Chapitre 1

Nécessité de la mécanique quantique

1.1 Approche hamiltonienne de la mécanique classique

Le but de cette partie est de présenter une autre façon d'obtenir les équations permettant de décrire l'évolution d'une particule. Cette présentation analytique de la mécanique classique, adhère plus à l'esprit du formalisme utilisé en mécanique quantique qu'à celui de la mécanique newtonienne.

On s'intéresse à une particule de masse m évoluant dans une direction $\vec{u}_x$ où sa position est repérée par x et sa vitesse par $\vec{v} = v\vec{u}_x = \dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\vec{u}_x$.

La quantité de mouvement $\vec{p}$ que l'on nomme également impulsion (conformément à l'usage, c'est sous cette dénomination que nous l'appellerons dans cet ouvrage), s'écrit $\vec{p} = m\vec{v} = p\vec{u}_x$ avec $p = mv = m\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$.

La deuxième loi de Newton[1], ou principe fondamental de la dynamique, pour cette particule soumise à un champ de force $\vec{F}$ s'écrit $m\vec{a} = \vec{F}$, avec $\vec{a}$ l'accélération. En projetant sur Ox, on obtient :

$$m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = F.$$

1. Isaac NEWTON (1642-1727).

On considère le champ de force conservatif indépendant du temps, dérivant d'une énergie potentielle E_p : $\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}} E_p$[1]. Par projection sur l'axe Ox, on a $F = -\dfrac{\mathrm{d}E_p}{\mathrm{d}x}$.

L'énergie mécanique est donnée par

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + E_p(x) = \frac{p^2}{2m} + E_p(x)$$

si bien que E dépend de deux variables privilégiées, x et p, et on a :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial x}\right)_p = \frac{\mathrm{d}E_p(x)}{\mathrm{d}x} = -F = -\frac{\partial p}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$
$$\left(\frac{\partial E}{\partial p}\right)_x = \frac{\mathrm{d}(p^2/2m)}{\mathrm{d}p} = \frac{p}{m} = v = \frac{\partial x}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

La connaissance de $E(x,p)$ et des conditions initiales $x(t=0)$ et $p(t=0)$ permet donc de déterminer la position x et l'impulsion p de la particule. Ainsi, on peut connaître l'évolution du système grâce à l'énergie mécanique. L'hamiltonien[2] H, s'identifie à l'énergie mécanique dans le cas d'un système mécanique classique, dont l'énergie potentielle ne dépend pas du temps. Il existe également un hamiltonien en physique quantique, sa connaissance permet de suivre l'évolution d'un système avec l'équation de Schrödinger[3]. Cette équation a la forme[4] :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t).$$

Le principe de la moindre action énoncé en 1744 par de Maupertuis[5], permet de démontrer un grand nombre d'équations fondamentales en physique, il se présente sous différentes formes selon le domaine étudié, il fait appel au concept d'action qui sort du cadre de cet ouvrage mais qui va nous permettre de préciser la limite où la mécanique classique doit laisser place à la mécanique quantique.

1. La grandeur qui se conserve c'est l'énergie mécanique E, en effet, avec le théorème de l'énergie cinétique $\mathrm{d}E_c = \vec{F}.\mathrm{d}\overrightarrow{OM} = -\overrightarrow{\text{grad}}E_p.\mathrm{d}\overrightarrow{OM} = -\mathrm{d}E_p$ on a $\mathrm{d}(E_c + E_p) = 0$ donc E est constante.
2. H est un opérateur dont l'expression dépend du système étudié.
3. Voir le chapitre 3.
4. ψ représente la fonction d'onde qui sera développée dans les chapitres suivants.
5. Pierre Louis MOREAU de MAUPERTUIS (1698 -1723).

1.2 Quand doit-on utiliser la mécanique quantique ?

À la fin du XIXe siècle la mécanique classique apportait des réponses très satisfaisantes à bon nombre de situations, mais des phénomènes comme le rayonnement thermique ou l'effet photoélectrique restaient inexpliqués. En 1900 une proposition de Max Planck[1] allait donner naissance à la mécanique quantique.

Mais avant de revenir en détail sur cette loi de Planck dans le paragraphe suivant, précisons d'abord le domaine de validité de la mécanique quantique. Pour cela nous utilisons la notion d'action mécanique évoquée précédemment que l'on compare à la constante de Planck réduite[2] $\hbar \approx 10^{-34}$ J.s. L'analyse dimensionnelle d'une action $\mathcal{A}$ s'identifie à celle de $\hbar$, soit une énergie multipliée par un temps, c'est par exemple le cas du moment cinétique. En effet, par définition $\overrightarrow{L_0} = \overrightarrow{OM} \wedge m\overrightarrow{v}$ donc $[L]$=LMLT^{-1}=L^{2}MT^{-1}, le lecteur vérifiera qu'il s'agit bien d'un produit de l'énergie par le temps[3].

Si $\mathcal{A} \gg \hbar$, alors la mécanique classique convient. Dans le cas contraire, la mécanique quantique s'impose[4].

Par contre il y a une certaine indépendance entre la mécanique quantique et la mécanique relativiste, qui met hors jeu la mécanique classique aux grandes vitesses (non négligeables par rapport à c célérité de la lumière). En effet la mécanique quantique peut être relativiste ou non, le critère étant celui de la vitesse de la particule.

1.3 Rayonnement électromagnétique du corps noir : loi de Planck

Un corps noir est un corps qui absorbe la totalité du rayonnement électromagnétique qu'il reçoit, si bien que le rayonnement émis par un tel corps ne résulte d'aucune réflexion. La meilleure réalisation d'un tel dispositif serait une cavité, aux parois internes absorbantes, percée d'un petit trou par

1. Max PLANCK (1858-1947), prix Nobel en 1918.
2. $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ avec $h = 6,62606957 \times 10^{-34}$ J.s.
3. En prenant, par exemple, une énergie cinétique multipliée par un temps.
4. L'exercice 1.2. illustre différentes situations.

lequel les ondes électromagnétiques externes pourraient entrer, puis subir de multiples réflexions à l'intérieur de la cavité. Ces ondes seraient « piégées ». Le rayonnement visible est peu réfléchi par une surface noire et mate, cela constitue une bonne approximation de corps noir[1]. Le rayonnement émis est lié à la température du corps. Par exemple, un échantillon de fer que l'on chauffe va émettre une couleur rouge $\lambda \approx 650$ nm, puis d'autres longueurs d'onde et deviendra blanc[2].

Dans la deuxième partie du XIXᵉ siècle, plusieurs lois donnaient une description quantitative de ce rayonnement :

— la loi de Stefan[3], $\phi = \sigma T^4$ avec ϕ la puissance émise par unité de surface du corps noir, et $\sigma = 5,67040 \times 10^{-8}$ W.m^{-2}.K^{-4} la constante de Stefan.

— la loi du déplacement de Wien[4] donne la longueur d'onde λ_{max} principalement émise lorsque que le corps noir, à l'équilibre thermique, est à la température T, $\lambda_{max} T = 2,898 \times 10^{-3}$ m.K.

La grandeur qui permet d'évaluer l'importance du rayonnement en fonction de la température T et de la longueur d'onde λ, est notée $u_v^\lambda(\lambda, T)$ et représente l'énergie volumique par unité de longueur d'onde. En 1896, la loi de Wien rend compte du rayonnement émis par un corps, de façon satisfaisante, pour les courtes longueurs d'onde :

$$u_v^\lambda(\lambda, T) = \frac{A}{\lambda^5} \exp\left(-\frac{B}{\lambda T}\right)$$

les constantes A et B étant déterminées empiriquement.

En 1900, la loi de Rayleigh[5]-Jeans[6] donne une relation satisfaisante pour les grandes longueurs d'onde mais pas pour les plus petites. C'était la « catastrophe ultraviolette » :

$$u_v^\lambda(\lambda, T) = \frac{8\pi k_B}{c} \frac{T}{\lambda^2}$$

1. Lorsque le corps n'est pas noir on parle de corps gris caractérisé par un coefficient multiplicatif d'émissivité $\varepsilon(\lambda) < 1$.
2. D'où l'expression : chauffer à blanc ! Le blanc résulte de l'addition de différentes couleurs.
3. Joseph STEFAN (1835-1893).
4. Wilhelm WIEN (1864-1928), prix Nobel en 1911.
5. John William RAYLEIGH (1842 -1919), prix Nobel en 1904.
6. James JEANS (1877-1946).

avec la constante de Boltzmann[1] $k_B = 1,3806488 \times 10^{-23}$ J.K^{-1}, et la célérité des ondes électromagnétiques dans le vide $c = 299792458$ m.s^{-1}. Les deux lois précédentes sont obtenues avec des raisonnements de physique classique et ne donnent pas satisfaction sur l'ensemble du spectre.

Cette même année 1900, Max Planck émet l'idée que dans la cavité constituant le corps noir, un système d'ondes stationnaires s'installe suite aux réflexions sur les parois avant l'absorption complète du rayonnement. Il introduit la constante h (*hilfe* en allemand : *au secours !*).

$$\boxed{u_v^\lambda(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\dfrac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}}.$$

C'est l'acte de naissance de la théorie quantique.

Cette loi permet de retrouver les lois de Wien et Rayleigh-Jeans donc d'exprimer les constantes A et B[2].

On exprime également l'énergie volumique par unité de fréquence $u_v^\nu(\nu, T)$. Le lien entre les deux relations est tel que l'énergie volumique est égale à

$$u_v^\nu(\nu, T)\mathrm{d}\nu = -u_v^\lambda(\lambda, T)\mathrm{d}\lambda$$

le signe moins provient du fait que la fréquence est une fonction décroissante de la longueur d'onde $\lambda = \dfrac{c}{\nu}$, c'est-à-dire qu'une diminution de la fréquence correspond à une augmentation de la longueur d'onde, soit :

$$u_v^\nu(\nu, T) = -u_v^\lambda(\lambda, T)\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}\nu} = \frac{c}{\nu^2} u_v^\lambda(\lambda, T)$$

$$u_v^\nu(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\dfrac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}.$$

La relation entre la puissance émise par unité de surface et l'énergie volumique est donnée par[3] $\phi = \dfrac{c}{4} u_v$, d'où deux variantes de la loi de Planck :

$$\phi(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\dfrac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}$$

1. Ludwig BOLTZMANN (1844-1906).
2. Voir le chapitre 11.
3. Ce résultat s'obtient en utilisant la notion d'angle solide (hors-programme).

$$\phi(\nu, T) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\dfrac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}.$$

Un traitement mathématique[1] de la loi de Planck redonne les lois de Stefan et du déplacement de Wien. Pour la première, il suffit d'intégrer $\phi(\lambda, T)$ sur l'ensemble des longueurs d'onde donc de 0 à $+\infty$, et pour la seconde, d'exprimer les maxima de $\phi(\lambda, T)$ en fonction de T.

1.4 Effet photoélectrique

Cet effet consiste en l'extraction d'un électron d'un matériau conducteur, sous l'action d'une onde électromagnétique. La théorie classique, avec les équations de Maxwell[2], ne permet pas de comprendre ce phénomène. En effet, elle suppose l'énergie continue dans l'onde, si bien qu'il suffirait d'augmenter l'intensité de la lumière pour réussir à fournir suffisamment d'énergie pour extraire un électron. L'expérience montre qu'il n'en est rien. En 1905[3], Albert Einstein[4] en donna l'explication en introduisant une quantification de l'énergie portée par l'onde électromagnétique de fréquence ν. Il s'agit des quanta d'énergie, de valeur $h\nu$, que l'on appelle aujourd'hui des photons[5]. Cette proposition est compatible avec l'étude du rayonnement du corps noir réalisée par Planck cinq ans plus tôt. Cette découverte valut le prix Nobel à Einstein en 1921.

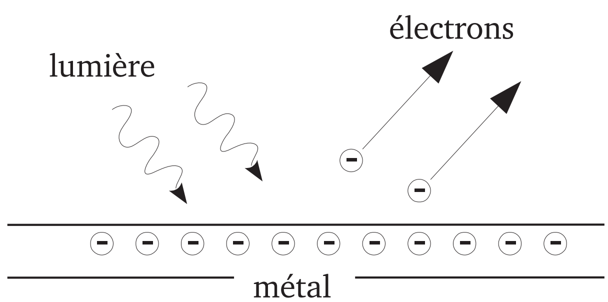

Figure 1.1 – Effet photoélectrique

1. Voir le chapitre 11.
2. James Clerk MAXWELL (1831-1879).
3. Cette même année Einstein publia sa théorie de la relativité restreinte
4. Albert EINSTEIN (1879-1955), prix Nobel en 1921.
5. L'appellation « photon » date de 1926.

1.5 Deux congrès de Solvay

Il s'agit de rencontres d'éminents scientifiques organisées depuis le début du XX^{e} siècle. Deux d'entre elles sont particulièrement célèbres pour l'élaboration des concepts quantiques. Les photographies suivantes sont l'occasion de mettre un visage sur les noms associés à un grand nombre de relations énoncées dans cet ouvrage.

Le premier congrès de Solvay qui a eu lieu en 1911 s'intitulait « La théorie du rayonnement et les quanta ». On y retrouve les noms de grands physiciens liés à l'aventure de la physique quantique.

FIGURE 1.2 – Congrès de Solvay 1911

Debout de gauche à droite :
Robert Goldschmidt, Max Planck, Heinrich Rubens, Arnold Sommerfeld, Frederick Lindemann, Maurice de Broglie, Martin Knudsen, Friedrich Hasenöhrl, Georges Hostelet, édouard Herzen, James Jeans, Ernest Rutherford, Heike Kamerlingh Onnes, Albert Einstein, Paul Langevin.
Assis de gauche à droite :
Walther Nernst, Marcel Brillouin, Ernest Solvay, Hendrik Lorentz, Emil Warburg, Jean Baptiste Perrin, Wilhelm Wien, Marie Curie, Henri Poincaré.

Le congrès de 1927 «Électrons et photons» rassemble de nombreux acteurs de la physique quantique dont certains étaient déjà présents en 1911.

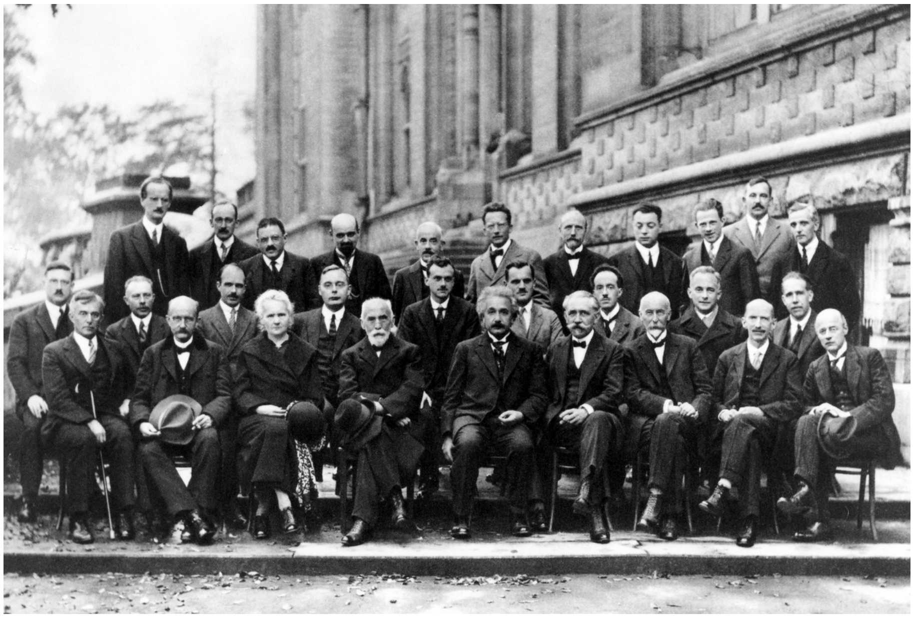

Figure 1.3 – Congrès de Solvay 1927

Debout de gauche à droite :
Auguste Piccard, émile Henriot, Paul Ehrenfest, édouard Herzen, Théophile de Donder, Erwin Schrödinger, Jules-émile Verschaffelt, Wolfgang Pauli, Werner Heisenberg, Ralph H. Fowler, Léon Brillouin.
Assis au deuxième rang de gauche à droite :
Peter Debye, Martin Knudsen, William Lawrence Bragg, Hendrik Anthony Kramers, Paul Dirac, Arthur Compton, Louis de Broglie, Max Born, Niels Bohr.
Assis au premier rang de gauche à droite :
Irving Langmuir, Max Planck, Marie Curie, Hendrik Antoon Lorentz, Albert Einstein, Paul Langevin, Charles Eugène Guye, Charles Thomson Rees Wilson, Owen Willans Richardson.