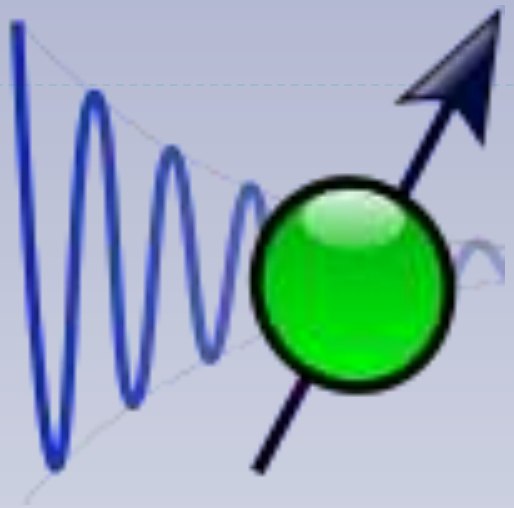


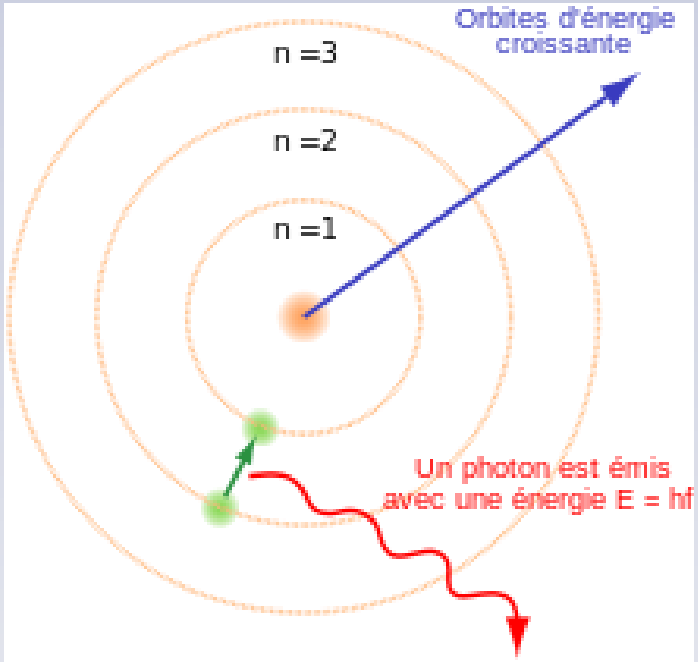
Mécanique Quantique
2ème partie

La physique du monde submicroscopique

Sept. 2014

Le modèle de Bohr-Sommerfeld

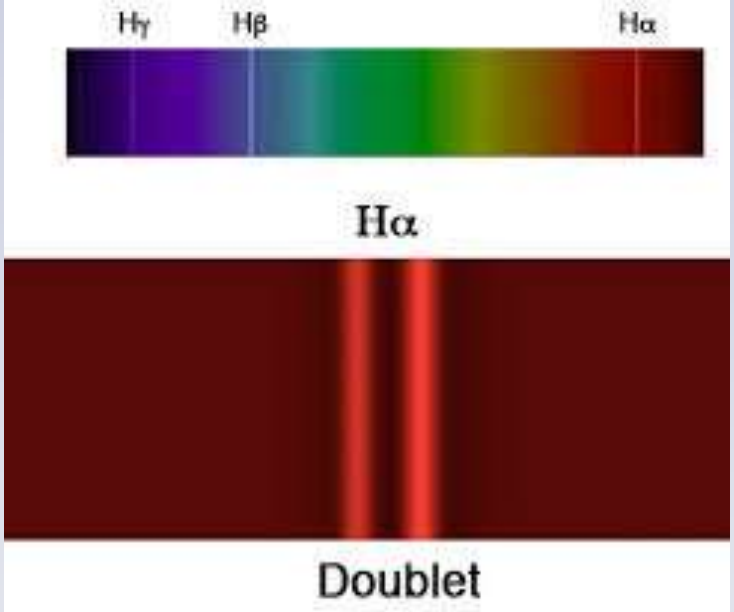
- Dans le modèle atomique de Bohr, les différentes orbites sont caractérisées par le nombre **n**, appelé **nombre quantique principal** (caractérise les **niveaux d'énergie**).



$$E_n(eV) = -\frac{13,6}{n^2}$$

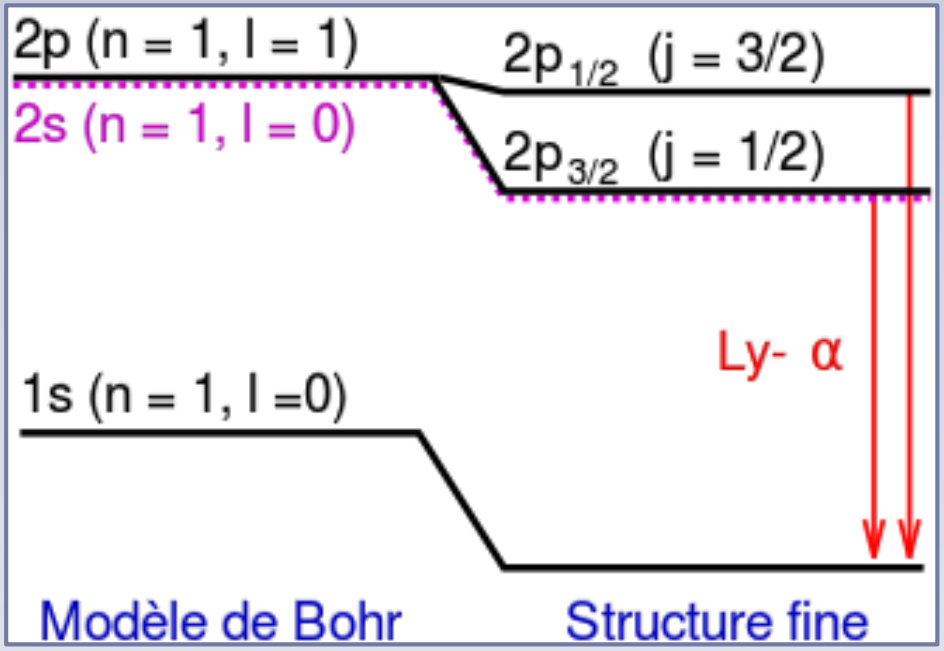
Le modèle de Bohr-Sommerfeld

- Mais le modèle de Bohr n'explique pas tout, par ex. la **structure fine** des raies du spectre de l'hydrogène:
  - C'est un dédoublement des raies spectrales, observé avec un spectromètre suffisamment puissant.



Le modèle de Bohr-Sommerfeld

- Les 2 sous-niveaux sont confondus dans le modèle de Bohr, mais la structure fine les dédouble, donnant 2 raies très proches.



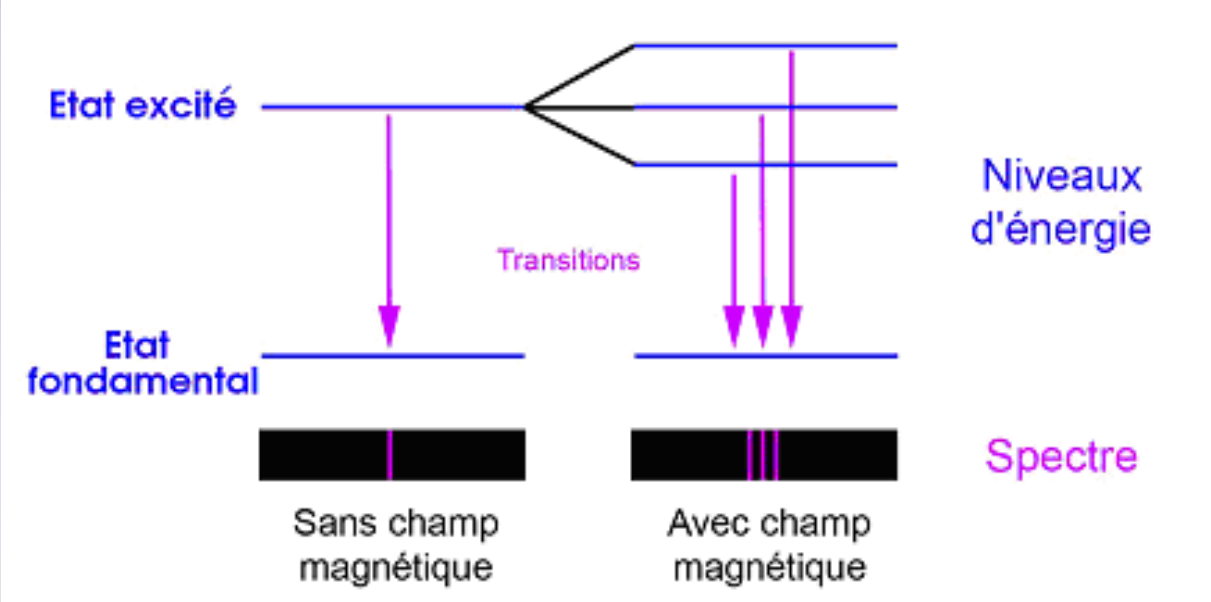
Le modèle de Bohr-Sommerfeld

- En 1916, A. Sommerfeld apporte des corrections au modèle de Bohr:
  - Il introduit un nombre quantique supplémentaire, **l**, le nombre quantique **orbital**.
  - Il applique la **relativité restreinte** au mouvement de l'électron.

- Il arrive ainsi à rendre compte de la structure fine et donne les longueurs d'onde des raies, en très bon accord avec l'expérience.

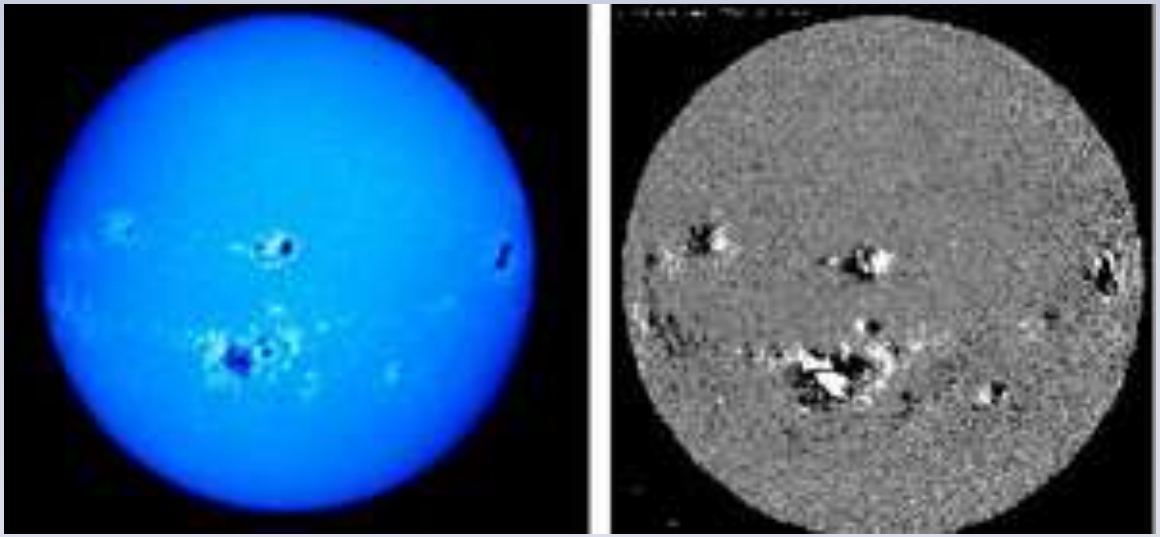
L'effet Zeeman

- **L'effet Zeeman**, « dédouble » les niveaux d'énergie sous l'influence d'un **champ magnétique externe.**
- Pour l'expliquer, il a été nécessaire d'introduire un **3ème nombre quantique, m_l,** le nombre quantique **magnétique.**



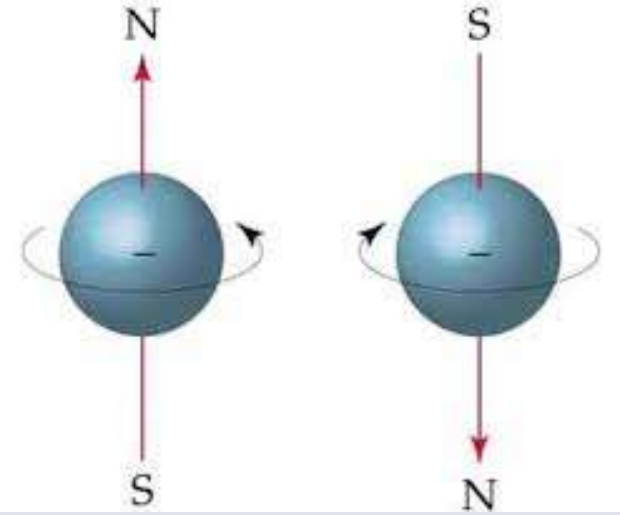
Mesure des champs magnétiques intenses

- En astrophysique, on utilise l'effet Zeeman pour mesurer des **champs magnétiques intenses** par ex. à la surface du soleil ou d'autres étoiles.



Le nombre quantique de spin

- En 1925, W. Pauli, pour rendre compte de sous-niveaux apparaissant dans un champ magnétique **très intense,** introduit un **4ème nombre quantique, m_s,** le **nombre quantique de spin.**
- **m_s** ne peut prendre que 2 valeurs pour l'électron: **+1/2 et -1/2**



La structure hyperfine

- Il existe un **clivage de l'état fondamental** de l'atome d'hydrogène dû au **couplage** entre le moment cinétique (spin) de l'électron et celui du proton (**structure hyperfine**).
- La différence d'énergie est très faible ($5{,}8.10^{-6}$ eV) mais peut entraîner une **transition** entre les 2 sous-niveaux de l'état fondamental.
- C'est la structure hyperfine qui est responsable de la **raie 21 cm de l'hydrogène.**

- Cette transition est **très peu probable** (1 en plusieurs millions d'années) mais il y a un nombre considérable d'atomes d'H dans l'Univers et particulièrement dans le milieu interstellaire.

Les nombres quantiques

- **n, nombre quantique principal,** est un entier strictement positif, n = 1,2,3,…
  - Il correspond aux **niveaux d'énergie** de l'atome et aux **couches** électroniques: K, L, M, N, O, ..

- **l, nombre quantique orbital** (ou secondaire), est un entier positif ou nul, avec **l < n.**
  Ex. pour n=2, l =0 ou1.
  - Il correspond aux **sous-couches** s,p,d,f…

Les nombres quantiques

- **m_l , nombre quantique magnétique,** est un entier relatif compris entre **-l et +l .**
  Ex. pour **l**=2, **m_l** = -2, -1, 0 ,+1,+2
  - Il correspond aux **orbitales atomiques** 1s, 2s, 2p, 3s, 3p,…

- **m_s , nombre quantique de spin,**
  - Il ne peut prendre que 2 valeurs pour l'électron: +1/2 et -1/2.

Le principe d'exclusion de Pauli

- En 1924, Pauli énonce son fameux **principe d'exclusion:**

  - 2 électrons d'un même atome ne peuvent avoir les mêmes nombres quantiques.

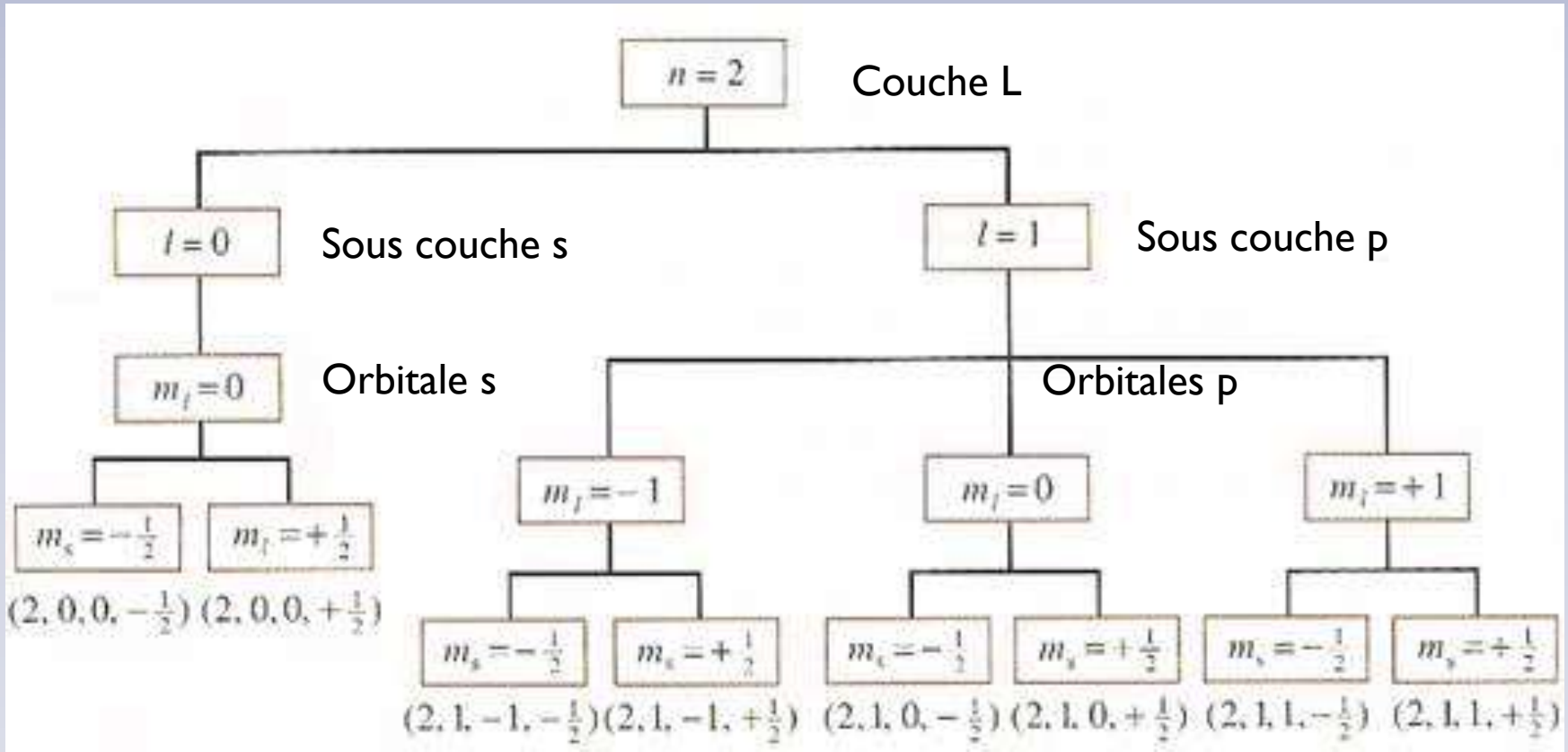
- Il explique ainsi la répartition des électrons sur les couches externes des éléments chimiques, comme on va le voir.

Le tableau périodique des éléments

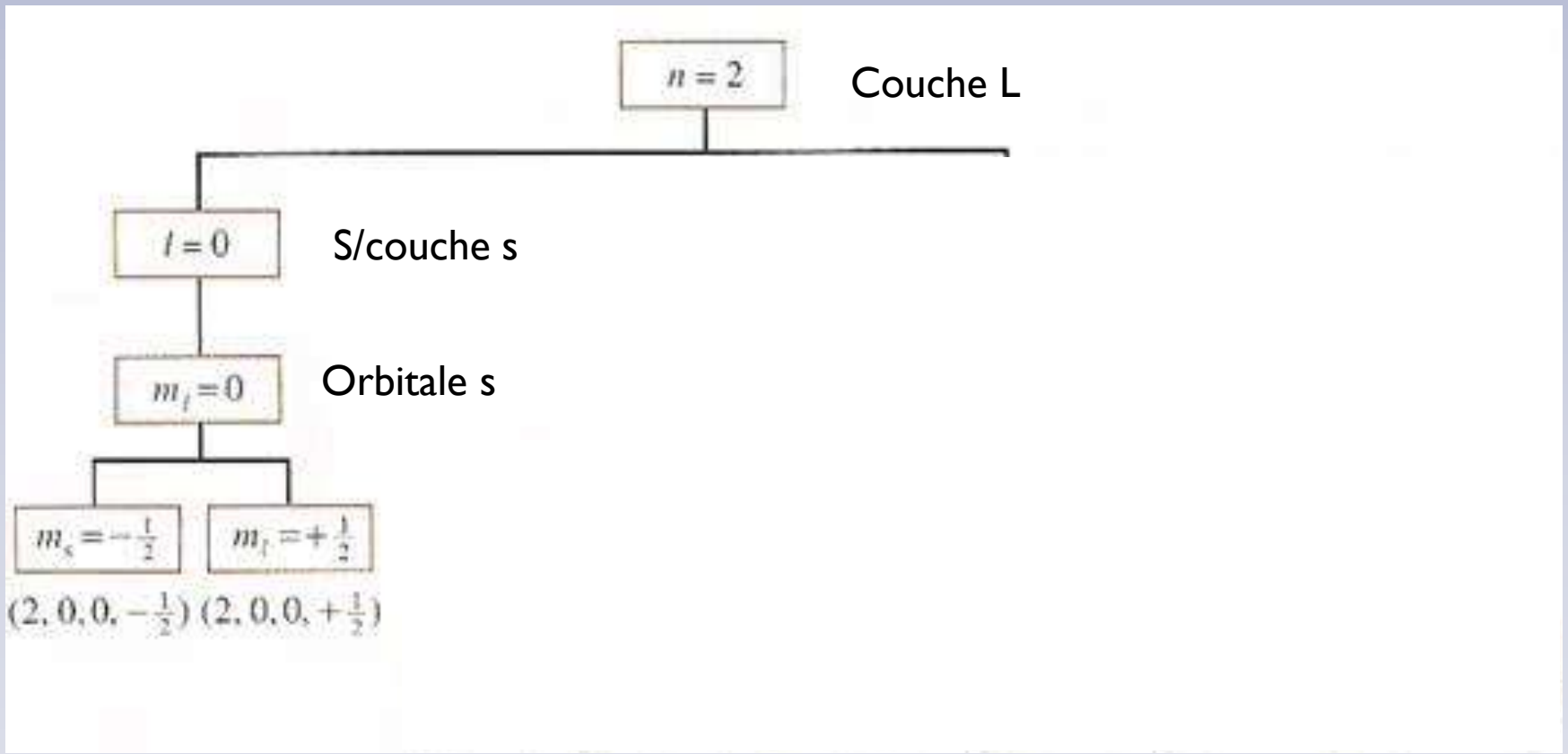
!	Colonne des **alcalins**	Colonne des **alcalino-terreux**	.	.	.	Colonne des **chalcogènes**	Colonne des **halogènes**	Colonne des **gaz rares** (noble gases en anglais)
Première période. n = 1	**H**	.	.	.	.	.	.	**He**
Structure électronique	$(K)^1$	.	.	.	.	.	.	$(K)^2$
Deuxième période. n = 2	**Li**	**Be**	**B**	**C**	**N**	**O**	**F**	**Ne**
Structure électronique	$(K)^2(L)^1$	$(K)^2(L)^2$	$(K)^2(L)^3$	$(K)^2(L)^4$	$(K)^2(L)^5$	$(K)^2(L)^6$	$(K)^2(L)^7$	$(K)^2(L)^8$
Troisième période. n = 3	**Na**	**Mg**	**Al**	**Si**	**P**	**S**	**Cl**	**Ar**
Structure électronique	$(K)^2(L)^8(M)^1$	$(K)^2(L)^8(M)^2$	$(K)^2(L)^8(M)^3$	$(K)^2(L)^8(M)^4$	$(K)^2(L)^8(M)^5$	$(K)^2(L)^8(M)^6$	$(K)^2(L)^8(M)^7$	$(K)^2(L)^8(M)^8$
Quatrième période. n = 4	**K**	**Ca**	.	.	.	.	.	.
Structure électronique	$(K)^2(L)^8(M)^8(N)^1$	$(K)^2(L)^8(M)^8(N)^2$	.	.	.	.	.	.

Nombre maximal d'électrons sur une couche n : $2n^2$

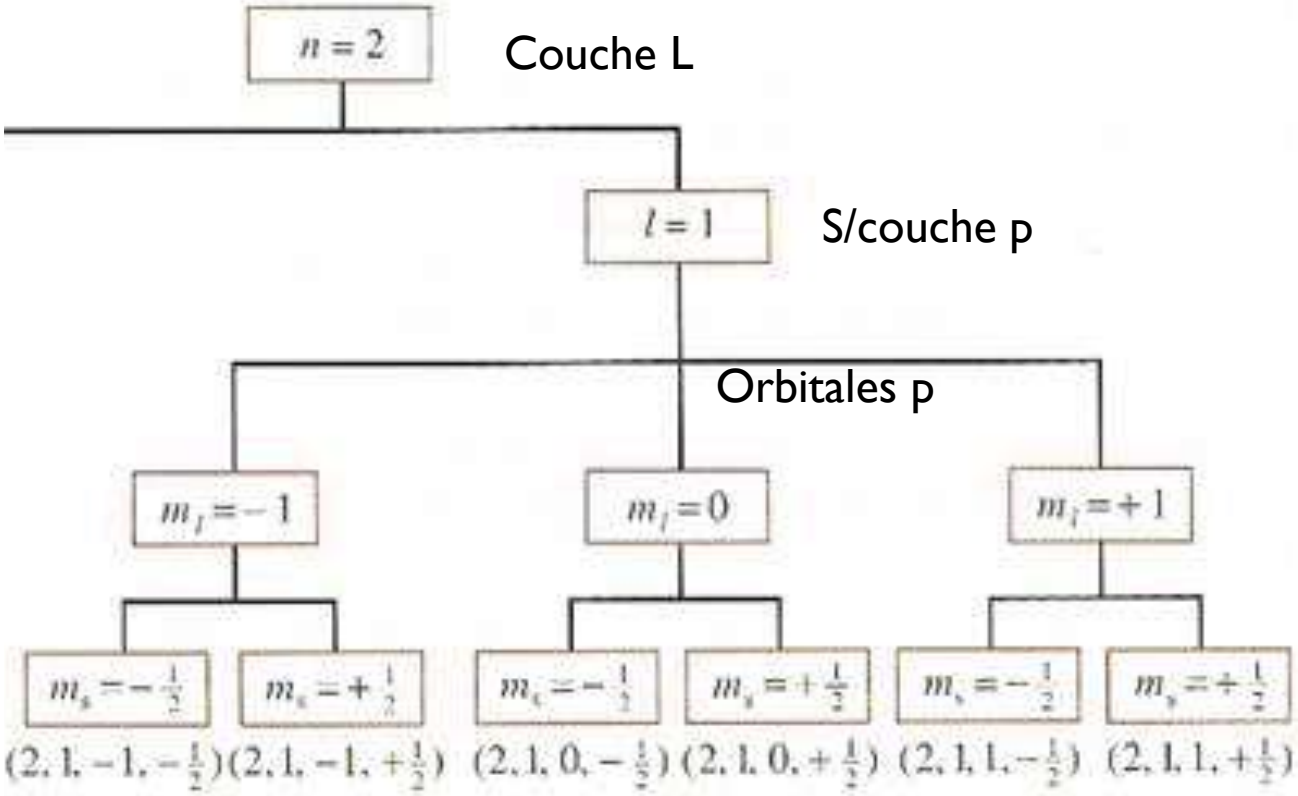
Les couches électroniques



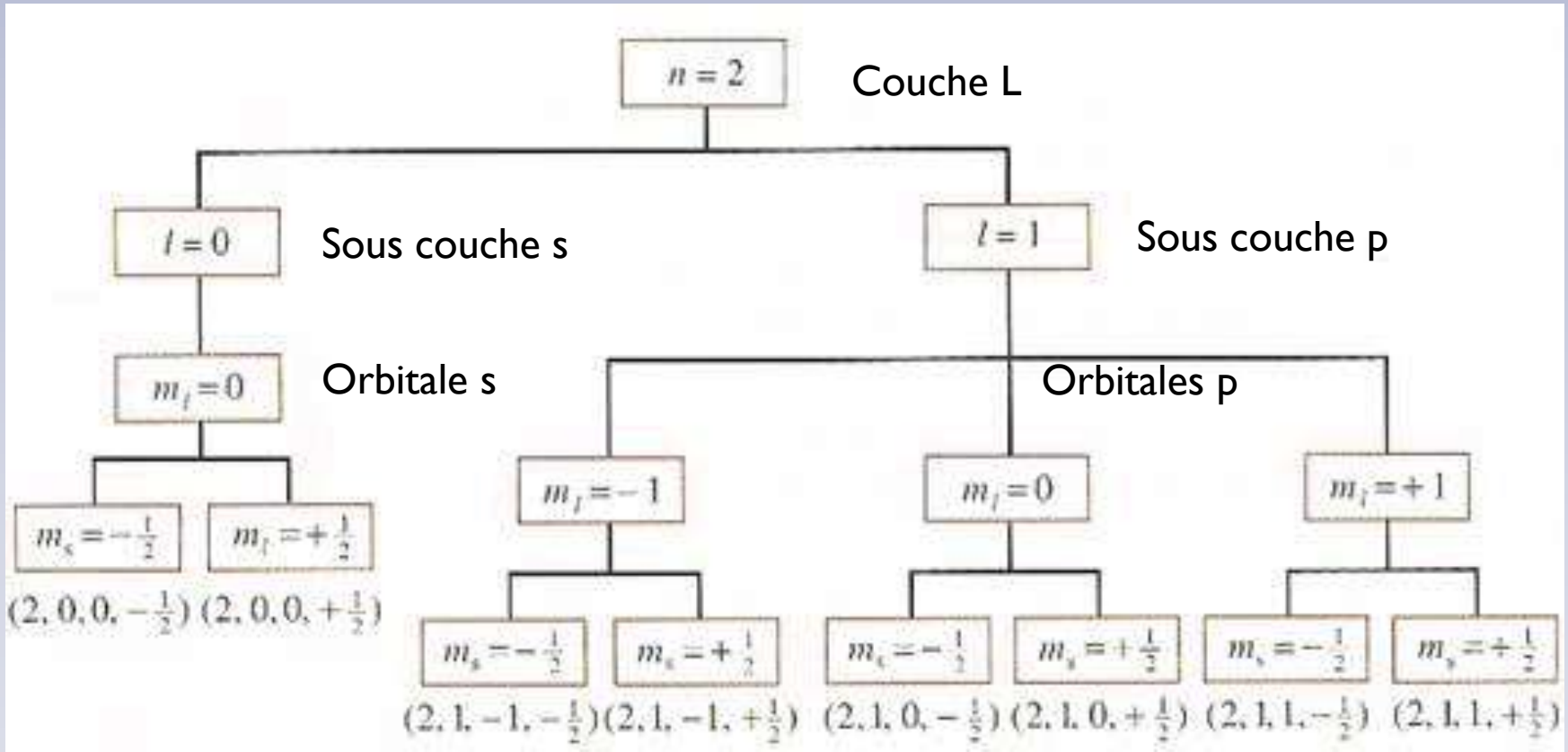
Les couches électroniques



Les couches électroniques

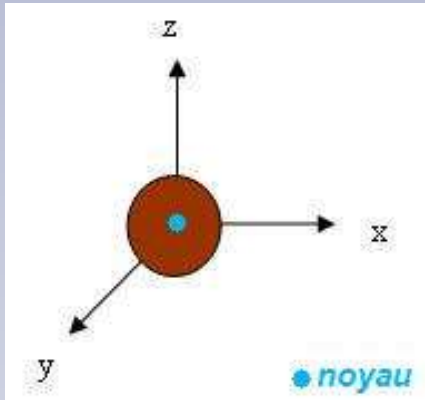


Les couches électroniques

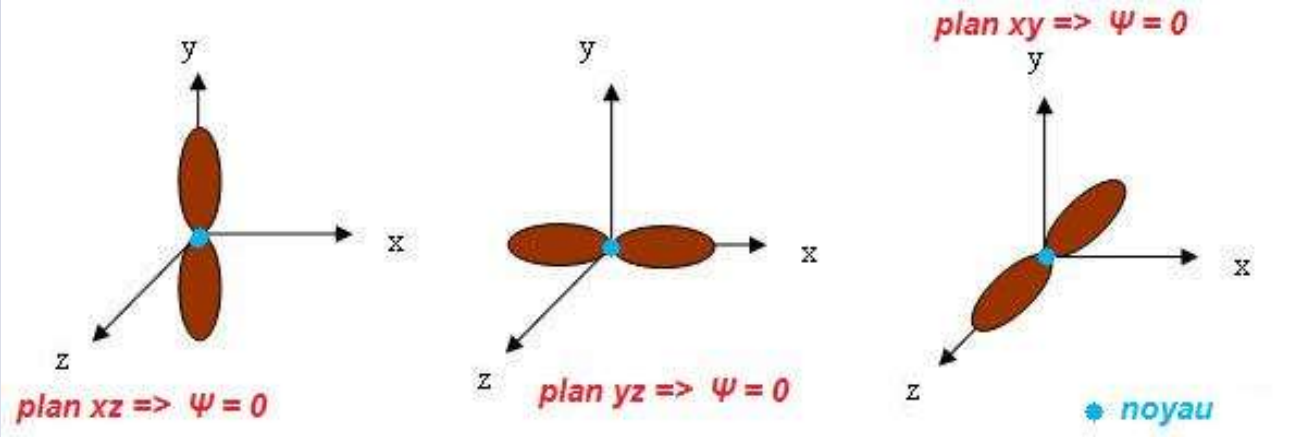


Formule électronique du Néon (Ne): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$

Les orbitales



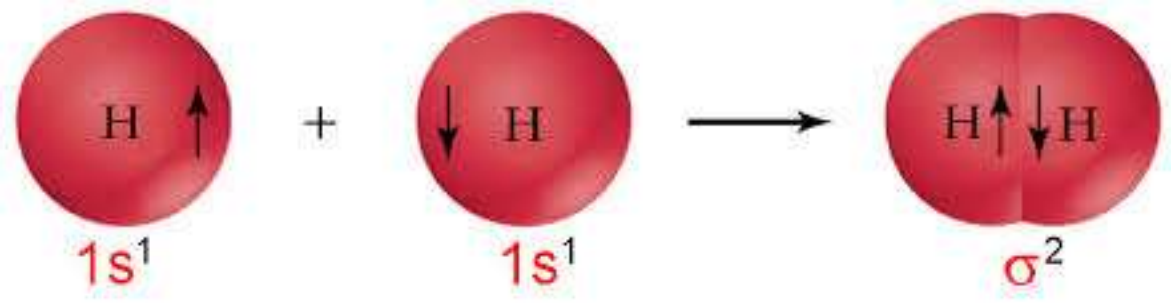
Orbitale s



Orbitales p

Les orbitales moléculaires

- Les orbitales ont une grande importance en chimie (permettent de mieux connaître la liaison chimique).
- Pour 2 atomes partageant un électron de valence, l'électron 1 a une certaine probabilité de se trouver sur l'atome 2, et inversement.



Le principe d'incertitude d'Heisenberg

- En 1927, W. Heisenberg formule son **principe d'incertitude ou d'indétermination:**

  - on ne peut pas connaître **simultanément** avec une **grande précision** la position et la vitesse d'une particule:

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

hbarre = h/2π

Le principe d'incertitude d'Heisenberg

- Si on fait le calcul pour un électron, on trouve que si on veut connaître sa position avec une précision de **0,1 nm**, cela entraîne une **incertitude sur sa vitesse** de l'ordre de **1000 km/s!**

- Le **sens profond** du principe d'incertitude est le suivant:
  - L'électron n'est pas un objet au sens classique du terme, en ce sens **qu'il n'a pas** une position et une vitesse déterminées.
  - Le principe d'incertitude ne découle pas d'une **limitation de la mécanique quantique**, mais d'une caractéristique fondamentale des « objets » quantiques.

Les postulats de la mécanique quantique

1) L'état d'un système physique à l'instant t est totalement décrit par un **vecteur d'état** noté $|\psi(r, t)\rangle$, appartenant à l'espace des états (espace de Hilbert).

2) A toute **grandeur physique** (position, impulsion, énergie,…), correspond un **opérateur (observable)** agissant sur les vecteurs de cet espace.

3) La mesure d'une grandeur physique représentée par **l'observable A** ne peut fournir que l'une des **valeurs propres** de **A.**

Le principe de superposition

- Si **a** et **b** sont 2 états possibles (dans l'espace de Hilbert) pour une particule, alors **l'état a+b est lui aussi un état possible** de la particule (état superposé).

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

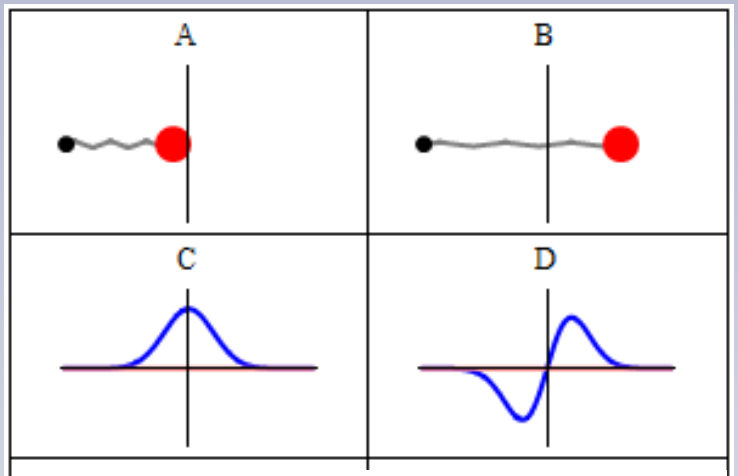
- La particule est décrite par un vecteur d'état où elle est à la fois dans un certain état et dans l'état opposé.
- Mais, dans ce cas, **tout ce que peut dire la MQ** c'est que, si on fait la mesure sur un grand nombre de particules, on trouvera dans 50% des cas, |+> et dans 50% des cas, |->.

La fonction d'onde

- La fonction d'onde ψ (r, t) est la **représentation de l'état quantique** $|\psi$ (r, t)>) du système étudié.
- Elle contient **toute l'information disponible** sur ce système (ex. un électron).

- La fonction d'onde est une « amplitude » de probabilité:
  - $||\psi||^2$ donne la **probabilité** de trouver tel ou tel résultat lors de la **mesure d'une grandeur physique** du système étudié (position, vitesse, impulsion, etc...)

La fonction d’onde



Fonction d’onde d’un oscillateur harmonique

L'équation de Schrödinger

- Suite aux travaux de de Broglie, Schrödinger établit l'équation décrivant **l'évolution dans le temps** de la fonction d'onde.
  - Cette équation est appelée **équation d'onde** :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H}\psi$$

- H est **l'opérateur hamiltonien,** correspondant à **l'énergie totale** (cinétique + potentielle) du système décrit par la fonction d'onde ψ.

L'équation de Schrödinger

- Ce qui conduit à l'équation de Schrödinger pour l'électron dans le champ électrique créé par le noyau:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t)$$

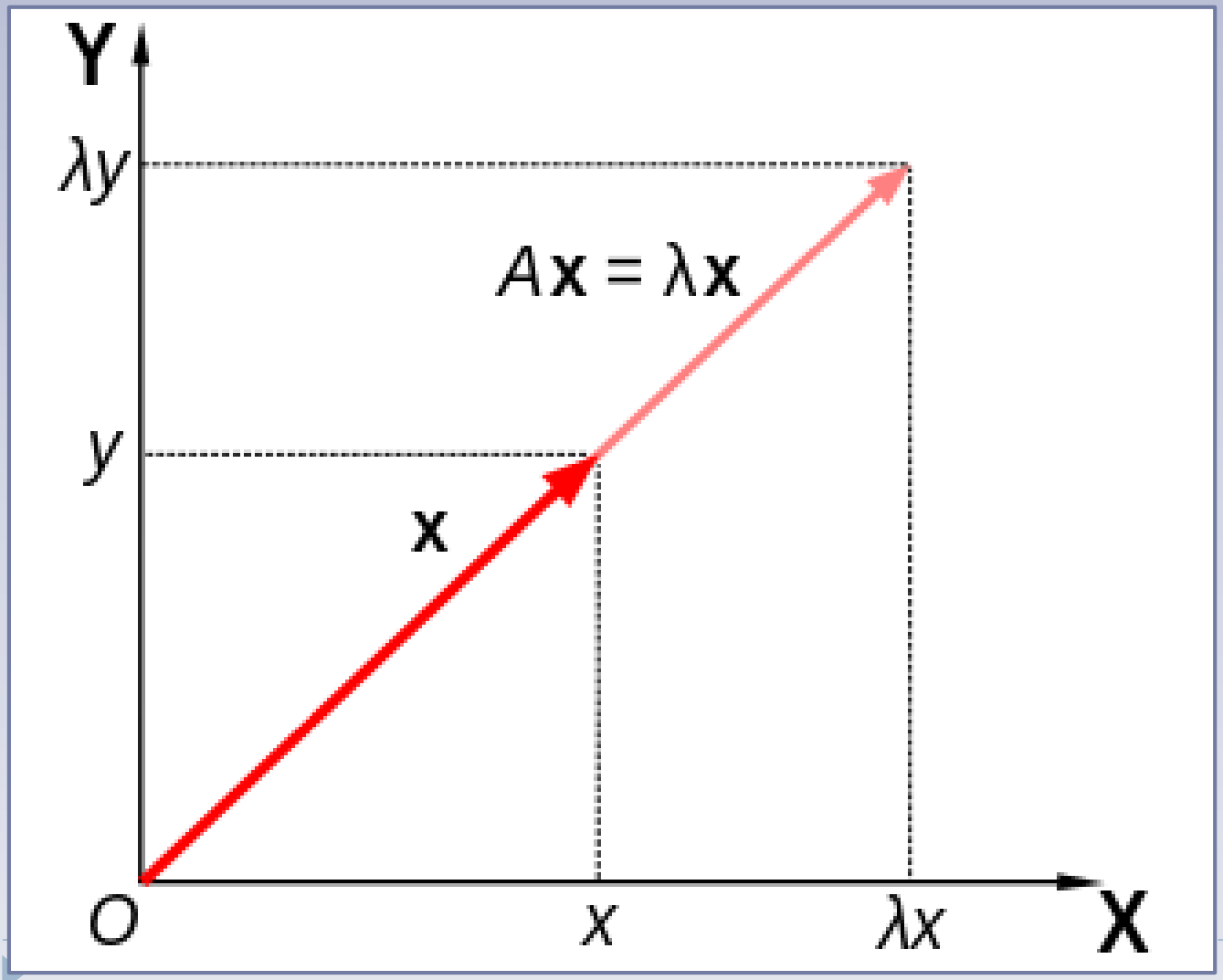
L'équation de Schrödinger

- Pour les **états stationnaires** (états à **énergie constante),** l'hamiltonien ne **dépend pas du temps**, et l'équation de Schrödinger s'écrit de manière simple:

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r})$$

- C'est ce qu'on appelle une **équation aux valeurs propres**:
  - La mesure de l'énergie ne peut donner que l'une des **valeurs propres** de **H** (une des E_n).

L'équation de Schrödinger

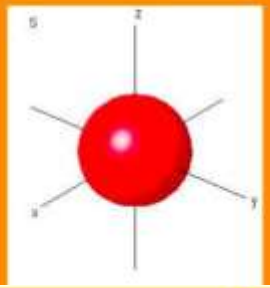
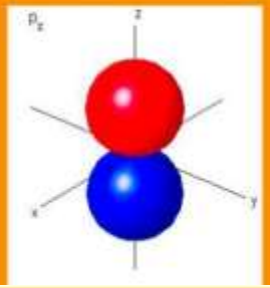
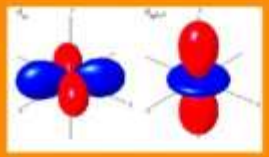


L'équation de Schrödinger

- L'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène **se résout exactement**.

- Elle permet:
  - de retrouver les **niveaux d'énergie** (E_n) calculés par Bohr
  - de calculer les **orbitales** telles qu'on les a vues précédemment.
  - les orbitales représentent la **probabilité de présence** de l'électron autour du noyau

L'équation de Schrödinger

ℓ	0	1	2	3
Symbole de l'OA	s	p	d	f
				

n	1	2				3								
l	0	0	1	1	1	0	1	1	1	2	2	2	2	2
m	0	0	1	0	-1	0	1	0	-1	2	1	0	-1	-2
O.A.	1s	2s	$2p_x$	$2p_z$	$2p_y$	3s	$3p_x$	$3p_z$	$3p_y$	$3d_{x^2-y^2}$	$3d_{zx}$	$3d_{z^2}$	$3d_{yz}$	$3d_{xy}$

L'interprétation de Copenhague et le problème de la mesure

L'interprétation de Copenhague

- D'après l'interprétation de Copenhague, soutenue par N. Bohr, la mécanique quantique ne peut donner que des **probabilités**, si l'on fait telle ou telle mesure, de trouver tel ou tel résultat.

- De plus, si lors d'une mesure, on trouve le résultat a, **on ne peut pas dire que la propriété mesurée avait déjà la valeur a avant la mesure.**
- Dans le cas où la particule est représentée par un **état superposé a+b**, c'est l'opération de mesure qui va la faire apparaître dans l'état a ou dans l'état b.
  Avant la mesure, son état n'est pas défini.

La réduction du « paquet d'ondes »

- La fonction d'onde contient implicitement **toutes les possibilités** dont elle donne les probabilités.
- Mais l'opération de mesure ne fait apparaître qu'**une seule de ces possibilités.**

- Si on mesure la position d'un électron par ex.:
- la **fonction d'onde qui le décrivait avant la mesure** était **étalée** sur un certain volume d'espace (pas de position précise),
- elle est **brutalement réduite** car l'électron est détecté dans une zone restreinte de l'espace.
- On dit qu'il y a **« réduction du paquet d'ondes ».**

La décohérence

- La théorie la plus reconnue aujourd'hui pour expliquer la non-observation d'états superposés ou la « réduction du paquet d'ondes » est celle de la **décohérence.**

- Un système quantique **n'est pas isolé mais couplé à son environnement**, qui possède un nombre très élevé de degrés de liberté.
- Chaque interaction « **déphase** » les fonctions d'onde des états les unes par rapport aux autres. Ce déphasage provoque rapidement la disparition d'états superposés, par ex., dans l'air, en moins de 10^{-30} s.

Pour terminer…

L'évolution de la mécanique quantique: la théorie quantique des champs

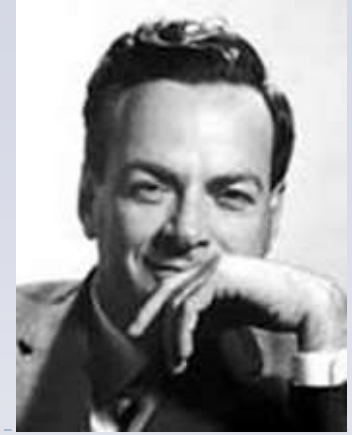
- Le **formalisme traditionnel** de la mécanique quantique est incapable de décrire la **création ou l'annihilation** de particules, observées par ex. en physique des hautes énergies.

- P. Dirac, en 1927, trouve les opérateurs correspondants et réussit à **quantifier** le champ électromagnétique (son énergie est quantifiée, les photons étant les **quanta** du champ).
  - Les interactions entre particules chargées se font par **échange de photons** (ex. l'électron et le proton dans l'atome d 'H).
  - Cette théorie remplace la description par les champs électrique et magnétique des équations de Maxwell.

L'électrodynamique quantique

- **L'électrodynamique quantique (QED) :**
  - est la 1ère application de la **théorie quantique des champs,** d'où découle la **physique des particules actuelle** (**modèle standard**).
  - c'est la 1ère **théorie de jauge renormalisable.**

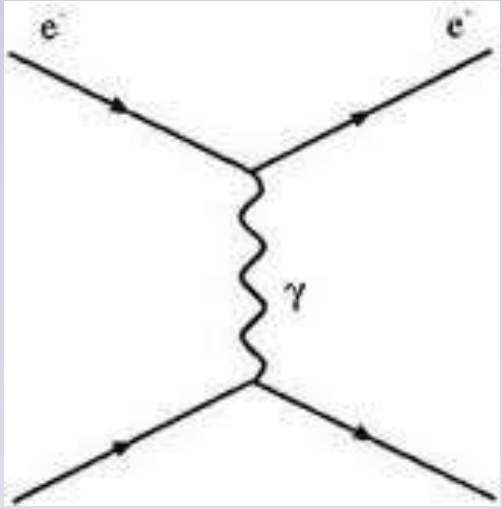
- La QED est la **théorie quantique relativiste** de l'électromagnétisme.



- **Richard Feynman**, prix Nobel de physique en 1965, a largement contribué à son élaboration.

L'électrodynamique quantique

Diagramme de Feynman montrant l'interaction entre 2 électrons par échange d'un photon.



La QED a été confirmée par l'expérience

- L'électrodynamique quantique est une des théories les plus achevées et les mieux vérifiées aujourd'hui.
  Elle a permis d'expliquer entre autres:
  - l'**anomalie du moment magnétique** de l'électron.
  - le **décalage de Lamb** des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène (découvert en 1947).
  - l'**effet Casimir** (prédit en 1948 par H. Casimir).

Le modèle standard

- Les théoriciens ont appliqué les concepts de l'électrodynamique quantique aux théories dites **théories de Yang-Mills**.

- L'utilisation de ces théories a donné naissance à l'actuel **modèle standard** de la physique des particules.

Comprendre la mécanique quantique

« Je crois pouvoir dire sans me tromper que personne ne comprend vraiment la mécanique quantique ».

Richard Feynman

Qu’est-ce que la réalité?

- « Je ne demande pas qu'une théorie corresponde à la réalité, car je ne sais pas ce qu'est la réalité. Ce n'est pas quelque chose que l'on peut tester avec du papier pH. **Tout ce qui m'importe est que la théorie prévoie correctement le résultat d'une expérience.** »

  Stephen Hawking

Bibliographie

- Regards sur la matière – Bernard d'Espagnat et Etienne Klein
- Pour comprendre simplement les origines et l'évolution de la physique quantique – Jean Hladik
- Petit voyage dans le monde des quanta – Etienne Klein
- A la recherche du réel – Bernard d'Espagnat
- La nature de la physique - Richard Feynman
- La partie et le tout – Werner Heisenberg
- Physique atomique et connaissance humaine – Niels Bohr
- Physique quantique et représentation du monde – Erwin Schrödinger
- Les physiciens modernes et leurs découvertes – Emilio Segrè
- etc…