

**Mécanique quantique – Mécanique classique**

## 1. Nécessité d'introduire la quantification

Retraçant brièvement l'origine de la mécanique quantique et de la quantification, il s'agit, dans ce court chapitre de rappeler pourquoi la mécanique quantique a supplanté, par nécessité, la mécanique classique. Ainsi, le changement profond et fécond est parti de l'inadéquation entre deux résultats d'expériences (le rayonnement du corps noir et l'effet photoélectrique), et les résultats prédits par la physique classique.

### 1.1 Le rayonnement du corps noir

Prenons un objet entièrement fermé (corps noir), sauf à un endroit, où un trou est percé ; chauffons-le. L'agitation des atomes à l'intérieur du corps, résultant du transfert d'énergie thermique, induit un rayonnement d'ondes électromagnétiques dont la longueur d'onde moyenne, ou la longueur d'onde pour laquelle l'intensité est maximum, dépendent de la température de chauffage. Chauffé à  $4000\text{K}^1$ , la lumière émise par le corps noir, que l'on peut détecter lorsqu'elle sort du trou, est verte, alors qu'elle est bleue si la température est de  $5000\text{K}$ .

A une température donnée, l'énergie se répartit sur une plage de longueurs d'ondes quasi infinie. Autrement dit, même si la couleur apparente est par exemple le rouge, correspondant à une longueur d'onde moyenne d'environ  $650\text{ nm}$ , le rayonnement sortant est constitué par la superposition d'une distribution de toutes les longueurs d'onde, avec une probabilité différente attribuée à chacune de ces longueurs d'onde.

D'un point de vue théorique, si l'on suppose que l'énergie stockée peut s'étendre sur tout le spectre et avoir une valeur continue quelconque pour chaque longueur d'onde, le calcul ne peut pas reproduire l'expérience. Pour remédier à cette divergence, Planck utilisa, en 1900, un artifice mathématique<sup>2</sup>, qui ne sera interprété physiquement que quelques années plus tard. Considérant la paroi intérieure de la sphère comme étant constituée de résonateurs vibrant à cause de l'agitation thermique, il supposa qu'au lieu de prendre toutes les valeurs, l'énergie de ces résonateurs ne peut prendre que des valeurs qui sont, pour une longueur d'onde donnée, des multiples entiers d'une valeur minimum  $\varepsilon_0$ , soit  $\varepsilon_0, 2\varepsilon_0, \dots, n\varepsilon_0$ .

Cette hypothèse, moyennant une valeur particulière de  $\varepsilon_0$ , reproduisit parfaitement l'expérience. L'accord est trouvé en posant  $\varepsilon_0 = hc/\lambda$ , où  $h$ , quantum d'action appelé encore constante de Planck, vaut  $6,62 \cdot 10^{-34}\text{ J s}$ ,  $c$  étant la vitesse de la lumière ( $\sim 3 \cdot 10^8\text{ m s}^{-1}$ ), et  $\lambda$  la longueur d'onde du rayonnement. A l'échelle macroscopique (ou humaine), les énergies rayonnées peuvent paraître continues, mais elles ne le sont pas. L'énergie du rayonnement n'est pas continue, mais discontinue, ou encore discrète. Nous parlons de quantification de l'énergie.

<sup>1</sup> Le degré Kelvin (K) est l'unité de mesure absolue.  $0^\circ\text{K} \sim -273,15^\circ\text{C}$  (Celsius)

<sup>2</sup> M. Planck, *Entropie und Temperatur strahlender Wärmer*, Annalen der Physik **306** 719 (1900)

## 1.2. L'effet photoélectrique

Lorsqu'un matériau métallique reçoit une onde électromagnétique à sa surface, il peut émettre des électrons d'énergie bien définie sous certaines conditions<sup>3</sup>. Par exemple, sur une surface recouverte de sodium métallique, aucun électron du sodium n'est éjecté si la lumière est rouge, orange, ou verte (correspondant à des longueurs d'onde comprises entre 530 et 650 nm), et ceci quelle que soit l'intensité du faisceau de lumière. Par contre, éclairée en lumière bleue ( $\lambda < 460$  nm), des électrons sont arrachés, et le nombre d'électrons arrachés est proportionnel au flux lumineux du faisceau de lumière. De plus, l'énergie de l'électron éjecté ne dépend pas de l'intensité lumineuse, mais uniquement de la longueur d'onde incidente et du métal utilisé.

La théorie ondulatoire ne pouvait pas expliquer ces phénomènes. A. Einstein, en 1905<sup>4</sup>, montra qu'on peut interpréter l'effet photoélectrique en revenant au moins partiellement à une théorie corpusculaire de la lumière. Dans toute onde lumineuse, on peut effectivement admettre que l'énergie est concentrée en grains (ou quanta) de valeur  $h\nu$ ,  $h$  étant la constante de Planck, et  $\nu$  la fréquence de l'onde ( $\nu = c/\lambda$ ). Si l'électron du métal est lié et a besoin d'une énergie minimum  $W_s$  pour être extrait du métal, l'énergie des photons doit être au moins égale à  $h\nu_{\min} = W_s$ . Cette expression simple montre qu'au-dessous de la fréquence  $\nu_{\min}$ , aucun électron ne peut être arraché du métal.

Comme le souligna L. de Broglie<sup>5</sup>, *Sa théorie [d'Einstein] n'est pas une théorie strictement corpusculaire, car elle fait intervenir la notion de fréquence qui est d'origine ondulatoire*. La théorie corpusculaire ne remplace donc pas la théorie ondulatoire. Les deux théories se complètent.

## 1.3. Objets et mécanique quantique

A partir de ces expériences fondatrices, les éléments atomiques et subatomiques ne pourront plus être vus et traités de la même manière que les objets macroscopiques. Niels Bohr<sup>6</sup> proposera une conception révolutionnaire de l'atome. L'atome est vu comme un système planétaire, avec des électrons tournant sur des orbites précises, comme le font les planètes autour du Soleil. De plus, il affirme comme postulat que l'électron se trouve sur l'orbite dans un état d'équilibre dynamique stationnaire. Dans un tel état, contrairement aux lois de l'électromagnétisme classique, l'électron n'émet pas de rayonnement, et ne peut donc pas tomber sur le noyau. Il affirme aussi que les changements entre états stationnaires ne peuvent pas être traités quant à eux par la

<sup>3</sup> H. Hertz, *Ueber einen Einfluss des Ultravioletten Lichtes auf die electriche Entladung*, Annalen der Physik **306** 719 (1900)

<sup>4</sup> A. Einstein, *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt*, Ann. Phys. **17** 132 (1905)

<sup>5</sup> L. De Broglie, *La physique quantique restera-t-elle indéterministe ?*, Revue d'histoire des Sciences et de leurs applications, Tome 5, p. 289 (1952)

<sup>6</sup> N. Bohr, *On the constitution of atoms and molecules*, Philosophical Magazine Series 6, vol. **26**, no. 153, p. 1, (1913)

mécanique classique. Ce deuxième postulat indique que le changement d'état d'un électron se fait de manière discrète, et que l'énergie de passage d'un état à un autre fait intervenir la constante de Planck.

Par la suite, une mécanique adaptée à ces objets si particuliers a été développée. Plusieurs formalismes de la mécanique quantique seront utilisés pour décrire le comportement de ces objets et de leurs interactions mutuelles. Les formalismes de Dirac et de Schrödinger, en particulier, sont les outils les plus usités aujourd'hui pour décrire correctement les comportements des électrons, des noyaux, pour expliquer les liaisons chimiques. La mécanique quantique est aussi prédictive. Ainsi, grâce à ces formalismes, des effets nouveaux ont été prédits théoriquement, tels l'effet Laser ou encore l'existence du positron, mis en évidence expérimentalement bien plus tard.

#### 1.4. La mécanique quantique appliquée aux collisions

Le formalisme quantique a été utilisé très tôt dans le traitement des collisions entre des atomes, entre des ions et des atomes ou des molécules, ou encore entre des électrons et différentes espèces atomiques ou moléculaires. Le premier travail date du début des années 1930<sup>7,8</sup>. Les travaux de Kallmann et London<sup>7</sup>, par exemple, portaient sur les échanges d'énergie entre des atomes ou des molécules dans les réactions chimiques. Ils ont alors montré que ces échanges d'énergies peuvent parfois s'effectuer à des distances entre atomes supérieures aux rayons des atomes ou des molécules.

La mécanique quantique n'a cessé de se développer pour traiter des collisions atomiques de plus en plus complexes. La complexité se révèle ainsi dans le traitement à appliquer à un nombre de plus en plus élevé de partenaires de la collision, dans l'obtention de sections efficaces dans régime de vitesses de collisions allant de l'eV au GeV, et dans le détail des résultats. Aujourd'hui, il n'est plus question seulement de calculer des sections efficaces relatives à tel ou tel processus, mais aussi de déterminer des sections efficaces partielles ou différentielles (en angle ou en énergie par exemple). De plus, le nombre d'états mis en jeu dans le formalisme pouvant être important, il faut déterminer à l'avance quels seront les états dominants peuplés pendant la collision, afin de limiter le nombre d'états. Enfin, suivant le régime d'énergies du projectile, les méthodes quantiques utilisées sont différentes. Finalement, il s'avère que, si la mécanique quantique est l'outil incontournable pour traiter des collisions, les résultats obtenus sont souvent en désaccord avec l'expérience. Cela est dû en grande partie aux approximations faites pour rendre le calcul réalisable

#### 2. La mécanique classique appliquée aux collisions

Nous pourrions croire que, devant les succès de la mécanique quantique, la mécanique classique aurait disparu complètement. C'est d'abord oublier que la mécanique classique, même si elle ne décrit pas certains objets purement quantiques,

---

<sup>7</sup> H. Kallmann and F. London, *Ueber quantenmechanische Energieuebertragung zwischen atomaren Systemen*, Z. Phys. Chem. **2B** 207 (1929)

<sup>8</sup> O. K. Rice, *On the transfer of energy between atoms at collision*, Proc. Natl. Acad. **17** 34 (1931)

tels que le spin, ou des processus typiquement quantiques, tels que l'effet tunnel, a été utilisée pour décrire des phénomènes subatomiques avant même que la mécanique quantique ait été inventée.

L'exemple le plus célèbre de l'utilisation de la mécanique classique est relatif à l'expérience de Rutherford. Hans Geiger et Ernst Marsden, sous la conduite de Rutherford, ont, entre 1908 et 1909, étudié la diffusion de particules  $\alpha$  (noyaux d'hélium) après passage dans une feuille de métal<sup>9</sup>. Ils ont remarqué que, si la plupart des noyaux n'étaient pas déviés, d'autres l'étaient, et revenaient même vers l'arrière (rétrodiffusion). A la suite de ces résultats, Rutherford a imaginé que l'atome était constitué d'un noyau lourd, au repos dans le métal<sup>10</sup>. Les noyaux étant loin les uns des autres, les particules  $\alpha$  ne diffusent que si elles s'approchent suffisamment près du noyau. Dans ce cas, le traitement classique de la diffusion élastique (cf. Exercice 1) donne dans ce cas les mêmes résultats que le traitement quantique<sup>11</sup>.

Le modèle de Bohr, établi en 1913, est aussi une construction classique, mais d'un type d'interaction plutôt que de collision. Ce modèle décrit le mouvement d'un électron autour d'un noyau (atome d'hydrogène)<sup>12</sup>, et il est une extension du modèle de Rutherford. Il postule que l'électron qui tourne autour du noyau ne rayonne pas d'énergie (alors que la mécanique classique prévoit une perte d'énergie par rayonnement) et reste sur des orbites stables, bien définies en énergie, stationnaires. Les équations dérivées de ce modèle donnent alors le bon résultat quant à l'énergie de l'électron dans son niveau fondamental et dans les niveaux excités. En toute rigueur, ce modèle n'est pas complètement classique, dans la mesure où la quantification du moment cinétique découle des postulats de base de la théorie de Bohr. Cette quantification du moment cinétique donne une valeur inexacte du moment cinétique comparée à celle dont découle la théorie quantique. En mécanique quantique, le postulat de base est la quantification de l'énergie, et non la quantification du moment cinétique, même si celle-ci découle du postulat de base. En outre, les valeurs classiques et quantiques du moment cinétiques sont différentes, sauf à la limite des grands moments cinétiques.

Les deux exemples ci-dessus ont trait à des interactions à deux corps. Pour les collisions faisant intervenir plus de deux corps, la mécanique classique appliquée à la détermination des processus mis en jeu a été plus difficile à mettre en place. En fait, dans une publication datant de 1959, Michal Gryzinski explique clairement la difficulté d'expliquer certains faits expérimentaux sur la base de la mécanique classique, à cause des résultats suffisamment probants obtenus par la mécanique ondulatoire, résultats qui, dès lors, deviennent une preuve de la non-validité de la mécanique classique dans la

---

<sup>9</sup> H. Geiger and E. Marsden, *On a Diffuse Reflection of the  $\alpha$ -Particles*, *Compte rendu de la Royal Society*, **82** 495 (1909)

<sup>10</sup> E. Rutherford, *The Scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  Particles by Matter and the Structure of the Atom*, *Philosophical Magazine. Series 6*, **21** (1911)

<sup>11</sup> François Frémont, *Interférences électroniques – Interférences macroscopiques et nanoscopiques, analogies avec les interférences photoniques*, Ed. Ellipses (2012)

<sup>12</sup> N. Bohr, *On the constitution of atoms and molecules*, *Philosophical Magazine* **26** 1-25 (1913)

description des processus intervenant dans les collisions entre des particules chargées<sup>13</sup>. Ainsi, dans ce contexte, la mécanique classique n'a donc pas pu s'imposer comme une vraie méthode alternative jusqu'au milieu des années 1960.

A partir de 1965, les méthodes classiques, telles que le modèle de collisions binaires, ou le modèle CTMC (Classical Trajectories Monte Carlo), ont été introduites avec succès pour traiter la capture électronique et l'ionisation d'atomes après impact d'ions multichargés. La dernière méthode a l'avantage de traiter en même temps ces deux processus, alors que les théories quantiques sont particulièrement difficiles à implémenter dans le régime de vitesses de projectiles de l'ordre de grandeur de la vitesse des électrons liés à la cible.

De nombreuses variantes du modèle CTMC ont été déclinées, et sont encore utilisées pour analyser des collisions, simples ou complexes. L'introduction de modèles semi-classiques et quasi-classiques a l'avantage d'aller plus loin que le modèle standard CTMC, car ils prennent en compte, comme nous le verrons plus loin, le caractère ondulatoire de l'électron, ainsi que les principes d'indétermination de Heisenberg et d'exclusion de Pauli.

Avant de détailler les modèles semi-classiques et quasi-classiques, nous allons dans le chapitre suivant revenir sur le modèle CTMC standard, en précisant les équations à résoudre, la méthode d'intégration, ainsi que les grandeurs à déterminer à la fin d'une collision<sup>14</sup>.

---

<sup>13</sup> M. Gryzinski, Stopping Power of a Medium for Heavy, Charged Particles, Phys. Rev. **15** 1471 (1957)

<sup>14</sup> Par la suite, le système d'unités atomiques sera utilisé (cf. Annexe A)

**Exercices**

**Traitement classique de la diffusion Rutherford**

**I. Equation de la trajectoire d'une particule :**

Une particule de masse  $M$ , de numéro atomique  $Z_p$  et de vitesse initiale  $\vec{v}_i$ , d'énergie initiale  $E_p$ , diffuse sur une particule cible que nous considérerons ponctuelle, située en  $O$ , de numéro atomique  $Z_c$  et au repos tout au long de la collision (Figure 1). La

force qui s'exerce sur le projectile due à la cible est :  $\vec{F} = \frac{Z_p Z_c}{4\pi\epsilon_0} e^2 \frac{\vec{u}}{r^2} = \frac{K}{r^2} \vec{u}$ .

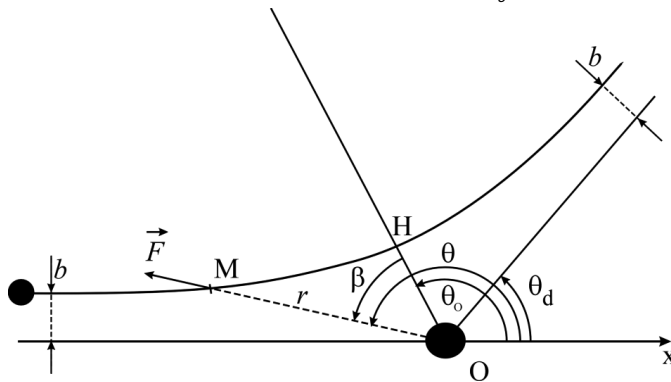


Figure 1

1. A partir du principe fondamental de la dynamique, déterminer deux équations différentielles en  $r$ .
2. Calculer le moment cinétique de la particule mobile par rapport à  $O$ . D'une des deux équations, montrer que la quantité  $r^2 \frac{d\theta}{dt}$  est une constante du mouvement
- C. En déduire que le mouvement est plan.
3. A partir de la 2<sup>ème</sup> équation, faire le changement de variable  $u = 1/r$ . Montrer que  $\frac{dr}{dt} = -C \frac{du}{d\theta}$  et que  $\frac{d^2r}{dt^2} = -C^2 u^2 \frac{d^2u}{d\theta^2}$
4. En déduire que l'équation de la trajectoire peut s'écrire  $\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{K}{MC^2}$ .
5. Montrer que l'équation polaire est :  $r = \frac{p}{-1 + e \cos(\theta - \theta_0)}$ , avec  $p = \frac{MC^2}{K}$  et  $e = \frac{MAC^2}{K}$ . Mettre  $p$  sous la forme  $p = \frac{Mv_i^2 b^2}{K}$
6. Donner l'expression du moment cinétique  $\vec{\sigma}$  en fonction de  $r$  et  $d\theta/dt$ . En déduire l'expression de la vitesse du projectile  $\vec{v}$  sous la forme  $\vec{v} = \frac{\sigma}{M} \left( -\frac{d}{d\theta} \left( \frac{1}{r} \right) \vec{u}_r + \frac{1}{r} \vec{u}_\theta \right)$ .

7. Montrer que l'énergie totale peut s'écrire  $E = \frac{\sigma^2}{2Mp^2} (e^2 + 1 - 2e \cos(\theta - \theta_o)) + \frac{K}{r}$ .

En prenant en considération la conservation du moment cinétique, montrer que

$$E = E_i \frac{b^2}{p^2} (e^2 + 1 - 2e \cos(\theta - \theta_o)) + \frac{K}{r}.$$

8. Lorsque  $\theta \rightarrow \pi$ , que deviennent  $r$  et  $E$  ? Dédurre de ces deux expressions que  $\sin \frac{\theta_d}{2} = \frac{1}{e}$ , puis que  $e^2 = 1 + \frac{4E_i^2 b^2}{K^2}$ .

9. Montrer que  $\tan \frac{\theta_d}{2} = \frac{K}{2E_i b}$ . Tracer l'allure de la courbe représentant  $\theta_d$  en fonction de  $b$ .

10. Déterminer  $r_o$  en fonction de  $K$ ,  $E_i$  et  $b$ .

11. Tracer l'allure des courbes  $r_o(E_i)$  et  $r_o(b)$ .

12. Que devient  $r_o$  pour des énergies suffisamment élevées ?

## II. Section efficace de diffusion :

Soit  $n_p$  le nombre de particules incidentes par unité de volume et  $\vec{v}$  leurs vitesse. Soit  $dN_d$  le nombre de particules diffusées qui atteint, dans l'intervalle de temps  $dt$ , le détecteur dans un angle solide  $d\Omega$ , défini par l'espace compris entre les cônes de demi angles au sommet  $\theta_d$  et  $\theta_d + d\theta_d$ . Le nombre  $dN_d$  de particules diffusées est le nombre de particules qui ont traversé pendant  $dt$  la couronne circulaire de rayons intérieur et extérieur respectifs  $b$  et  $b + db$  (Figure 2).

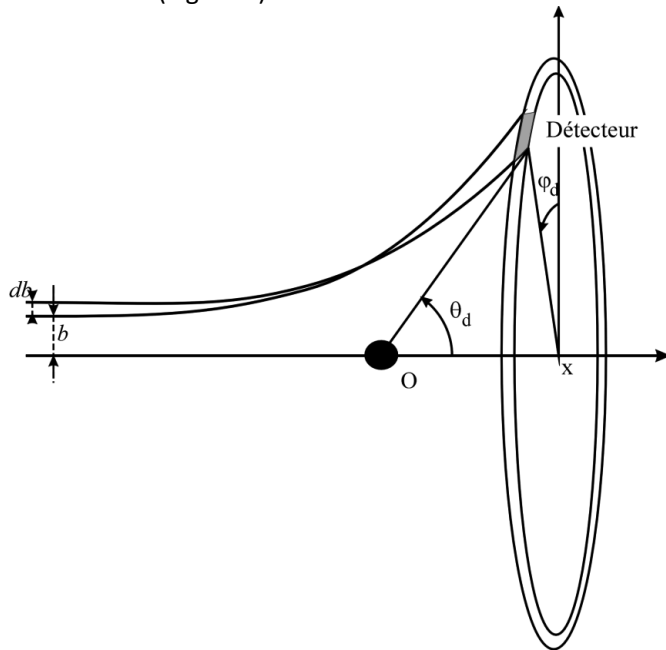


Figure 2