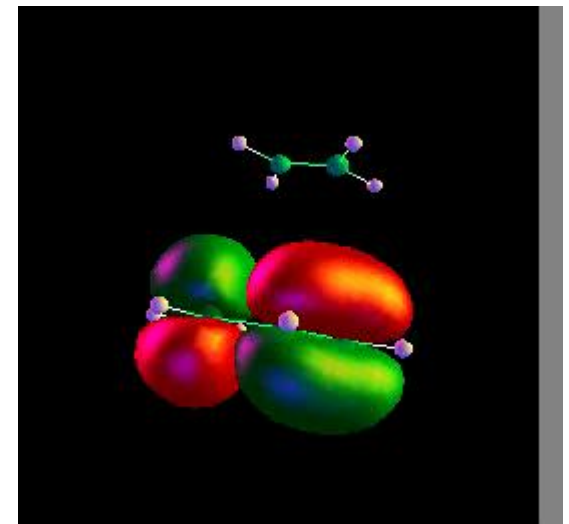


spectre d'absorption

couleur des flammes



spectre vibrationnel



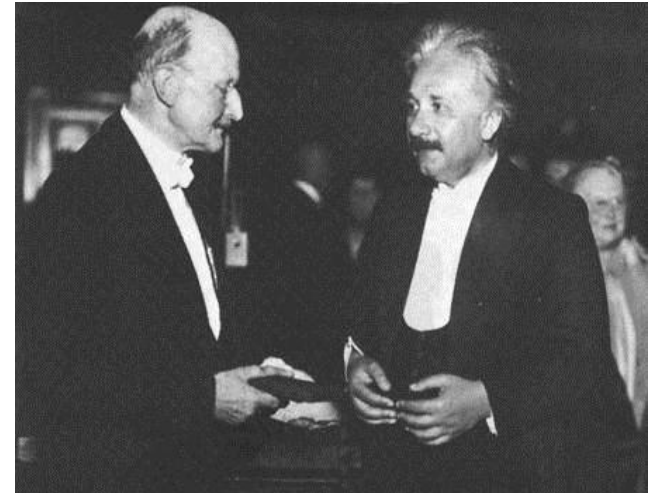
réaction Diels-Alder

Vibrations
moléculaire

1. Rayonnement du corps noir

$\hbar$

- Le problème du corps noir a défié les plus grands esprits, de Kirchhoff à Hawkins en passant par Planck et Einstein. Il est à l'origine de la théorie quantique, du modèle atomique et des particules élémentaires.
- On le retrouve à l'échelle de l'Univers entier avec le rayonnement fossile laissé lors de la création de l'Univers observable.



$\hbar$

1. 1- Définition

Contribution de Kirchhoff



Gustav Kirchhoff

En 1859, Kirchhoff montra que le rayonnement émis par les objets qui absorbent tout le rayonnement incident ne dépend pas de la nature de l'objet. Un tel objet est appelé ***corps noir*** car à cause des températures faibles, il est noir (il absorbe la lumière incidente et son rayonnement émis n'est pas visible).

Comment faire *un corps noir*

Un corps noir “parfait” est un cas idéal. En pratique on le réalise en construisant une cavité (de forme quelconque) de la surface interne sont noircies et isolées thermiquement de l’extérieur. Cela signifie qu’il absorbe la totalité des rayonnements qu’il reçoit.

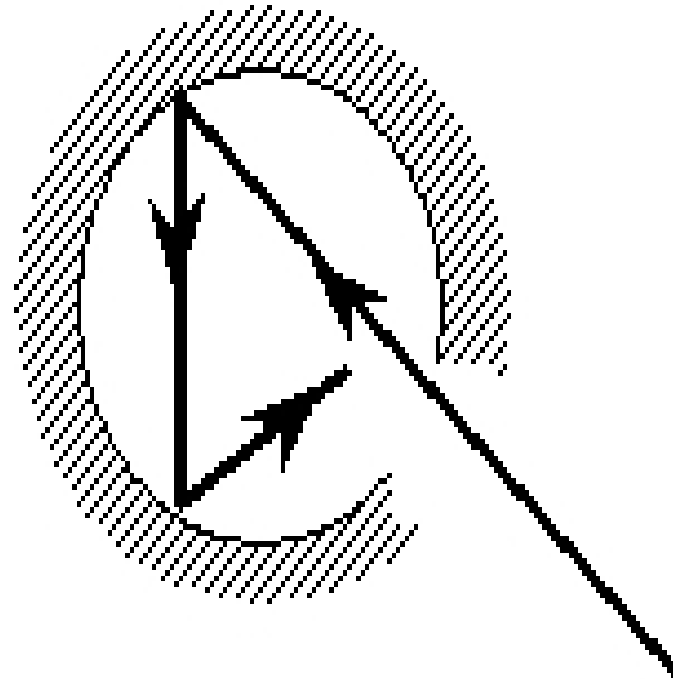


Figure 1. 1 : Réalisation pratique d’un corps noir

L'équilibre thermique étant maintenu à l'aide de l'isolation thermique. Il devient quant la quantité d'énergie qu'il rayonne est égale à celle qu'il reçoit.

Remarque : La notion du “corps noir” vient du fait qu’aux basses températures, le trou de cavité apparaît obscure (noir). Ce même trou deviendra de plus en plus brillant (clair) quand la température augmente.

1. 2. Faits expérimentaux et interprétation classique

C'est entre 1897 et 1899 que O. Lummer et E. Pringsheim ont étudié pour la 1^{ère} fois (d'une manière systématique) la distribution spectrale de l'énergie rayonnée par un corps noir en équilibre thermique à différentes températures. En réalité, ils ont mesuré la densité monochromatique U_λ ou U_ν en fonction de la température du corps étudié.

Ils dirigèrent la radiation émanant d'un corps noir à une température élevée vers un prisme qui l'étalait; les intensités aux diverses longueurs d'onde étaient mesurées grâce à une pile sensible à la chaleur.

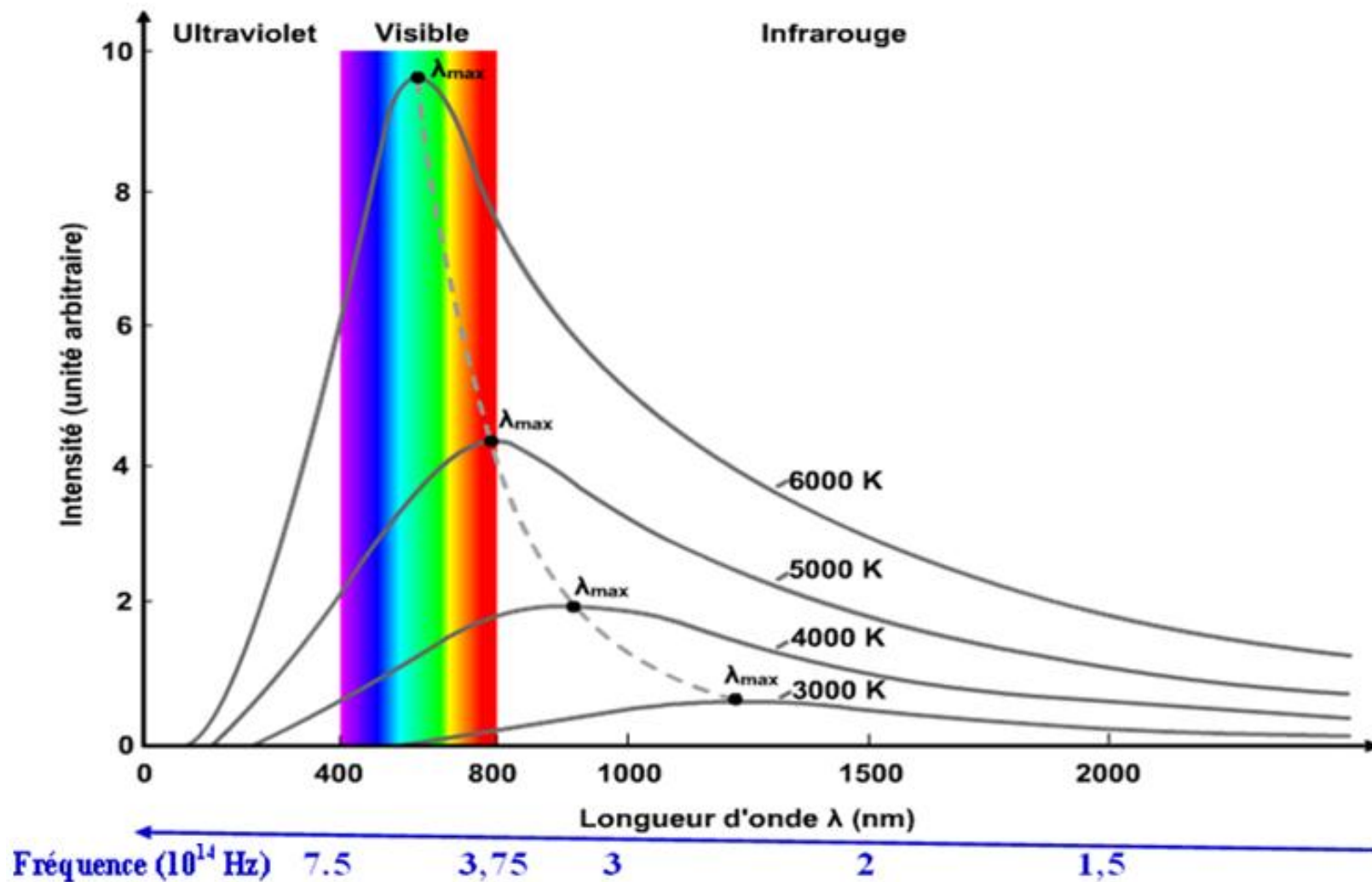


Figure 1.2 : Densité d'énergie rayonnée par le corps noir pour différentes températures en fonction de la fréquence et en fonction de la longueur d'onde



Résultats expérimentaux importantes du rayonnement thermique, qu'on peut tirer:

$\hbar$

- Les spectres sont continus et ne dépendent pas des corps;
- Il existe des maxima pour chaque température;
- À mesure que la température augmente, l'intensité du rayonnement émis par un corps augmente rapidement.
- Plus la température du corps est élevée, plus la longueur d'onde (fréquence) associée au maximum de la distribution du rayonnement est courte (élevées).

Autrement dit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{3\max} < \lambda_{2\max} < \lambda_{1\max} \\ \text{ou} \\ \nu_{1\max} < \nu_{2\max} < \nu_{3\max} \end{array} \right. \quad \text{Si} \quad \left\{ \begin{array}{l} T_1 < T_2 < T_3 \end{array} \right.$$

$\hbar$

Loi du rayonnement de Wien

Wilhem Wien suggéra que l'oscillation des atomes constituant la cavité expliquait l'émission de la radiation; l'énergie de vibration des atomes provient du chauffage du corps noir.

Une expression de la radiance spectrale fut proposée en 1896 par Wien:

$$I(\lambda, T) = A\lambda^{-5}e^{-B/\lambda T}$$

La loi du déplacement de Wien

$\hbar$

Wien proposait une forme empirique dite “déplacement de Wien” (1900).

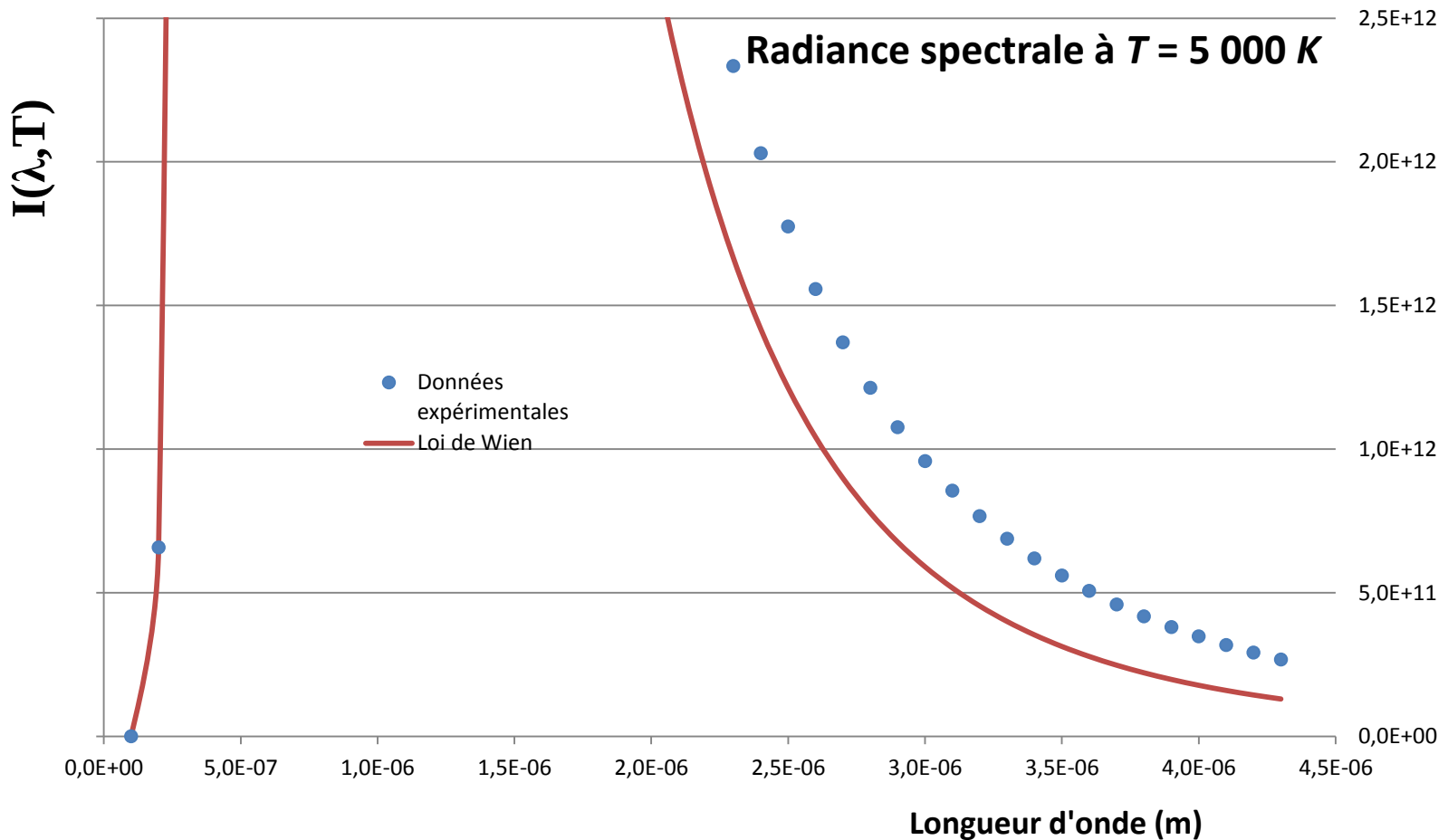
$$\lambda_{\max} T = 2,898 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (1.1)$$

Où $\lambda_{\max}$ est la longueur d'onde pour laquelle l'intensité du rayonnement émis par le corps noir à une température T est maximale.



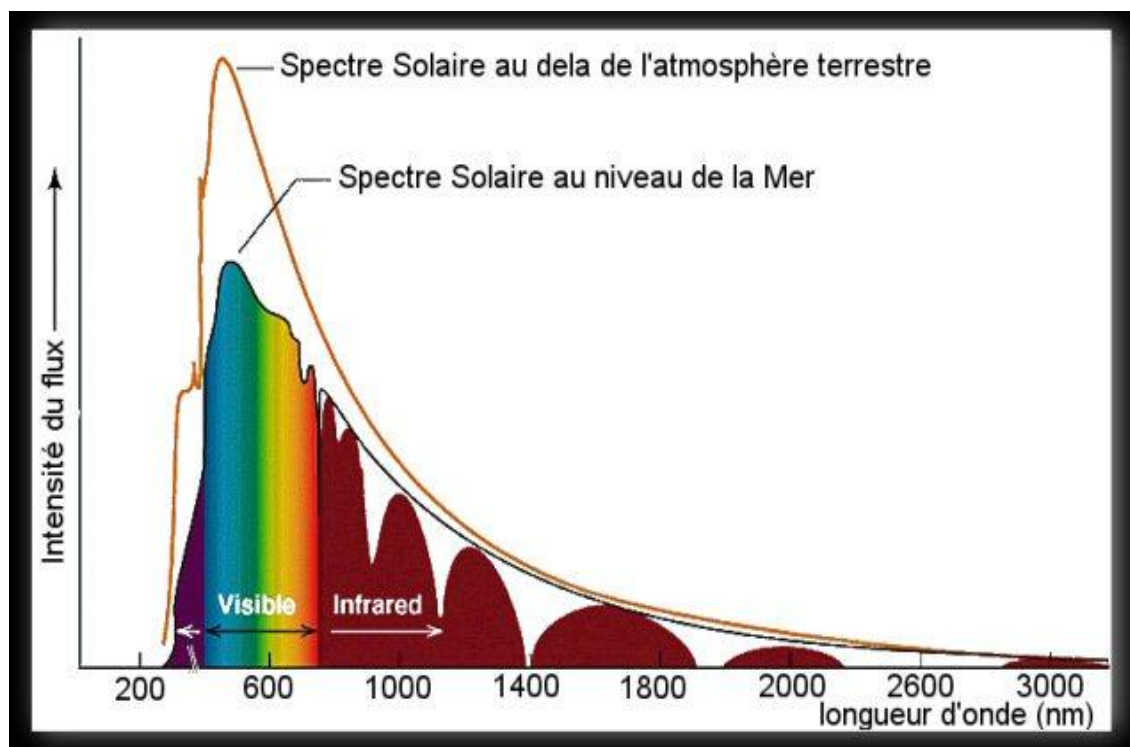
$\hbar$

Des mesures de rayonnement pour des longueurs d'onde comprises entre $120 \times 10^{-7} \text{ m}$ et $180 \times 10^{-7} \text{ m}$ s'écartaient de près de 50% de la loi de Wien (dans cet intervalle) !



Application N° 1

Le pic du rayonnement solaire est situé à 500 nm environ.
Déterminez la température de surface de notre Soleil.



Réponse: $5,80 \times 10^3$ K

Application N° 2

$\hbar$

La température de la peau est voisine de 35°C . Quelle est la longueur d'onde du pic d'intensité du rayonnement émis par la peau ?

Réponse: 9,41 mm

$\hbar$

Application N° 3

La surface d'une étoile n'est pas bien définie, contrairement à la surface d'une planète comme la Terre. La plupart du rayonnement émis est en équilibre thermique avec les gaz formant les couches extérieures de l'étoile. Nous pouvons alors considérer les étoiles comme des corps noirs. Le tableau ci-dessous indique la longueur d'onde du pic de rayonnement pour trois étoiles.

Étoile	λ_{max} (nm)	Couleur
Sirius	0,33	Bleue
Soleil	0,50	Jaune
Bételgeuse	0,83	Rouge

Déterminez la température de surface et l'intensité du rayonnement émis pour ces trois étoiles.

Réponses:

Étoile	$l_{\max}$ (mm)	Couleur	Température (K)	Intensité (W/m^2)
Sirius	0,33	Bleue	$8,8 \times 10^3 \text{ K}$	$3,4 \times 10^8$
Soleil	0,50	Jaune	$5,8 \times 10^3 \text{ K}$	$6,4 \times 10^7$
Bételgeuse	0,83	Rouge	$3,5 \times 10^3 \text{ K}$	$8,4 \times 10^6$

La loi de Rayleigh-Jeans

$\hbar$



- Mais en juin 1900, Lord Rayleigh proposa une autre expression qui concordait mieux pour des grandes longueurs d'onde.

Rayleigh et Jeans utiliseront la théorie électromagnétique et la physique statistique, proposèrent que “le champ électromagnétique rayonné est dû à un ensemble dénombrable d'oscillateurs harmoniques linéaires qui vibrent”.

$\hbar$

La densité d'énergie rayonnée est alors donnée par :

$$I_{\nu}(\nu, T) = \rho(\nu) \langle E(\nu, T) \rangle \quad (1.2)$$

où $\rho(\nu)$ représente le nombre d'oscillateurs par unité de volume et $\langle E(\nu, T) \rangle$ l'énergie moyenne de chaque oscillateur. Ces deux grandeurs sont calculables par la physique statistique et valent respectivement :

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{C^3} \quad (1.3)$$

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} E e^{-\frac{E}{kT}} dE}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} dE} \quad (1.4)$$

Le premier problème : La catastrophe de l'ultraviolet

$\hbar$

On aboutit ainsi à la loi de Rayleigh-Jeans :

$$I_{\nu}(\nu, T) = \frac{8\pi}{C^3} kT \nu^2 \quad (1.5)$$

Cette loi est quadratique en ν et n'est en accord avec l'expérience que pour les faibles fréquences (**fig. 1.3**). En outre elle est inacceptable physiquement car l'intégrale de $I_{\nu}(\nu, T)$ par rapport à ν diverge, ce qui conduirait à une énergie rayonnée infinie, c'est “**la catastrophe de l'ultraviolet**”.

λ_M

Figure 1.3 : Catastrophe de l'ultraviolet

$\hbar$

La théorie classique n'expliquait pas les données expérimentales, comme le montre les figures de diapo précédent,

Pour de grandes longueurs d'onde, la loi de Rayleigh-Jeans convenait,

Mais elle totalement inadéquate pour des courtes longueurs d'onde (tend vers l'infini).

Pour des courtes longueurs d'onde, l'Observation indiquait une énergie nulle.

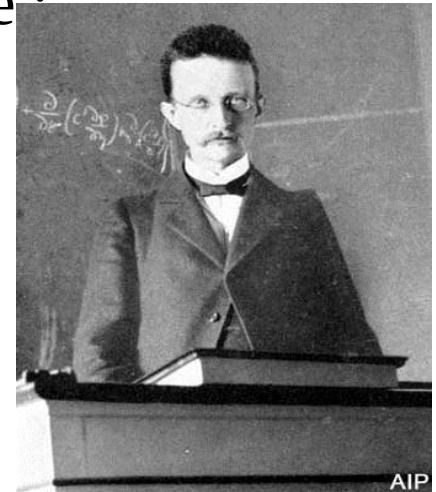
Cette contradiction est appelée « Catastrophe ultraviolette »

1. 3. Loi de Planck

$\hbar$

Pour obtenir un accord avec les observations expérimentales, Planck a été amené à s'écarter de la mécanique statistique et à évaluer de façon différente l'énergie moyenne de chaque oscillateur. **Le 14 Décembre 1900**, il émit l'idée que :

“Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement ne se font pas de façon continue mais par quantités discrètes et indivisibles.”



Max Planck (23 avril 1858 -
4 octobre 1947)

Plus précisément, l'énergie de chaque oscillateur est un multiple entier d'une valeur donnée ε soit :

$$E_n = n\varepsilon.$$

$\hbar$

Dans ce cas, $\langle E(v, T) \rangle$ se calculera simplement par :

$$\langle E(v, T) \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{n=\infty} E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{n=\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}}} = \frac{\varepsilon \sum_{n=0}^{n=\infty} n e^{-\frac{n\varepsilon}{kT}}}{\sum_{n=0}^{n=\infty} e^{-\frac{n\varepsilon}{kT}}} \quad (1.6)$$

En posant $\frac{\varepsilon}{kT} = x$, cette expression devient :

$$\langle E(v, T) \rangle = \frac{\varepsilon \sum_{n=0}^{n=\infty} n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{n=\infty} e^{-nx}} \quad (1.7)$$

Le dénominateur n'est autre que la limite d'une progression géométrique de raison e^{-x} :

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots = \lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{1 - e^{-nx}}{1 - e^{-x}} \right) = \frac{1}{1 - e^{-x}} \quad (1.8)$$

quant au numérateur, pour le calculer il suffit de remarquer que :

$$n e^{-nx} = - \frac{d}{dx} (e^{-nx}) \quad (1.9)$$

La série étant convergente, on a :

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} = - \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{1 - e^{-x}} \right) = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} \quad (1.10)$$

de sorte que

$\hbar$

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\varepsilon e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{\varepsilon}{e^{-x} - 1} = \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1} \quad (1.11)$$

et

$$I_{\nu}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{C^3} \left(\frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1} \right) \quad (1.12)$$

$\hbar$

Pour que cette relation soit en accord avec l'expérience c'est à dire pour que l'on ait $\lim_{\nu \rightarrow \infty} (I_\nu(\nu, T)) = 0$, il faut que $\mathcal{E}$ soit une fonction croissante de ν . Planck a posé $\mathcal{E} = h\nu$ où h est une nouvelle constante universelle appelée “**constante de Planck**”. Il s'ensuit alors que :

“Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement se font par quantités discrètes et indivisibles d'énergie $h\nu$ appelées quanta.”

Quanta étant le pluriel latin de quantum, qui signifie “quantité.”

La **loi de Planck** s'écrit alors dans toute sa gloire sous la forme :

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{C^3} \left(\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \right) \quad (1.13)$$

La recherche du maximum de $I_\nu(\nu, T)$, en fonction de ν permet, en utilisant la loi empirique de Wien (1.1), de déterminer la célèbre constante de Planck qu'on trouve égale à : $h = 6,64.10^{-34} \text{ J.s}$ ayant les dimensions d'une action mécanique.

On remarque qu'aux basses fréquences la loi de Planck redonne bien la loi de Rayleigh-Jeans et qu'aux hautes fréquences, on retrouve la décroissance exponentielle observée expérimentalement, en effet:

* Si $h\nu \ll kT$ alors $e^{\frac{h\nu}{kT}} \approx 1 + \frac{h\nu}{kT}$

Soit $\langle E(\nu, T) \rangle = kT$ et $I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{C^3} kT \quad (1.14)$

A la température ambiante ($kT = 0.025 \text{ eV}$) ceci n'est valable que si :

$$\nu \ll 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (1.15)$$

* Si $h\nu \gg kT$ alors $e^{\frac{h\nu}{kT}} \gg 1$

Soit $\langle E(\nu, T) \rangle = h\nu e^{-\left(\frac{h\nu}{kT}\right)}$ et $I_\nu(\nu, T) = \rho(\nu) \langle E(\nu, T) \rangle \quad (1.2)$

La loi de Planck peut s'exprimer également en fonction de la longueur d'onde.

Elle s'écrit alors :

$$I_\nu(\lambda, T) = \frac{2\pi C^2 h}{\lambda^5} \left(\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \right) \quad (1.16)$$

Cette expression est représentée par la courbe en traits pleins de la figure 1.4 et elle est en accord parfait avec l'expérience.

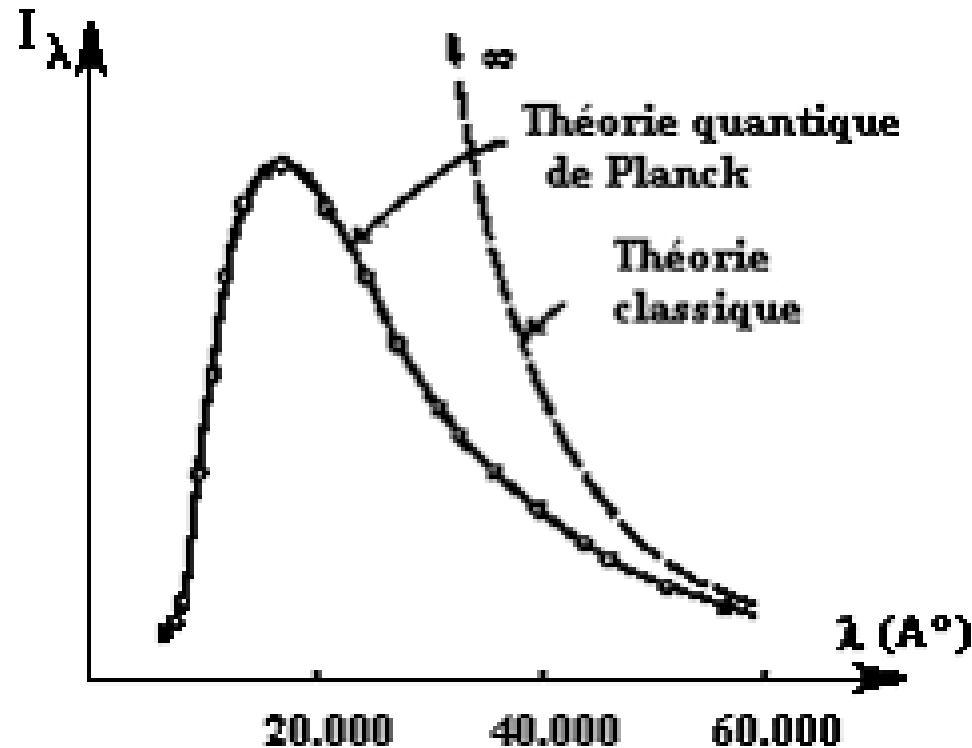


Figure 1.4 : Confrontation des théories classique et quantique du rayonnement du corps noir avec l'expérience

L'intégration de $I_{\lambda}(\lambda, T)$ par rapport à λ permet d'atteindre la puissance totale émise par le corps noir. Cette puissance est donnée par :

$$P = \frac{C}{4} \int_0^{\infty} I(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4$$

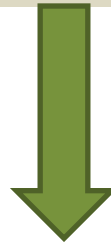
Où
$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15C^2 h^3} = 5.67 \times 10^{-8} \text{ (SI)}$$

Cette loi est connue sous le nom de “loi de Stefan” et σ est la constante de Stefan.

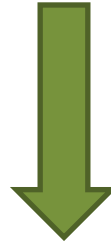
Rayleigh-Jeans



La catastrophe ultraviolette



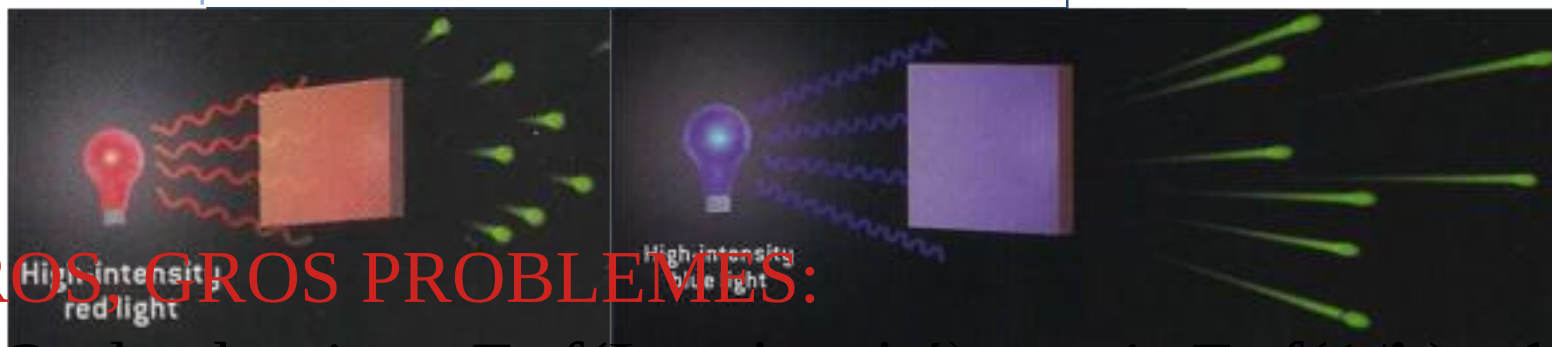
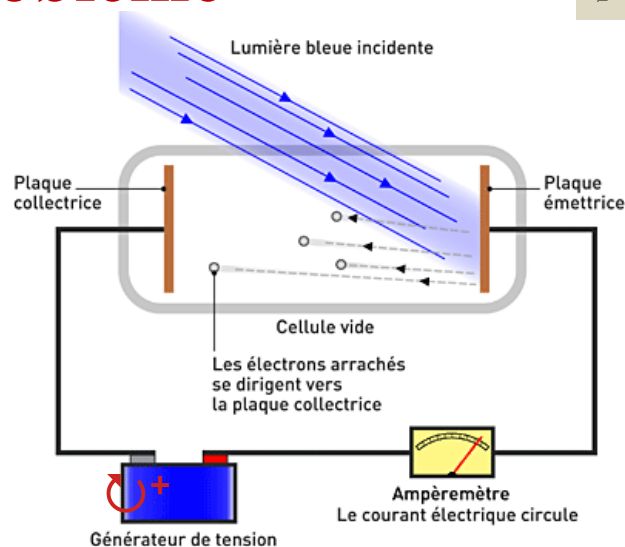
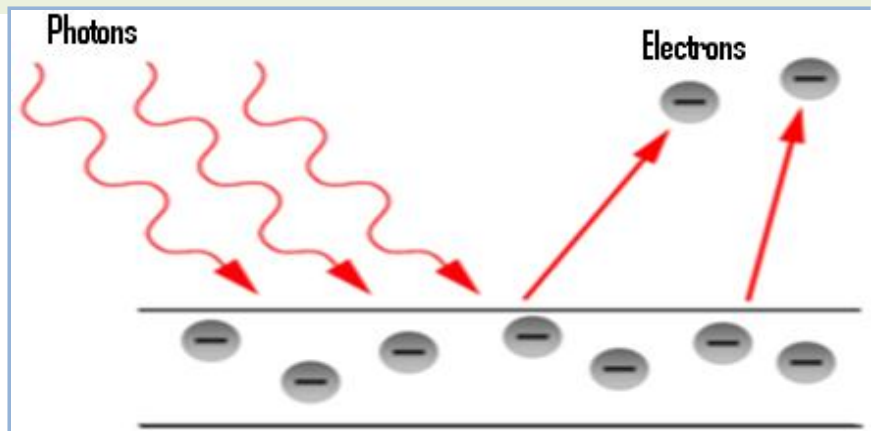
Enlevée Hypothèse de Max Planck



Énergie thermique $\leftrightarrow$ Énergie E.M par "quanta
d'énergie"

2. Effet photoélectrique : Second problème

Arrachement des électrons de certains métaux par des photons !



GROS PROBLEMES:

- ⚡ Onde classique $E=f(\text{Luminosité})$: mais $E=f(1/\lambda)$, observée
- ⚡ seuil (pas d' e^- pour $\lambda > \lambda_s$ c-à-d $\nu < \nu_s$!!!)
- ⚡ λ_s dépend du matériau pas de l'onde incidente...

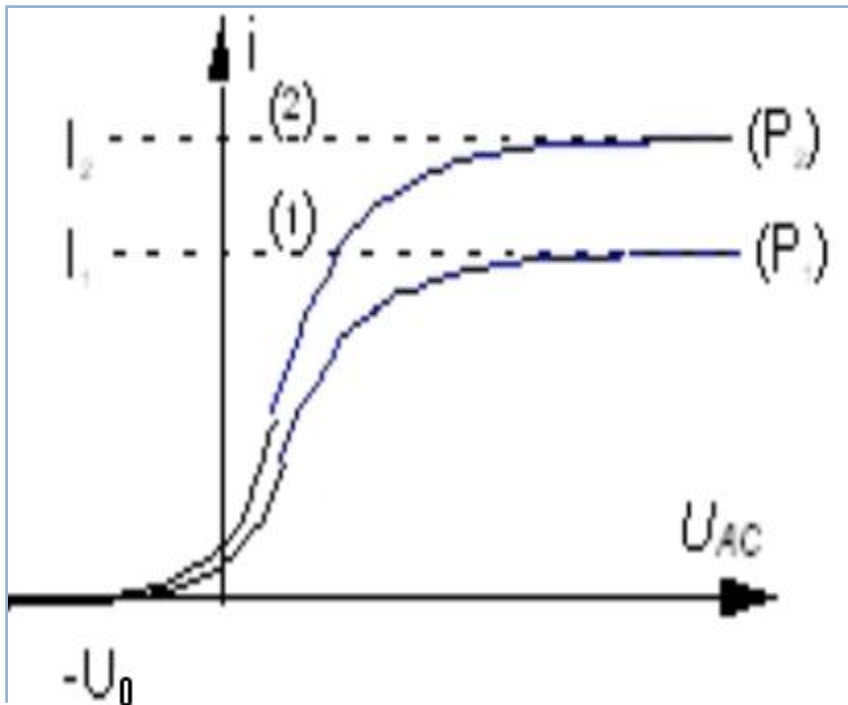


Figure 1.6 : Caractéristique d'une cellule photoélectrique pour une fréquence donnée et pour deux puissances différentes du faisceau incident ($P_2 > P_1$)

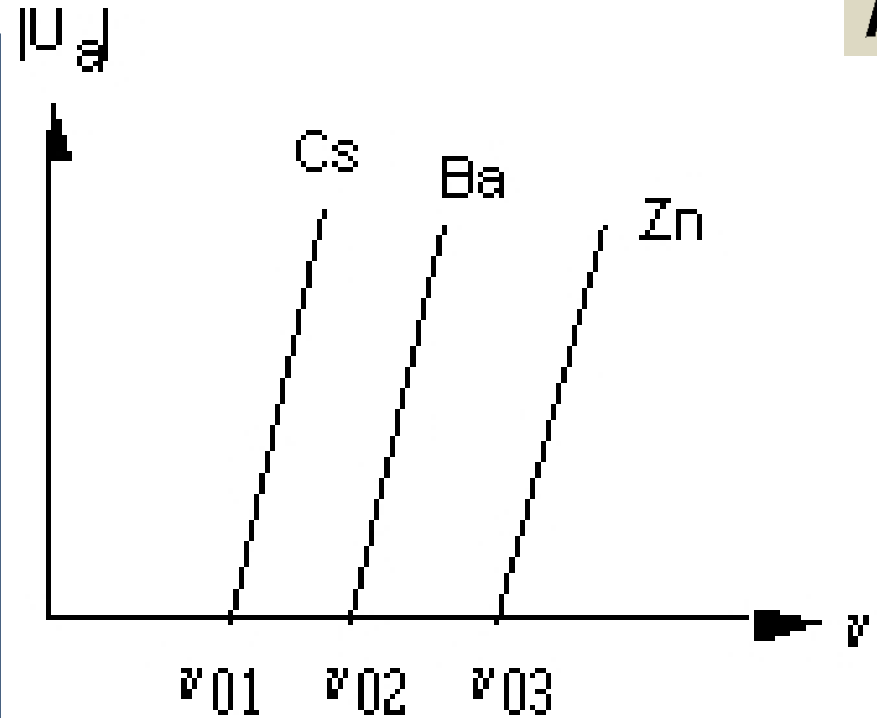
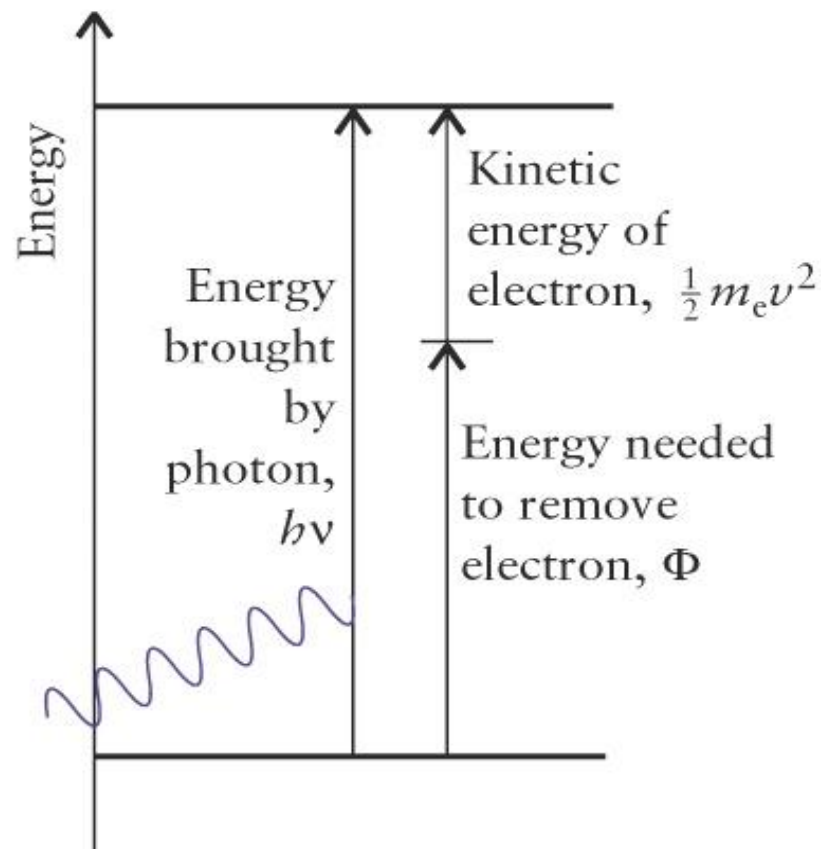
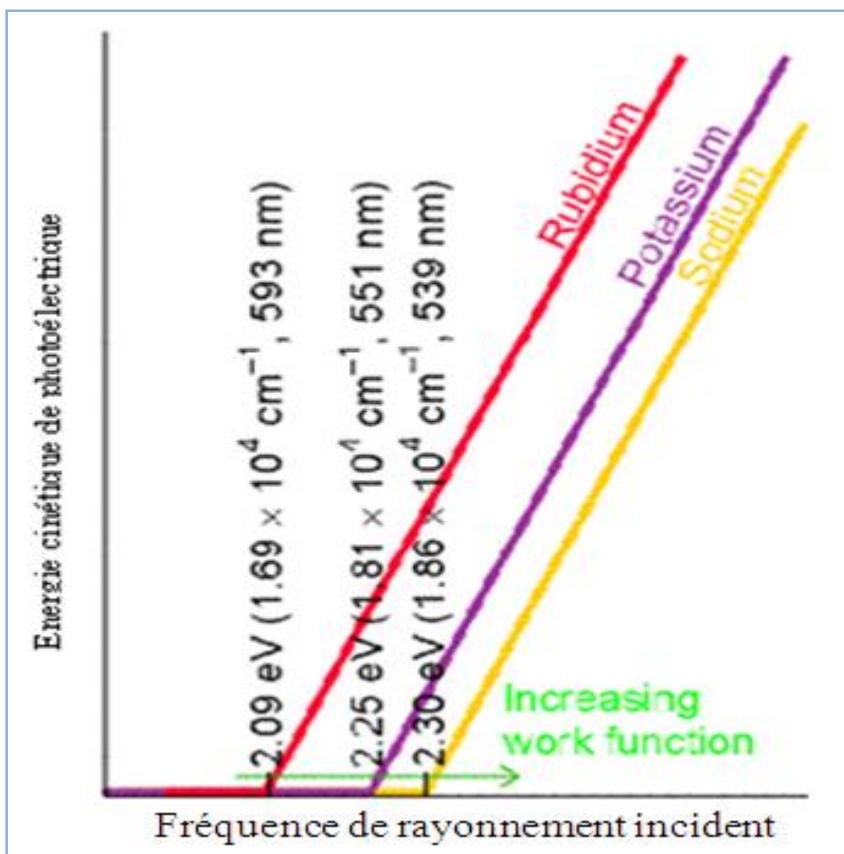


Figure 1.7 : Variation du potentiel d'arrêt en fonction de la fréquence.



L'énergie cinétique des électrons est donc comme U_a . Elle est nulle pour $\nu < \nu_0$ et croît linéairement lorsque $\nu > \nu_0$.

$$\frac{1}{2}mv^2 = -eU_{AC} = eU_0$$

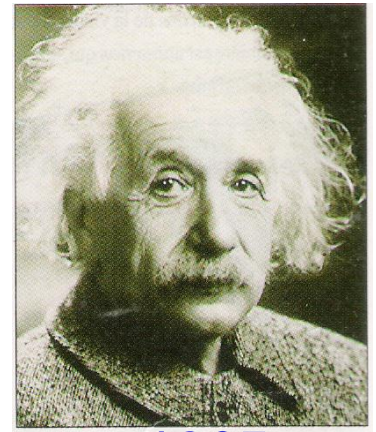
$$U_0 = \frac{1}{2} \frac{m}{e} v^2$$

La dépendance simple de l'énergie cinétique des électrons en fonction de la fréquence et son indépendance de la puissance du faisceau incident ne trouvent pas d'explication dans le cadre de la théorie classique.

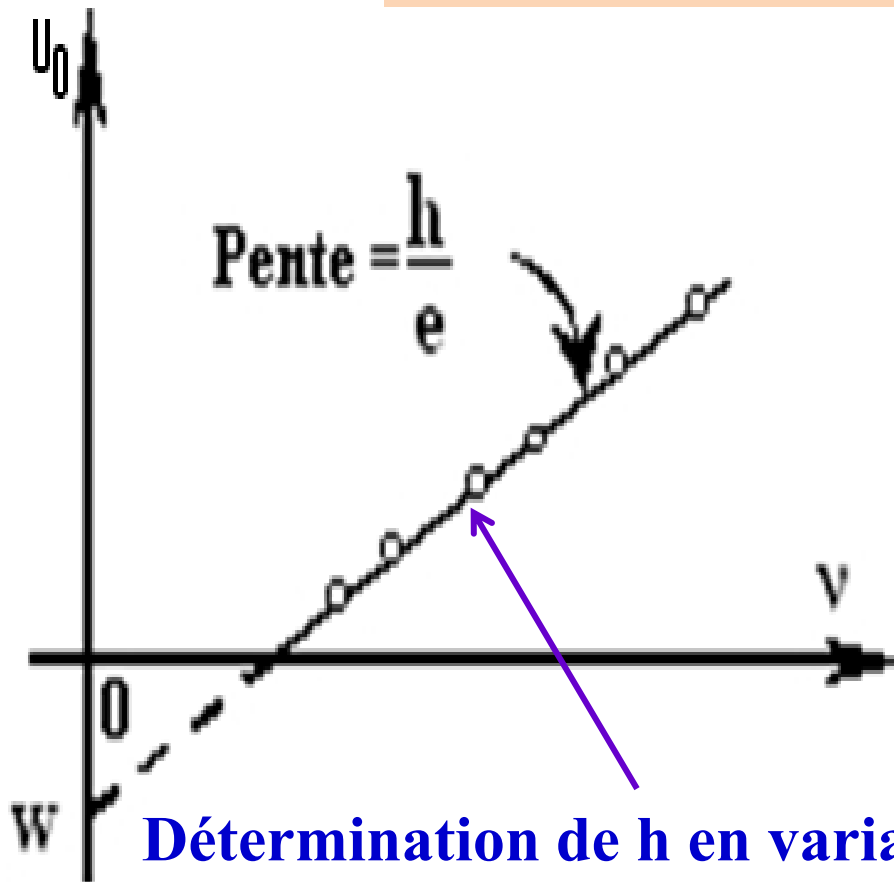
Interprétation quantique de l'effet photoélectrique

$$E_C = E - W \text{ soit : } E_C = h\nu - W_0$$

$$U_0 = \frac{h}{e} \nu - \frac{W}{e}$$



1905



Variation du potentiel d'arrêt U_a en fonction de la fréquence ν

Détermination de h en variant ν_{photon} et mesurant le U_0 associé

Effet Compton : Confirmation de l'existence des photons $\hbar$

Vérifie expérimentalement en 1923:
le comportement corpusculaire du photon et l'hypothèse de la quantification de l'énergie du photon **par la longueur d'onde**

En éclairant un bloc de graphite (cf. figure 1. 10) avec un faisceau de rayons X (raie K_α du molybdène de longueur d'onde $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$) monochromatiques de longueur d'onde λ et en observant le spectre des radiations diffusées sous un angle θ .

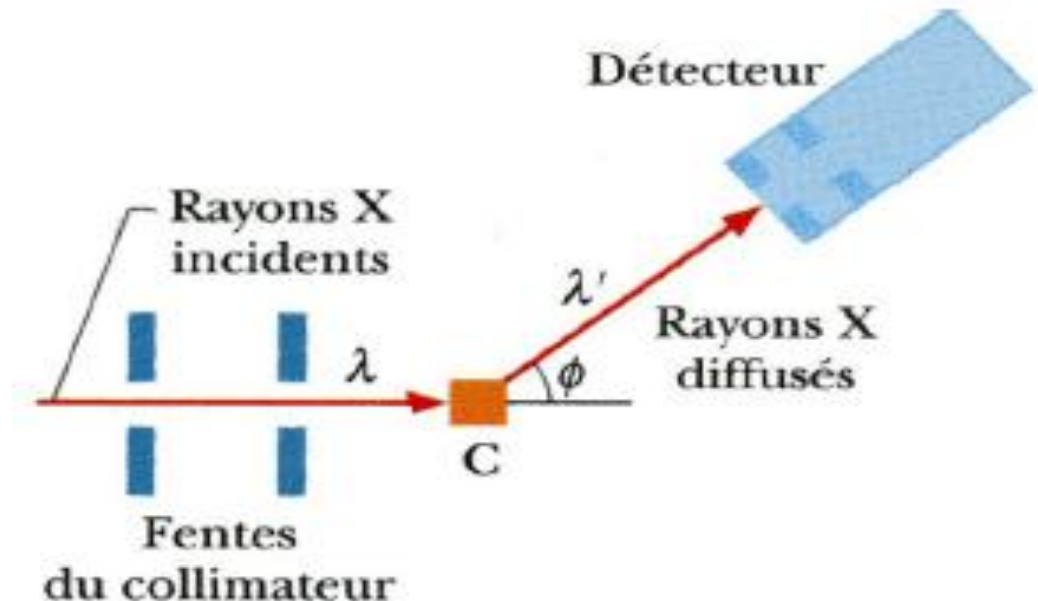


Figure 1. 10 : Expérience de Compton

Arthur Holly
Compton (1892-1962)

Prix Nobel en 1927

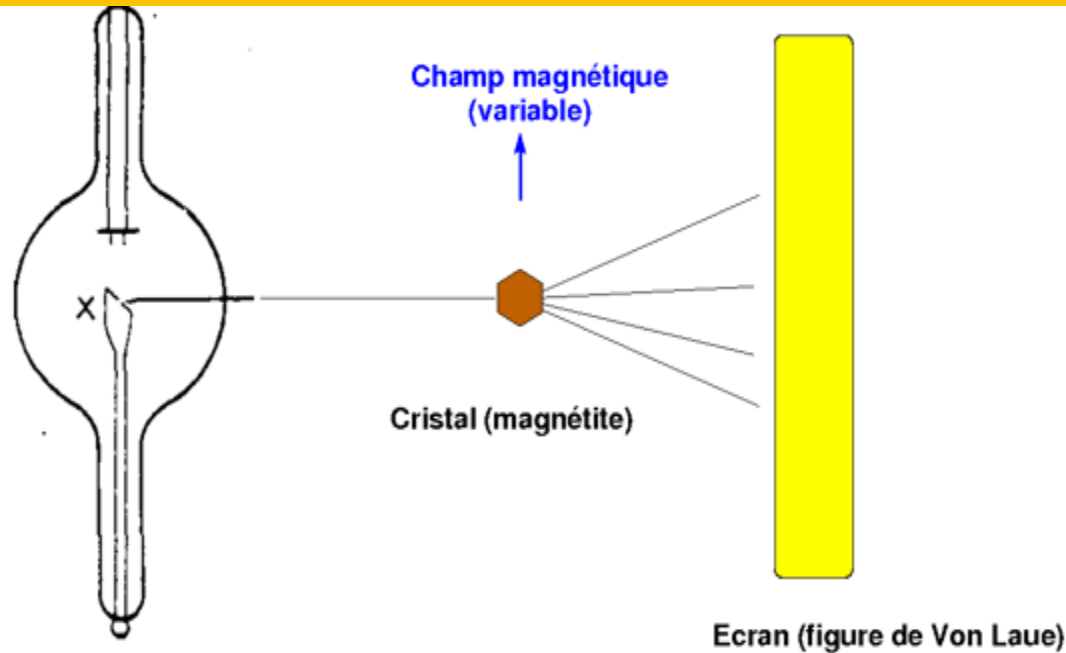
$\hbar$

Effet Compton

$\hbar$

Définition : On appelle effet Compton tout changement de longueur d'onde (ou de fréquence) d'un rayonnement incident qui entre en collision avec des particules (tels que les électrons ou nucléons) et les mets en mouvement. Le rayonnement perd un peu d'énergie et sa longueur d'onde augmente.

Est-ce qu'on voit la même chose pour les rayons X ?



Source de rayons X

Ecran (figure de Von Laue)

Les rayons X sont diffusés par les électrons!!!

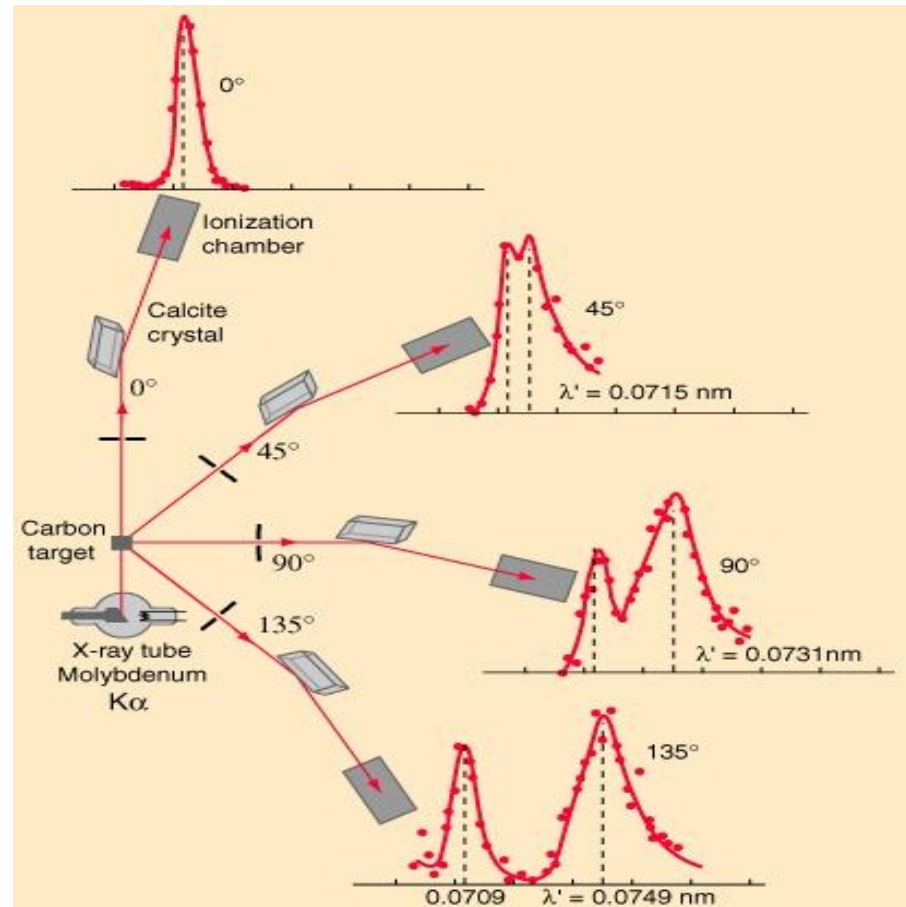
$\hbar$

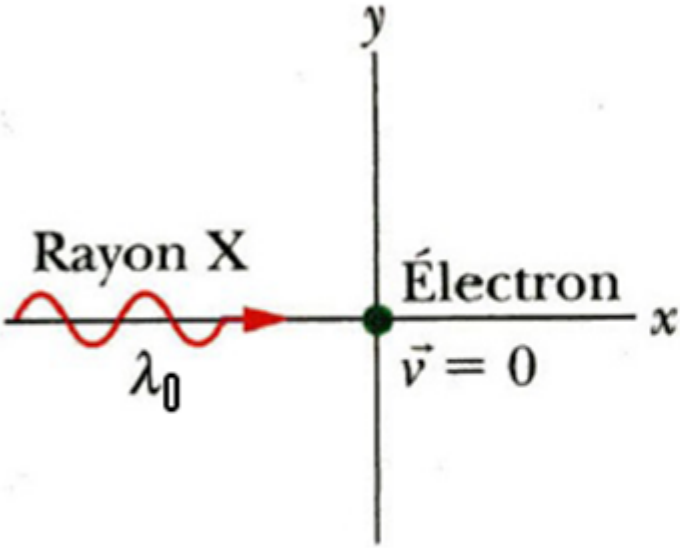
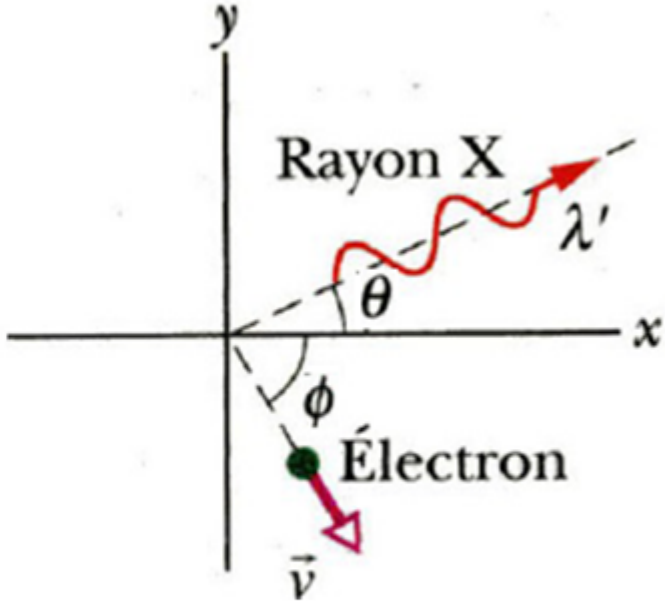
① Utilisation du mécanisme de Von

Laue/Bragg → source de X mono-énergétique

② Avril 1921 : observation de phénomène similaire (rayons diffusés + "mous")

③ fin 1921 nouvelles mesures (spectre des X diffusés) avec le dispositif de Bragg



Avant	Après
	
Electron : $E_e^0 = m_0 C^2$, $\vec{p}_e^0 = \vec{0}$ Photon : $E_{ph}^0 = h\nu_0$, $\vec{p}_{ph}^0 = \frac{h\nu_0}{C} \vec{e}_x$	Electron : $E_e = mC^2$, $\vec{p}_e = m \cdot \vec{v} = m v \vec{u}_\phi$ Photon : $E_{ph} = h\nu$, $\vec{p}_{ph} = \frac{h\nu}{C} \vec{u}_\theta$

collision élastique (avec transfert d'impulsion-énergie) entre 'corpuscule' de lumière (photon) et électron ("billard")

Impulsion du 'corpuscule' de lumière : $p = h/\lambda$

* Variation de la longueur d'onde en fonction de l'angle de diffusion $\Delta\lambda \propto (1 - \cos\theta)$

Conservation de l'énergie : (système isolé) (choc élastique)

$$h\nu_0 + m_0 C^2 = h\nu + mC^2 \quad (1.27) \text{ avec}$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{C^2}}} \quad (1.28)$$

Conservation des impulsions :

$$\overrightarrow{p_{ph}^0} = \overrightarrow{p_e} + \overrightarrow{p_{ph}} \quad \Rightarrow \quad \frac{h\nu_0}{C} \overrightarrow{e_x} = mv \overrightarrow{e_\varphi} + \frac{h\nu}{C} \overrightarrow{e_\theta} \quad (1.29) \text{ Equation vectorielle}$$

$$\text{Projection / } \overrightarrow{e_x} \quad \Rightarrow \quad \frac{h\nu_0}{C} = mv \cos \varphi + \frac{h\nu}{C} \cos \theta \quad (1.30)$$

$$\text{Projection / } \overrightarrow{e_y} \quad \Rightarrow \quad \frac{h\nu_0}{C} = mv \sin \varphi - \frac{h\nu}{C} \sin \theta \quad (1.31)$$

$$\Rightarrow \quad \Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 C} (1 - \cos \Phi) \quad (1.32)$$

$$\text{Avec } \lambda_0 = \frac{h}{m_0 C} = 2.43 \text{ pm} \quad \text{c'est la longueur d'onde Compton}$$

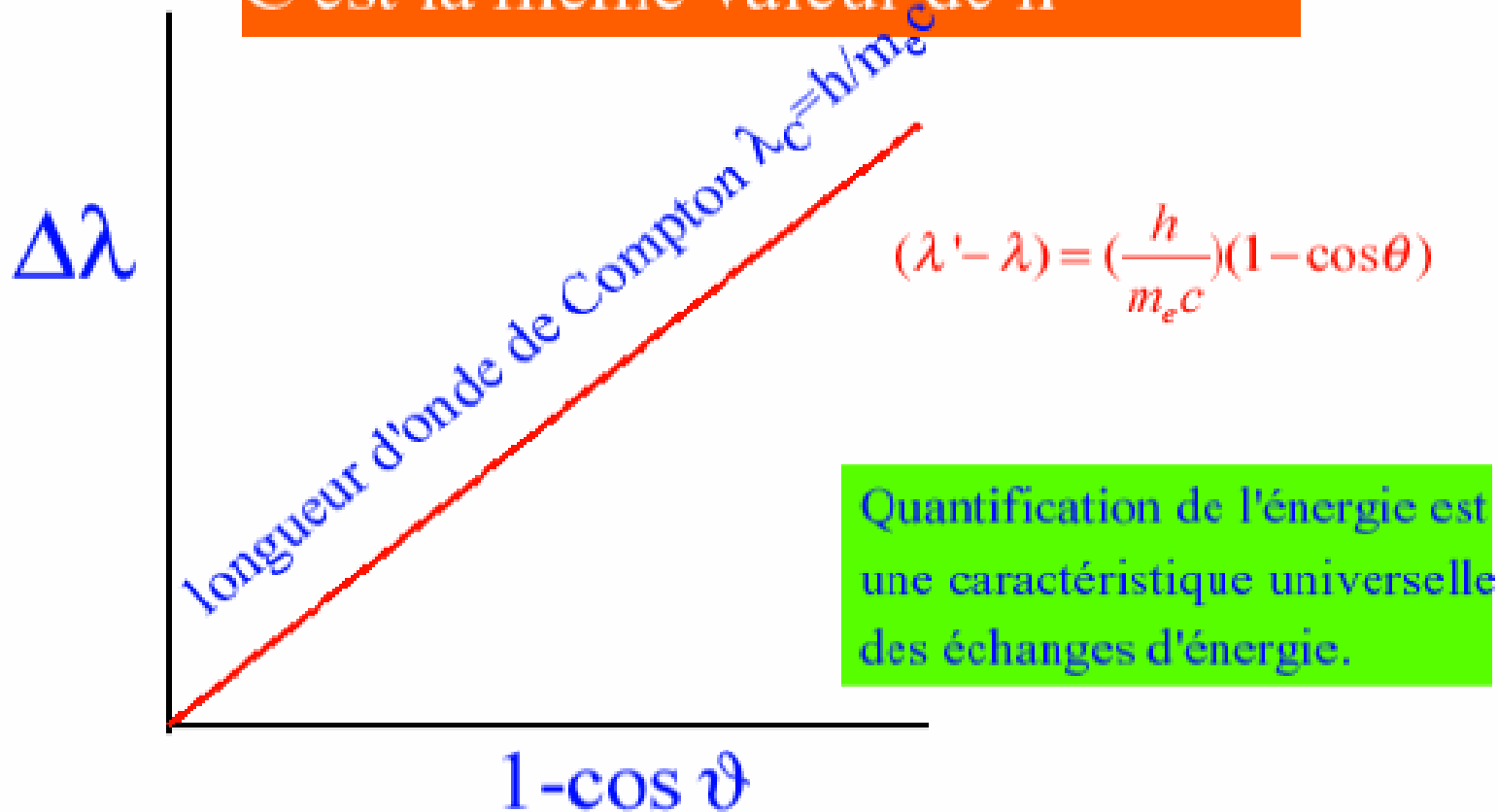
Interprétation des résultats :

- i) Le rayonnement (RX) diffusé comporte une longueur d'onde λ_0 incidente ($\mathbf{K}_\alpha$ du molybdène) et une autre longueur d'onde λ supérieure à λ_0 et se déplace vers les grandes λ .
- ii) Le déplacement $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ est une fonction croissante de l'angle θ de diffusion.
- iii) L'intensité I_0 de la raie non déplacée ($\mathbf{K}_\alpha$ de λ_0) diminue avec l'augmentation de θ contrairement à l'intensité I' de la raie (λ') déplacée qui augmente avec θ .

Constante de h à partir de l'effet Compton

A partir de la pente, on détermine « h »

C'est la même valeur de h



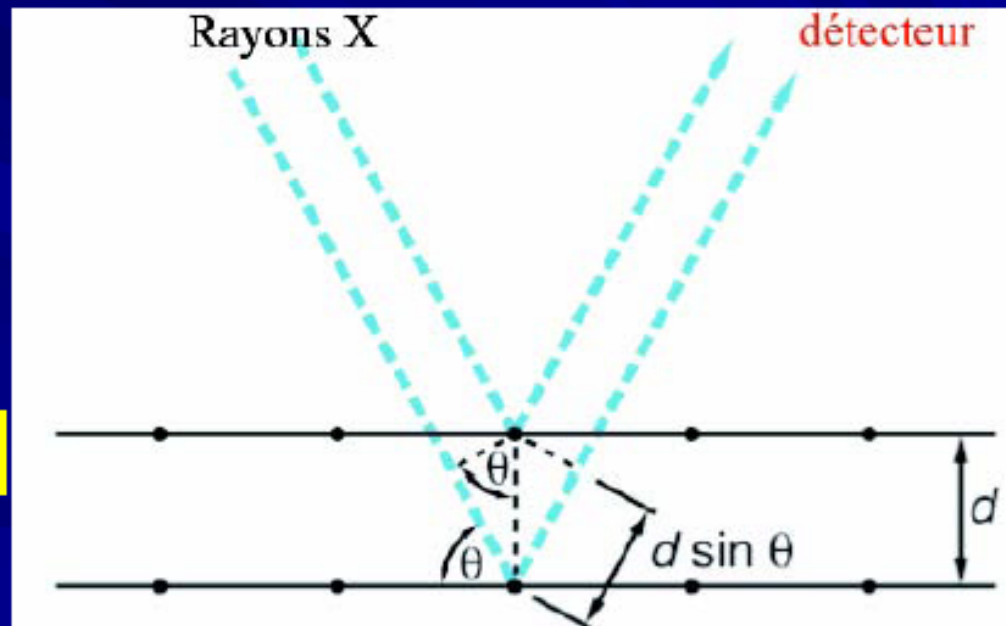
Diffraction de rayons x par un réseau d'atomes

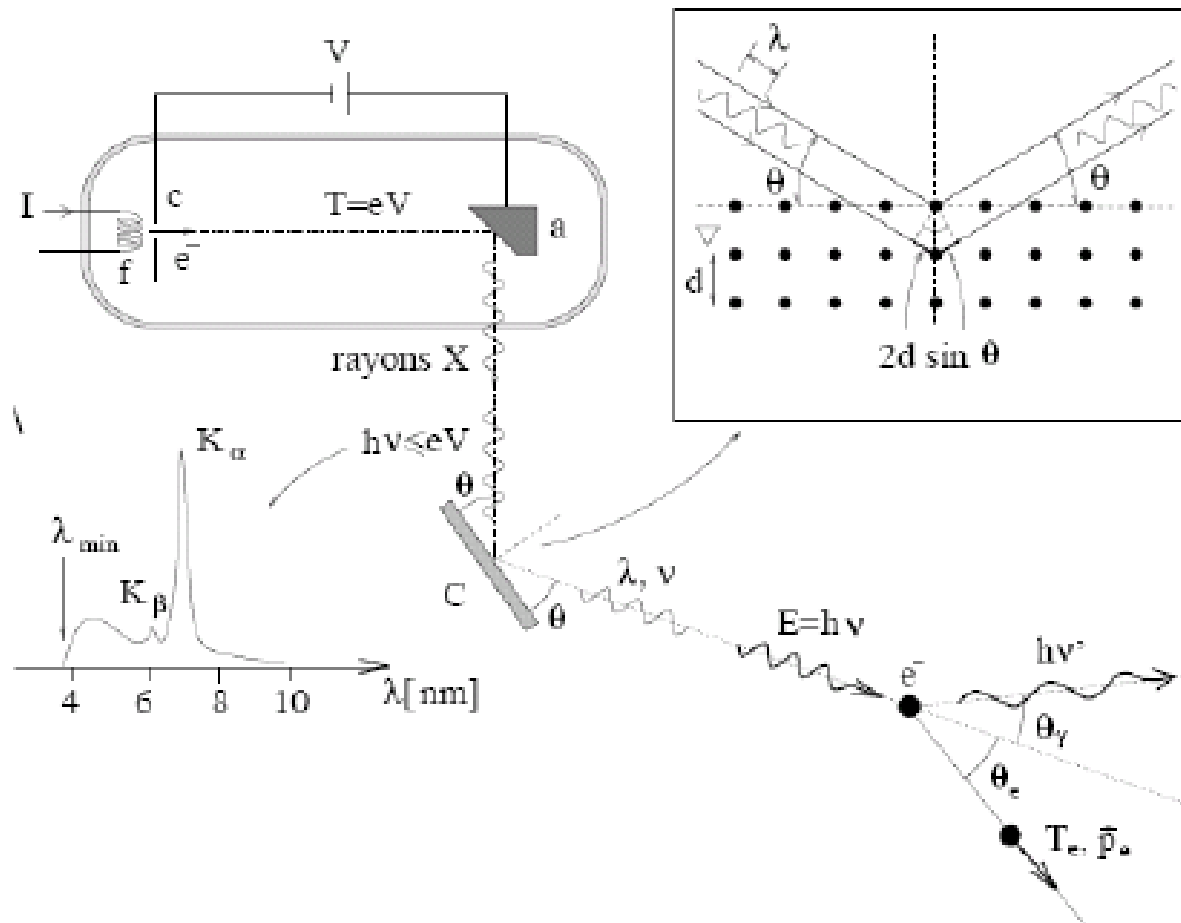
Interférences constructives quand la différence de marche est un multiple entier de λ .

on obtient:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

C'est la loi de Bragg

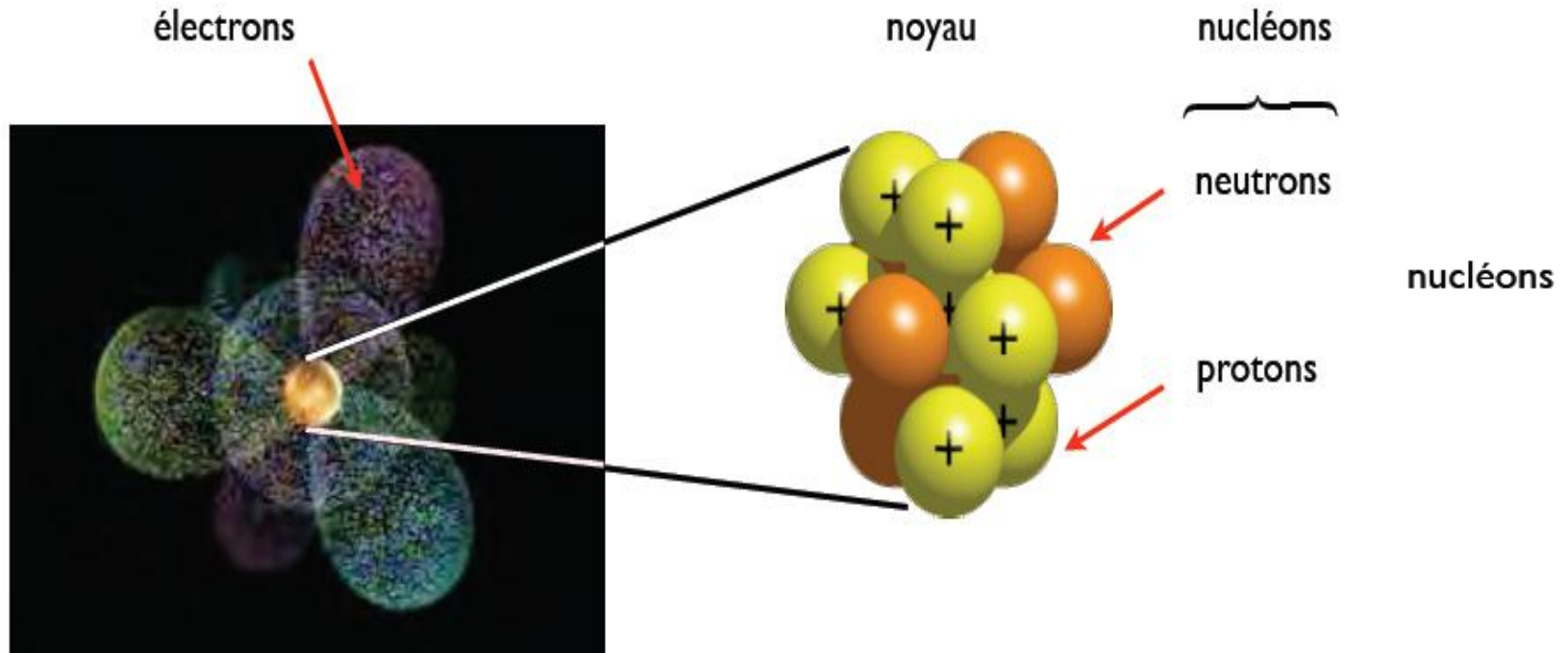




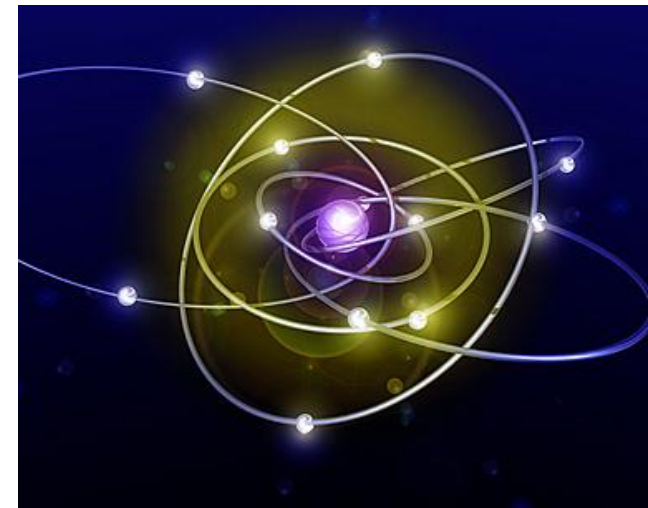
Appareil pour l'étude de l'effet Compton, avec tube cathodique pour la production des rayons X . Les électrons émis par thermoémission d'un filament (f) et accélérés entre la cathode (c) et l'anode (a) produisent des rayons X lorsqu'ils sont freinés dans cette dernière. Le spectre est continu, un exemple est montré (anode de Mo à 30 kV). Le spectre s'arrête en-dessous de la longueur d'onde λ_{min} , correspondant à l'énergie maximale des photons du rayonnement X ($h\nu = eV$). Un cristal (C) sert de monochromateur, et permet de sélectionner le rayonnement de la fréquence ν désirée par diffusion de Bragg.

Troisième problème : Le spectre atomique

$\hbar$



Structure de l'atome



$\hbar$

II-LES MODÈLE CLASSIQUE DE L'ATOME

Ernest Rutherford (1871-1937)

II-1. Modèle de Rutherford (Modèle Planétaire) (1911)

Ce modèle est basé sur l'existence du noyau dans lequel est pratiquement concentrée toute la masse de l'atome et autour duquel gravitent des électrons.



La dynamique serait alors celle de Kepler et les orbites auraient une forme elliptique,

Avec une approximation : Mvt circulaire

La stabilité mécanique résulte de la compensation des forces d'attractions $\vec{F}_a$ par les forces centrifuges $\vec{F}_r$ dues à la rotation des électrons autour du noyau.

L'avantage de ce modèle  Lois de la mécanique classique.

Pour un atome d'hydrogène $_1\text{H}$

-l'électron de l'atome d'hydrogène est soumis à:

+ Une force d'attraction coulombienne du noyau:

$$\mathbf{F}_a = (1/4\pi\epsilon_0) \mathbf{e}^2 / \mathbf{r}^2 \quad (1)$$

+ Une force de répulsion (force centrifuge) :

$$\mathbf{F}_r = m\mathbf{v}^2 / \mathbf{r} \quad (2)$$

Calcul de l'énergie de l'électron

$\hbar$

$E_T = E_C + E_P$ avec E_C : Energie cinétique E_P : Energie potentielle

$E_C = 1/2 m v^2$ et en utilisant les relation (1) et (2) $E_C = (1/8\pi\epsilon_0) e^2/r$

$$E_P = \int -(1/4\pi\epsilon_0) e^2/r^2 dr = - (1/4\pi\epsilon_0) e^2/r$$


$$E_T = [(1/8\pi\epsilon_0) e^2/r] - [- (1/4\pi\epsilon_0) e^2/r]$$

$$E_T = - (1/8\pi\epsilon_0) e^2/r$$



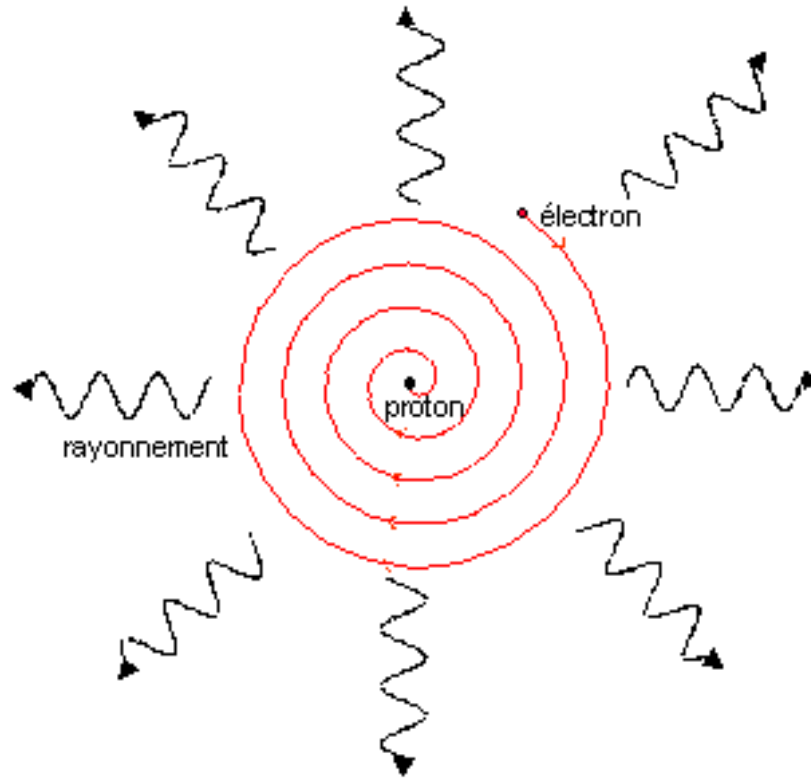
$$E_T = f(r)$$

Continuité de l'énergie de l'électron en fct du rayon

$\hbar$

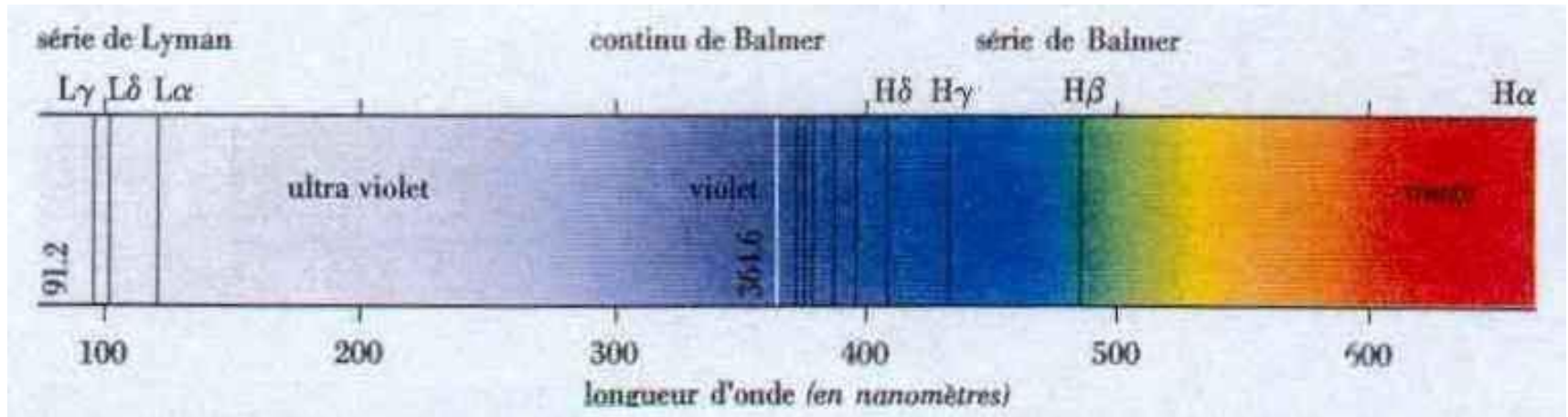
➡ Limites de l'atome de Rutherford

L'atome de Rutherford n'est pas viable, puisque l'électron doit rayonner de l'énergie (donc en perdre) durant son mouvement, si bien qu'après un laps de temps suffisamment court, il finirait par s'écraser sur le noyau



**Chute de l'électron
sur le noyau**

- ✚ L'atome de Rutherford (hydrogéoïde) sera instable et ne vivra que 10^{-11} secondes.
- ✚ Le spectre prévu par ce model est continu contrairement aux spectre de raies observés expérimentales pour toutes les hydrogéoïdes.



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



Nouveau modèle de Bohr

- Modèle planétaire quantifié (1913)

Bohr a basé sur deux postulats



*i) Les électrons ne s'observent que dans des orbites "permises" dans lesquelles ils ont des énergies bien déterminées : ces orbites sont définies par la condition de quantification **du moment angulaire** :*

$$\int \vec{P} \cdot d\vec{l} = nh$$

Simplification (Mouvement circulaire)

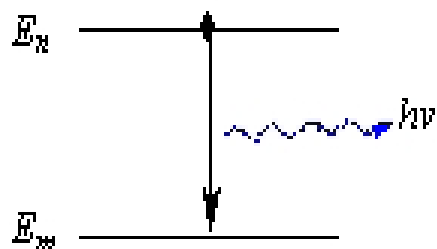
$$m \cdot V_n \cdot r_n = n \frac{h}{2\pi}$$

***h**: la constante de Planck
($h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$)*

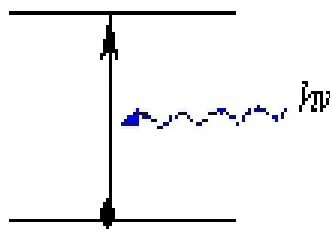
***n**: un nombre entier non nul
appelé nombre quantique
principal*

ii) Quand l'électron décrit une orbite stationnaire, l'atome n'émet (n'absorbe) aucun rayonnement. L'émission (ou l'absorption) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie E_n à une orbite d'énergie plus petite (ou plus grande) E_m . La fréquence ν_{nm} du rayonnement émis (ou absorbé) est donnée par :

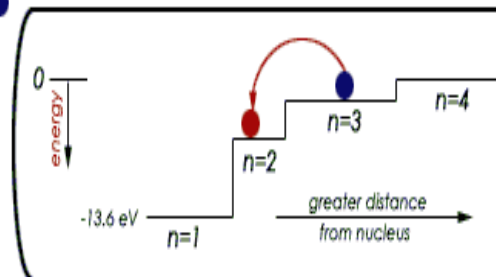
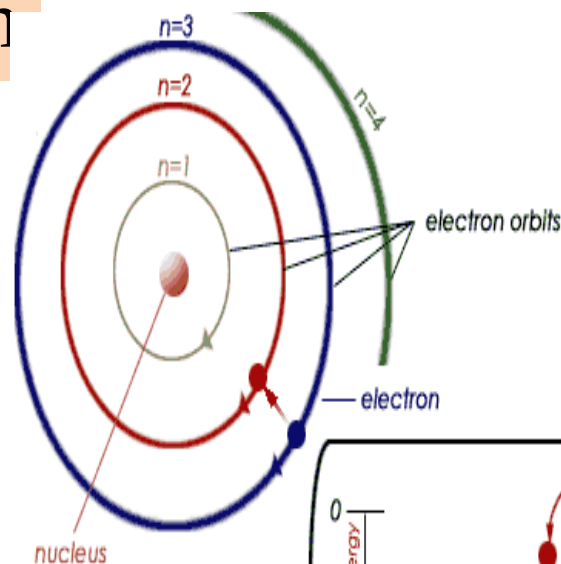
$$h\nu_{nm} = E_n - E_m$$



Emission



Absorption

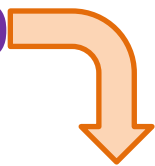


Emission et absorption d'un photon par un atome

Calcul des rayon des orbitales circulaire et les énergies de l'électron de l'atome d'hydrogène sur ces orbites

$$E_n = E_{\text{Pot}} + E_{\text{Cin}} = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_n} + \frac{1}{2} m V_m^2$$

$$\frac{1}{2} m V_n^2 = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (1)$$

$$(1)/(2) \quad m^2 V^2 r^2 = n^2 \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \quad (2)$$


$$m r^2 = n^2 \left(h^2 \epsilon_0 r / \pi q^2 \right) \quad \text{donc} \quad r = n^2 \left(h^2 e_0 / \pi m q^2 \right) \quad (3)$$

$E_T = - (1/8\pi\epsilon_0) e^2/r$, en utilisant la relation (3) on a:

$$E_T = - (m e^4/8\epsilon_0^2 h^2) 1/n^2$$

le rayon et **l'énergie** de l'électron dépendent de nombre entier **n**, ils sont donc quantifiés.

- **Pour n=1** (état fondamental : l'électron occupe l'orbite de rayon r_1 et d'énergie E_1)

$$r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA} \quad (1\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m})$$

$$E_1 = -21,78 \cdot 10^{-19} \text{ j} = -13,6 \text{ eV} \quad (1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ j})$$

- **Pour n = 2** (Premier état excité)

$$r_2 = 4r_1 = 2,116 \text{ \AA} \text{ et } E_2 = E_1/4 = -3,4 \text{ eV}$$

- **Pour n = 3** (Deuxième état excité)

$$r_3 = 9r_1 = 4,761 \text{ \AA} \text{ et } E_3 = -1,51 \text{ eV}$$

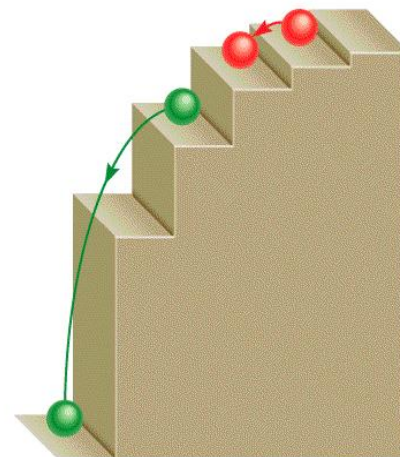
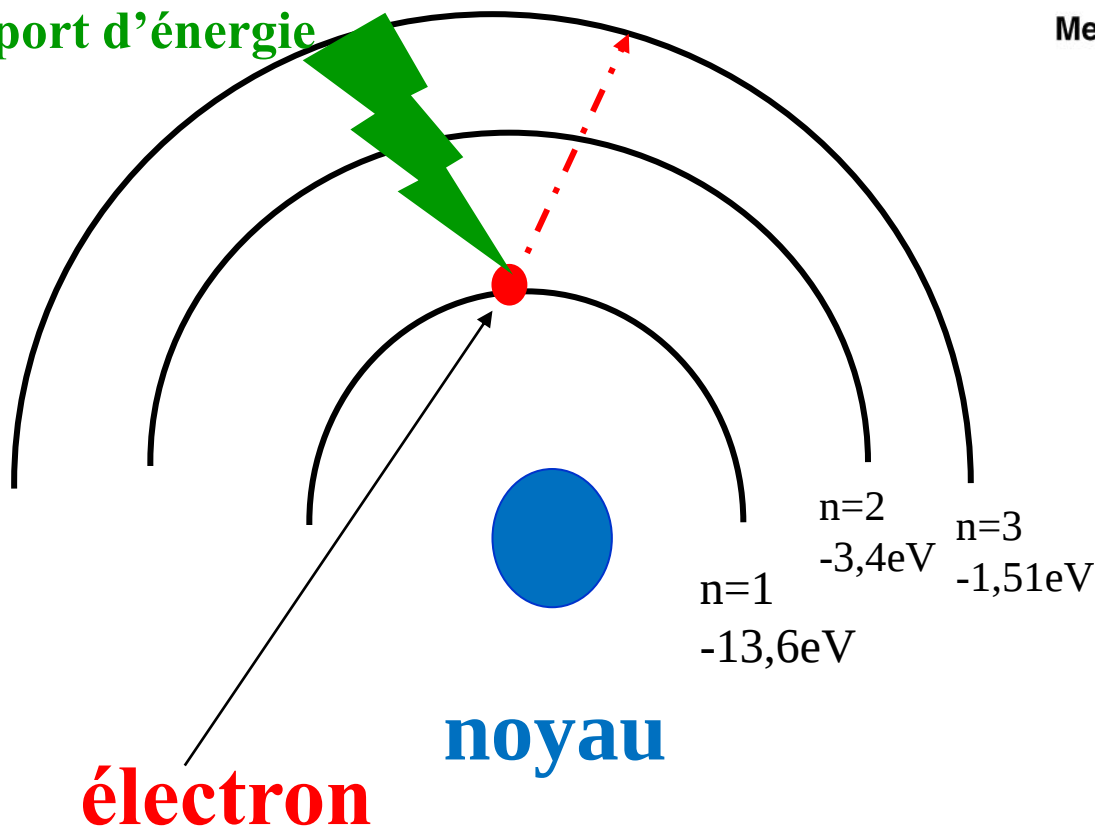
II-3. Spectre d'émission de l'atome l'hydrogène

Imaginons que l'on excite un gaz d'hydrogène par des courants électriques. L'électron gravitant autour du noyau va alors acquérir de l'énergie et va passer sur un niveau **excité** (du niveau $n=1$ (niveau **fondamental**) au niveau $n = 3$ par exemple).

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Apport d'énergie

Mechanical Analogy for the Emission Process



Cas de l'atome

radiations émises

visible

UV

R-X

$E_{\text{photon}} > E_1$

électron libre $E_c = E_{\text{photon}} - E_1$

$E_1 > E_2 > E_3 > E_4 > E_5$

E_1

E_2

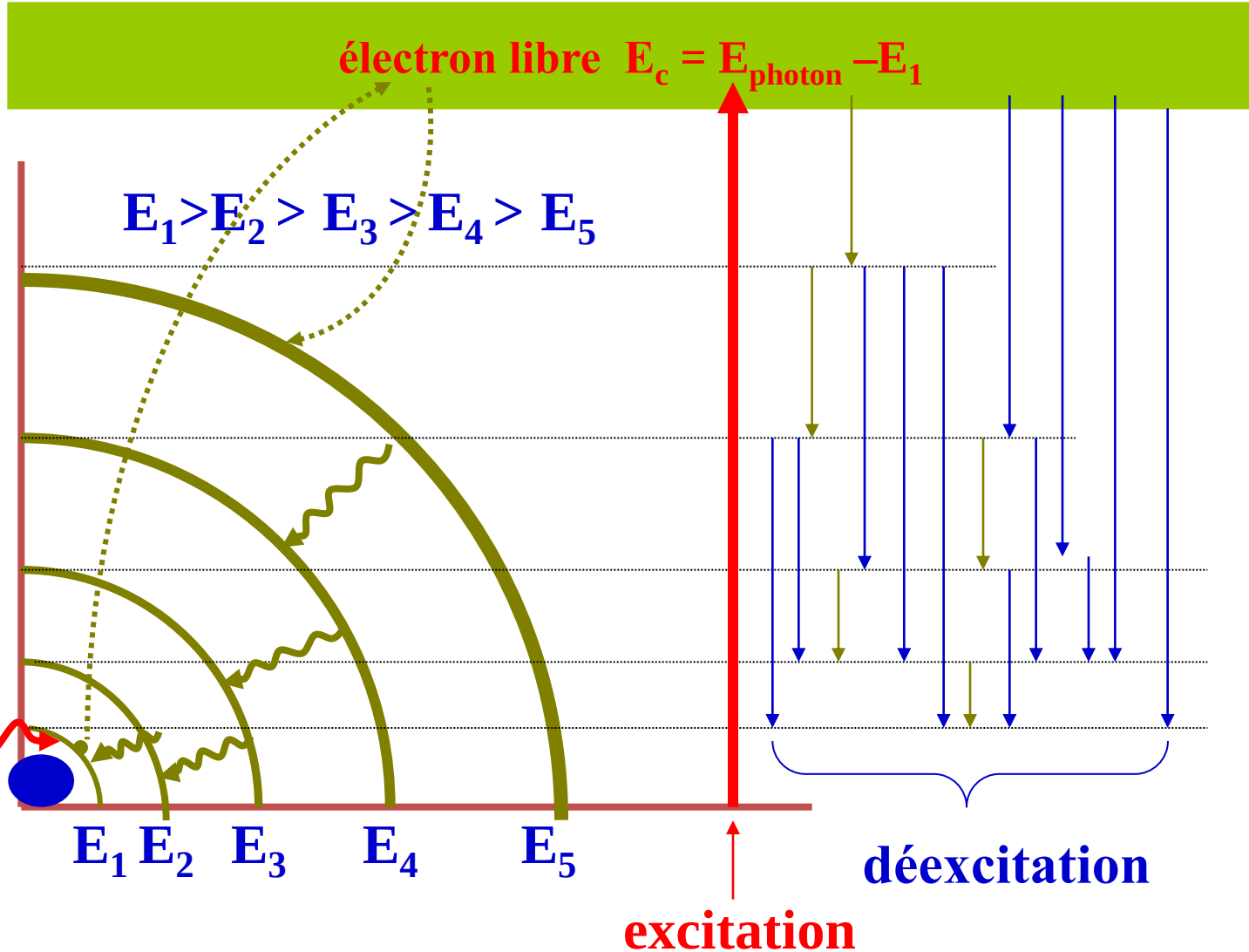
E_3

E_4

E_5

déexcitation

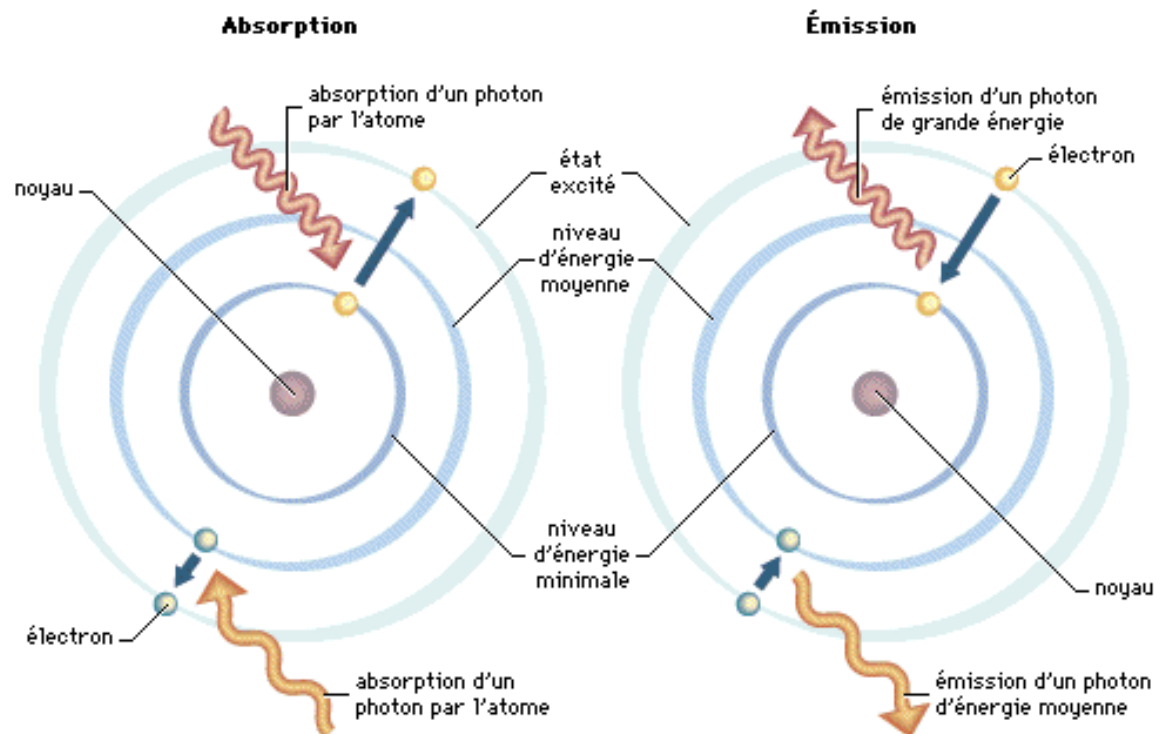
excitation



Un électron ne peut absorber ou libérer de l'énergie c.à.d rayonner qu'en passant d'un niveau (orbite) à un autre.

La quantité d'énergie absorbée ou émise est égale à la différence d'énergie entre les deux niveaux (relation de Planck) :

$$\Delta E = E_{T(f)} - E_{T(i)} = h\nu$$



Un électron ne peut absorber ou libérer de l'énergie c.à.d rayonner qu'en passant d'un niveau (orbite) à un autre.

La quantité d'énergie absorbée ou émise est égale à la différence d'énergie entre les deux niveaux (relation de Planck) :

$$\Delta E = E_{T(f)} - E_{T(i)} = h\nu$$

En tenant compte de l'expression de E_T , donnée auparavant, on obtient : $\Delta E = E_H (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$.

Sachant que $\nu = C/\lambda$ (λ étant la longueur d'onde du rayonnement et C la célérité de la lumière) l'équation précédente donne :

$$1/\lambda = \nu = E_H/hC (1/n_f^2 - 1/n_i^2) = R_H (1/n_f^2 - 1/n_i^2)$$

R_H constante de RYDBERG ($R_H = 10967758 \text{m}^{-1}$)

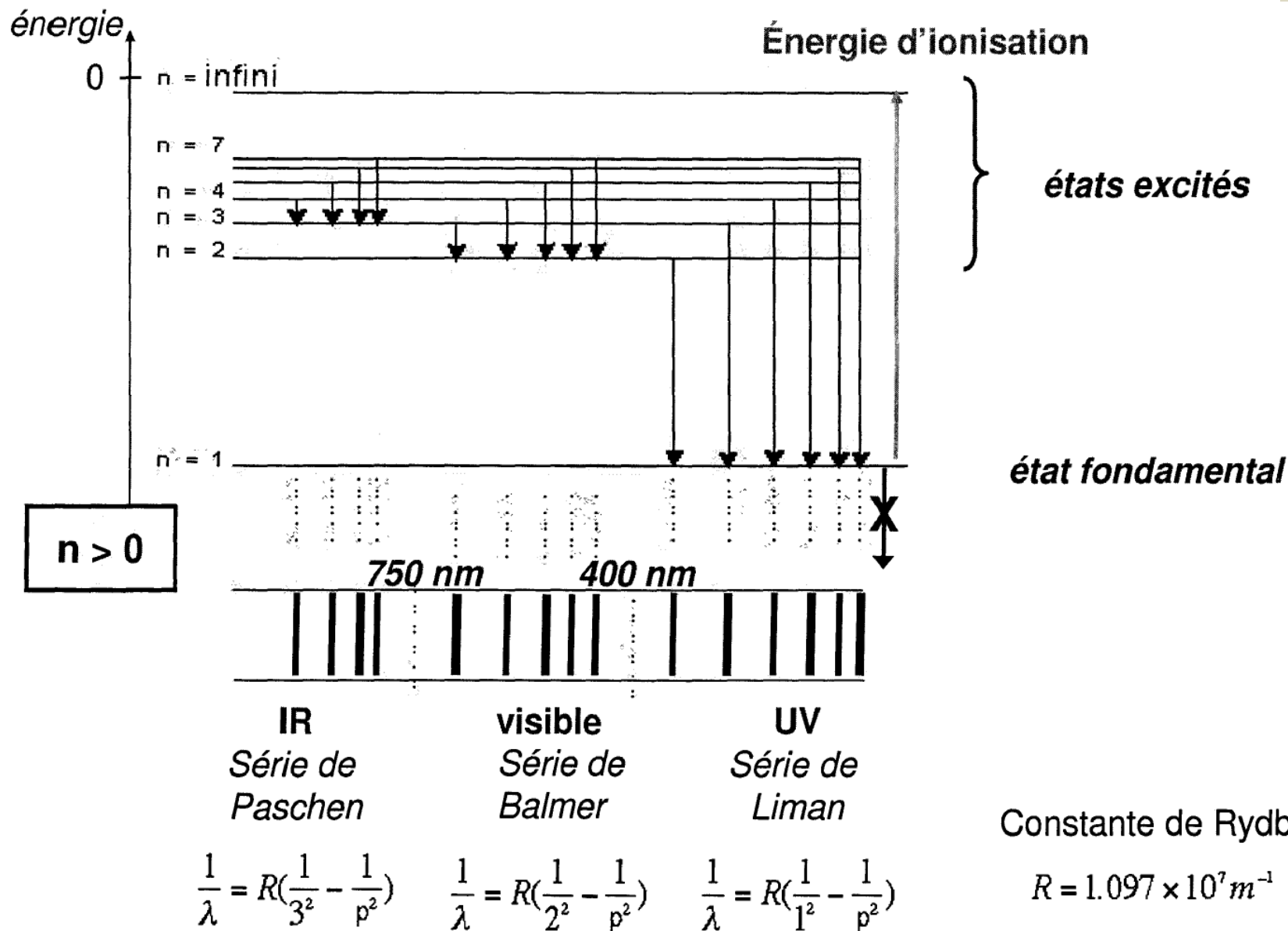
E_H est l'énergie à fournir à l'électron pour l'amener du niveau fondamental au dernier niveau excité qui correspond à une valeur infinie de n . Cette énergie est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène, c'est une grandeur accessible expérimentalement dont la valeur est $E_H = -13,6 \text{ eV}$.

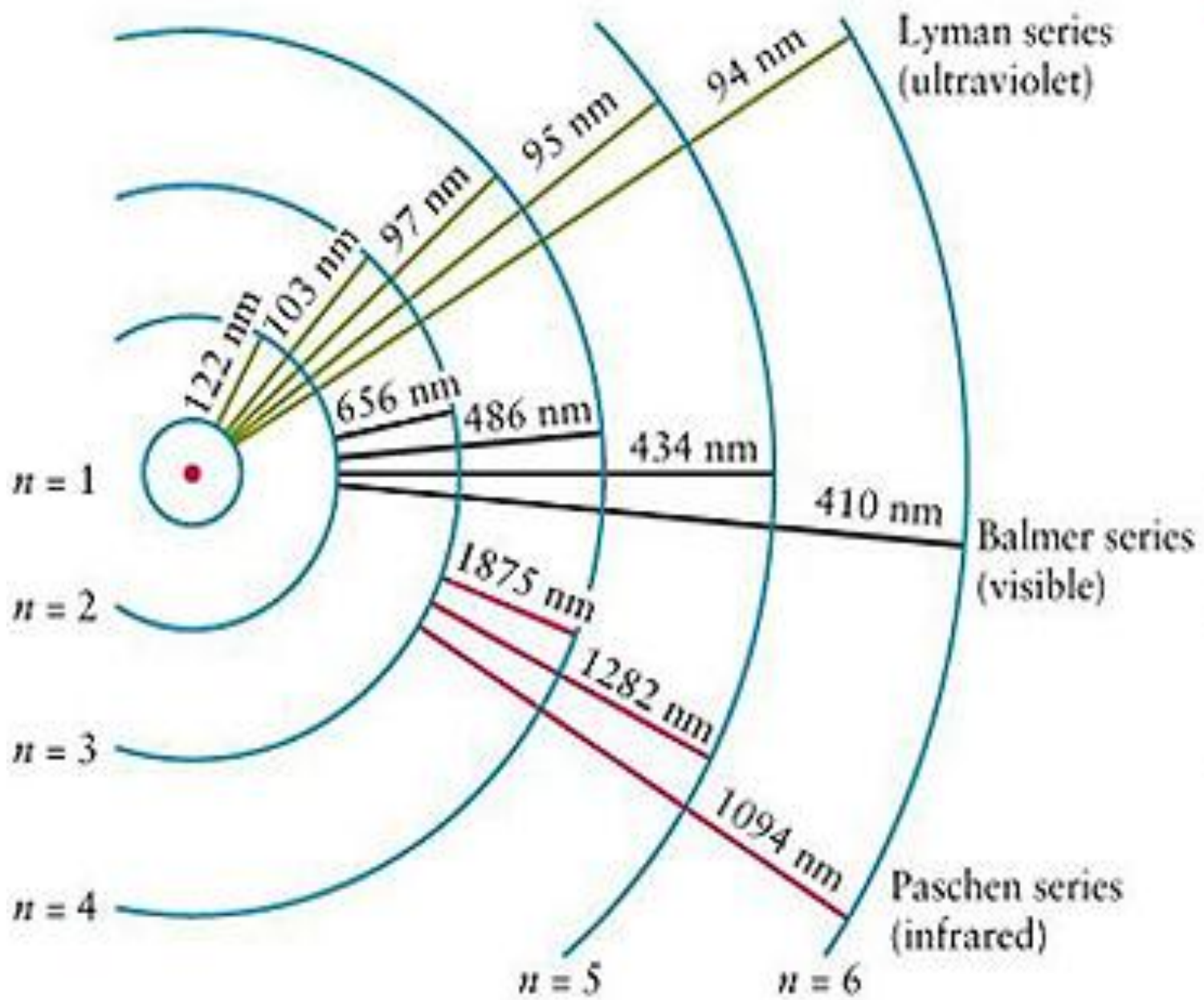
Ce modèle a été étendu aux hydrogénoïdes (ion à 1 électron)

$$E_n = -13.6 Z^2 / n^2.$$

En étudiant plus profondément l'atome et ses électrons on s'est rendu compte que l'organisation n'était pas aussi simple: dans les couches il y aurait des sous-couches, les trajectoires des électrons ne seraient pas si circulaires que ça...Ainsi est né **la mécanique quantique**.

Cas de l'atome d'hydrogène



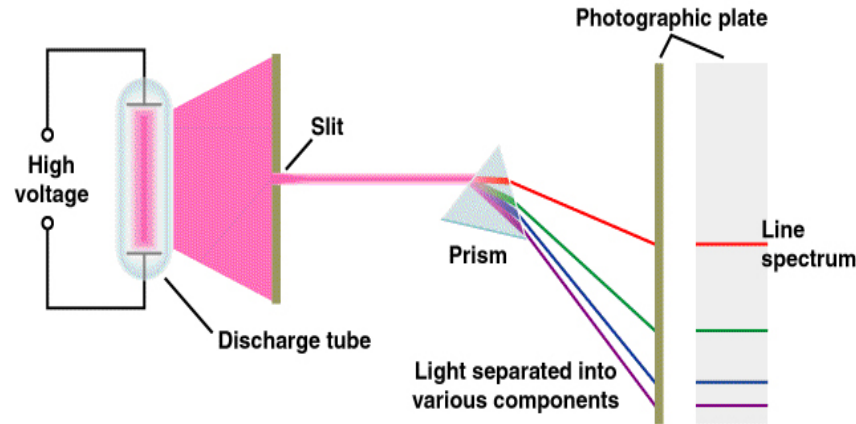


Le modèle de l'atome de Bohr

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

$\hbar$

Experimental Arrangement Used to Study Emission Spectra



- on peut observer le spectre d'émission soit en chauffant la substance à très haute température ou en la frappant avec un faisceau d'électrons énergétiques
- une phase condensée va typiquement avoir un spectre d'émission continu
- cependant, des atomes à l'état gazeux émettent plutôt la lumière à des longueurs d'onde spécifiques (un spectre de raies)

$\hbar$

Limites du modèle de Bohr

- Le spectre de substances plus complexes (avec plusieurs raies) ne peut être expliqué par ce modèle.
- Nouvelle branche de la physique: les ondes, les statistiques et les probabilités entrent en jeu!



Modèle de Sommerfeld et Wilson : Orbites elliptiques



Comment traite les atomes polyélectronique

4- Conclusion

**La physique quantique est domaine primordial
pour résoudre tous les problèmes de la science à
l'échelle microscopique**

III. Limite de validité de la physique classique

Critère d'application de la mécanique quantique

$$[h] = [\textit{temps}][\textit{énergie}] = [\textit{longueur}][\textit{quantité de mouvement}] = M L^2 T^{-1}$$

En pratique, on utilise le plus souvent la constante $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$A \gg \hbar \quad \Rightarrow \quad \text{Mécanique classique}$

$A \ll \hbar \quad \Rightarrow \quad \text{Mécanique quantique}$

2- Exemples

i) Montre

Une montre ordinaire a des parties mobiles de taille et masse typiques : une longueur $L \approx 10^{-3}$ mètre, une masse $M \approx 10^{-4}$ kg, et un temps typique T qui est la seconde.

L'action caractéristique est donc $A = ML^2T^{-1} \approx 10^{24} \hbar \gg \hbar$. La mécanique classique est donc suffisante !! Et les horlogers n'ont pas besoin de connaître la mécanique quantique pour fabriquer et réparer les montres.

ii) Atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène a une énergie d'ionisation $E = 13,6 \text{ eV}$ et un spectre caractérisé par une longueur d'onde minimale de l'ordre de $10^3 \text{ \AA}$, soit une pulsation maximale $\omega \approx 2.1016 \text{ s}^{-1}$. L'action caractéristique est : $A = \frac{E}{\omega} = \hbar$.

On en conclut que l'atome d'hydrogène, et donc tous les atomes, ne peuvent être appréhendés sans recours à la mécanique quantique.

iii) Noyau atomique

L'énergie de liaison par nucléon dans un noyau ordinaire est de l'ordre de 8 MeV, par ailleurs, le rayon du noyau est donné par $r = A^{1/3} r_0$ (A étant le nombre de masse et $r_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-15}$ m). En prenant la masse du nucléon (proton ou neutron) $M = 1,6 \cdot 10^{-27}$ kg, on forme une action caractéristique valant $\sqrt{ME} r_0 \approx 0,5 \hbar$; la physique nucléaire est donc nécessairement quantique.

3- Systèmes d'unités de la physique quantique

 $\hbar$

$$\hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

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

$$m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

 $\hbar$

3- 1- Unités de la physique quantique

i) Unité de masse

ii) Unité de longueur

iii) Unité de temps

iv) Unité d'énergie

3- 2- Unités de Planck

$$L_P = \left(\frac{\hbar G}{C^3}\right)^{1/2} = 1,6 \times 10^{-35} \text{ m} \quad : \quad \text{Longueur de Planck}$$

$$T_P = \frac{L_P}{C} = \left(\frac{\hbar G}{C^5}\right)^{1/2} = 5,4 \times 10^{-44} \text{ s} \quad : \quad \text{Temps de Planck}$$

$$M_P = \left(\frac{\hbar C}{G}\right)^{1/2} = 2,2 \times 10^{-8} \text{ kg} \quad : \quad \text{Masse de Planck}$$

La physique quantique est domaine très vaste et primordial pour résoudre tous les problèmes de la science à l'échelle microscopique.

Atomes de Bohr hydrogénoïdes

Considérez un atome hydrogénoïde de Ti^{21+} , c.-à-d. un atome de titane dont 21 de ses 22 électrons ont été retirés. Pour l'électron, prenez $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$. Constantes utiles: $ke^2 = 1.44 \text{ eV}\cdot\text{nm}$ et $hc = 1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}$.

- A. Quel est le rayon de l'orbite de l'électron dans l'état $n = 3$?
- B. Quelle est l'énergie de l'état $n = 3$, en eV?
- C. Quelle est la longueur d'onde du photon émis au cours de la transition du niveau $n = 3$ au niveau $n = 1$ de cet atome?

EXERCICE N° : Effet Compton

1. Un photon d'énergie $E = h\nu$ est diffusé par effet Compton sur un électron au repos.

Déterminer en fonction de E , $m_e c^2$ et θ (angle entre les directions des photons diffusé et incident) l'énergie cinétique E_C de l'électron diffusé. Quelle est sa valeur maximale (en MeV) ? Quelle est alors la direction de l'électron diffusé ?

2. Déterminer le décalage en longueur d'onde entre les rayonnements diffusé et incident :

$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda$ en fonction de m_e , c et u . Calculer la longueur d'onde de Compton de l'électron.

Données : $E = 2 \text{ MeV}$; $m_e c^2 = 0,51 \text{ MeV}$