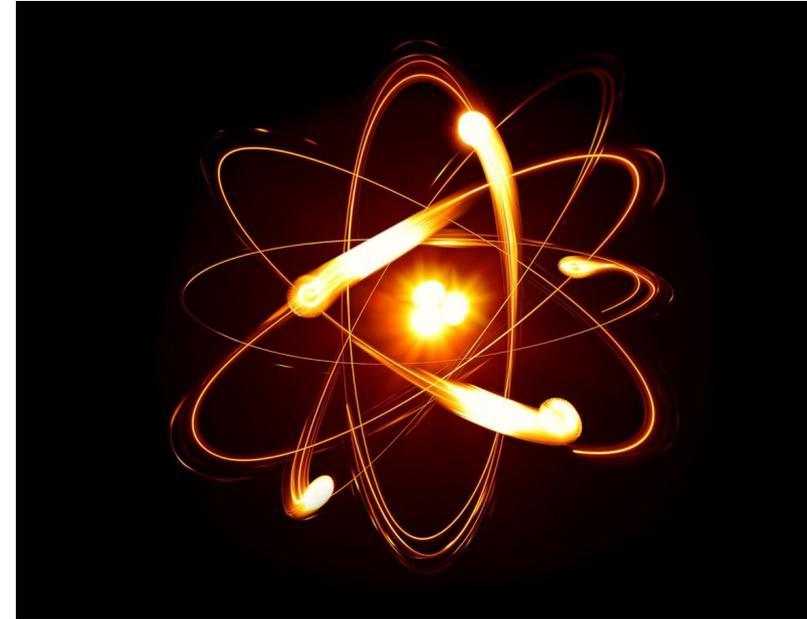


La mécanique quantique

- Introduction
- Principes de la mécanique quantique
- L'équation de Schrödinger
- L'atome d'hydrogène
- Mécanique quantique relativiste

Richard Feynman : « [...] personne ne comprend la mécanique quantique. »

Pour une meilleure compréhension, certaines explications pourront être légèrement simplifiées/tronquées
Images : Wikipedia sauf mention contraire



Notions utilisées :

1. Introduction
- 2-3. Structure de la matière
4. Les ondes
7. Mécanique classique
8. Relativité restreinte

Variables continues / discrètes

- **Variables continues** :

- Peuvent prendre **n'importe quelle valeur** dans un certain intervalle – **toujours associées à une unité**
- Exemples :
 - La durée d'un phénomène (s)
 - La taille, la masse d'une personne (m, kg)
 - La vitesse d'une voiture ($m.s^{-1}$)

- **Variables discrètes** :

- Ne peuvent prendre que **certaines valeurs**
- Exemples :
 - Nombre de personnes dans une salle (entier)
 - Vitesse **régulée** d'une voiture ($\pm 1km/h$) (pas la vitesse !)
 - Prix d'un litre de carburant (millième d'euro)



Robert Wadlow et son père

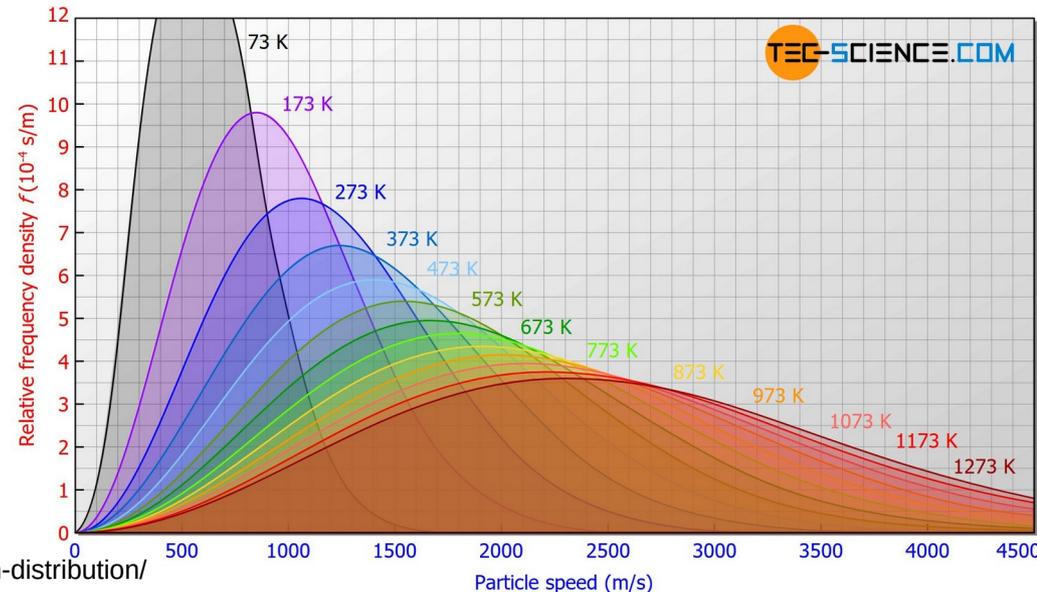
Définitions

- **Quantum, quanta** (du latin *quantum*, quelle quantité) :
 1. Quantité déterminée, montant dans une répartition, proportion d'une grandeur dans un ensemble : quantum de frais généraux représentés par la fabrication.
 2. Terme quelque peu désuet désignant une **discontinuité élémentaire** d'une grandeur quantifiée.
 3. Nom désuet de l'**énergie lumineuse élémentaire**, c'est-à-dire l'énergie d'un photon ; nom désuet du photon lui-même.
- **Quantique** : relatif aux quantons
- **Quanton** : Objet dont traite spécifiquement la théorie quantique

Un peu d'histoire

- Fin XIX^e, la physique classique comprend :
 - La **mécanique newtonienne** (Newton, 1687)
 - La **théorie de l'électromagnétisme** (Maxwell 1865, Lorentz 1895)
 - La **thermodynamique** (Clausius, 1850), ainsi qu'une première version de la **physique statistique : théorie cinétique des gaz**, (Maxwell / Boltzmann) – notion de **densité de probabilité**

$$f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$



Une nouvelle physique

Certains phénomènes **ne s'expliquent pas par les théories connues**

Révolution de pensée menée entre 1900 et 1925

Théorie la **mieux vérifiée** et sans doute la **plus fructueuse** (dans de nombreux domaines) de l'histoire de la physique

Physique classique & relativité

- **Position / vitesse définies**
 - N'importe quelle valeur
 - « **ou** »
 - Mesure **indépendante** du système
- **Propriétés calculables**
 - **Équations du mouvement**
(P.F.D. et équations de la relativité)

Physique quantique

- **Position/vitesse \equiv probabilités**
 - Valeurs **quantifiées** (« **propres** »)
 - Superposition d'états : « **et** »
 - La mesure **influence** le système
- **Fonction d'onde calculable**
 - **Équation de Schrödinger**
(probabilité d'observation d'un état)

Echelles spatiales

- La **physique classique**, la **relativité restreinte** et la **relativité générale** traitent des phénomènes à **grande échelle**
- La **physique quantique** traite des phénomènes à **petite échelle**
- La **physique mésoscopique** traite des phénomènes à l'**échelle intermédiaire**
 - de μέσος (milieu) et σκοπέω (observer)
 - ~ de l'atome au micromètre

taille



Physique classique
Relativité restreinte
Relativité générale

Physique mésoscopique

Physique quantique

Les postulats de la mécanique quantique

Postulat : Proposition que l'on demande d'admettre avant un raisonnement, que l'on ne peut démontrer et qui ne saurait être mise en doute (larousse.fr)

1. Principe de superposition

- L'état d'un système quantique est défini par un **vecteur** qui est une **combinaison linéaire** (à coefficients complexes) d'**états de base**

2. Principe de correspondance

- Les **observables physiques** sont représentés par des **opérateurs mathématiques**

3. Principe de quantification

- Les **mesures** ne peuvent donner que des résultats correspondant à des **valeurs propres** de ces **opérateurs mathématiques**

4. Interprétation probabiliste

- Les calculs mathématiques fournissent la **probabilité d'observer tel ou tel résultat de mesure**

5. Réduction du paquet d'onde

- **La mesure modifie l'état du système quantique mesuré** de manière à faire disparaître les probabilités qui ne se sont pas réalisées

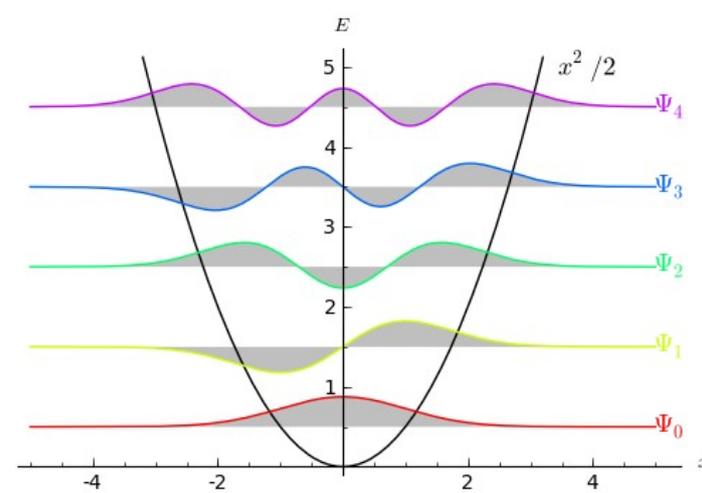
6. Évolution unitaire

- **L'évolution dans le temps** du système quantique est fixée par **l'équation de Schrödinger**

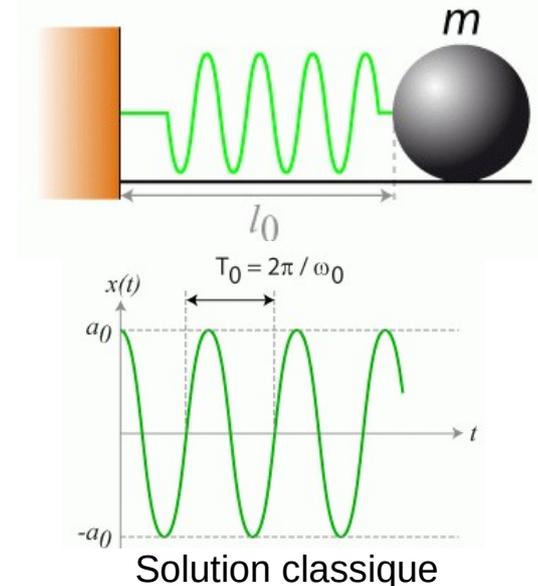
La fonction d'onde

- Concept **fondamental** de la mécanique quantique
- Correspond à la **représentation de l'état quantique**, notée $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ (« ket »)
- Correspond à une **amplitude de probabilité** (en général complexe)
 - La **probabilité** de trouver une particule au voisinage d'une position donnée à un temps donné est proportionnelle à la **densité de probabilité**
- Calculée grâce à l'**équation de Schrödinger**

<https://physics.stackexchange.com/questions/170522/please-explain-the-following-graphs-that-describe-a-quantum-mechanical-harmonic>
http://res-nlp.univ-lemans.fr/NLP_E_M01_G04/co/NLP_E_M01_G04_01.html



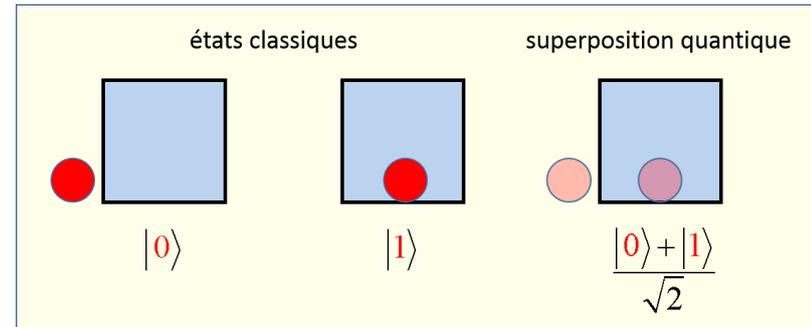
Solutions de l'**oscillateur harmonique** (~ressort) quantique



Solution classique

La superposition d'états

- Un système quantique est dans un **état superposé**
 - Superposition d'**états de base** (« **valeurs propres** » des opérateurs)
- Utilisée en informatique quantique
 - Qubit = **système quantique à deux niveaux** (plus petite unité de stockage d'information quantique) : $|0\rangle$ et $|1\rangle$
 - **État d'un qubit = superposition quantique linéaire de ces deux états de base**
 - **S'écrit $\alpha\cdot|0\rangle + \beta\cdot|1\rangle$** (où α et β sont des coefficients complexes tels que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, ce qui assure que le qubit est entièrement présent)
 - Permet de faire des **calculs parallèles**
 - Alors qu'un bit classique est **numérique** et a toujours pour valeur **0 ou 1**



Exemple

Physique classique :
balle dans la boîte **ou** en dehors

Physique quantique :
balle dans la boîte **et** en dehors
(elle prendra un état quand on regardera)

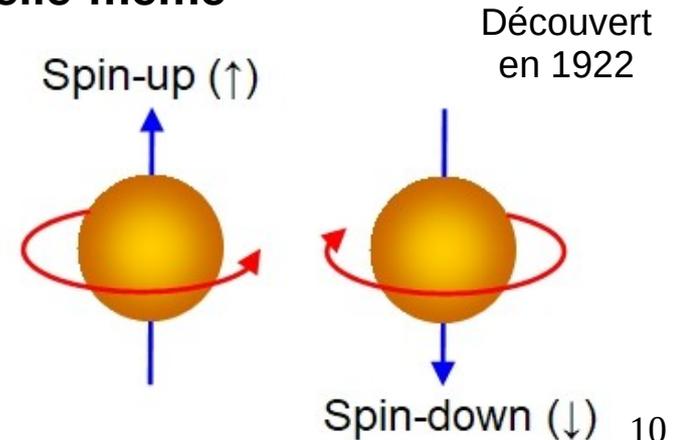
Les nombres quantiques

Nom	Symbole	Analogie classique	Valeurs
Nombre quantique principal	n	Niveau d'énergie de l'électron dans l'atome	1, 2, 3, 4, ...
Nombre quantique azimutal	ℓ	Moment angulaire orbital de l'électron	0, 1, 2, ... $n - 1$
Nombre quantique magnétique	m_ℓ	Projection du moment angulaire orbital sur un axe (orientation de l'ellipse)	$-\ell, \dots 0, \dots \ell$
Nombre quantique magnétique de spin	m_s	Projection du moment angulaire intrinsèque (spin) de l'électron	$\pm \frac{1}{2}$

- Image classique du spin = sens de **rotation de la particule sur elle-même**

- Spin 0 : le boson de Higgs
- Spin $\frac{1}{2}$: l'électron, le positron, les neutrinos, les quarks (fermions)
- Spin 1 : le photon, le gluon les bosons W^\pm et Z^0
- Spin 2 : le graviton

- **Principe d'exclusion de Pauli** : les particules de **spin demi-entier (fermions)** appartenant à un **même système** ne peuvent pas se trouver **simultanément** dans le **même état quantique**



L'équation de Schrödinger



- Écrite en 1925

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

- $H =$ « **hamiltonien** » :

- Décrit l'**énergie** du système
- Ses « **valeurs propres** » sont les valeurs possible de l'énergie du système

- Ex. : pour une particule de masse m soumise à un potentiel V scalaire

$$i \hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \frac{\hat{P}^2}{2m} |\Psi(t)\rangle + V(\hat{R}, t) |\Psi(t)\rangle$$

$$i^2 = -1$$

- On reconnaît **énergie cinétique** et **potentiel** (cf. mécanique classique)
- En général, l'équation est **trop complexe** pour admettre une **solution analytique** → **résolution approchée ou numérique**

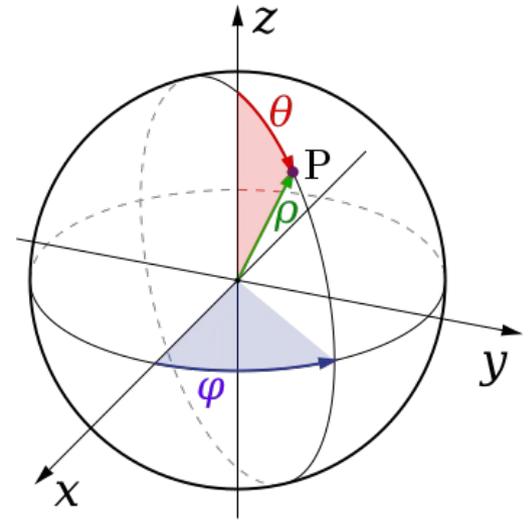
Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

- Un électron de charge $-e$ en orbite autour d'un proton de charge $+e$ (modèle « **planétaire** »)
- Le hamiltonien (l'énergie) du système s'écrit :

$$H = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

- En **coordonnées sphériques**, l'équation de Schrödinger s'écrit (μ = masse réduite) :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \cdot \Psi(r, \theta, \varphi)$$



$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$$

Solution analytique

- On écrit la **fonction d'onde de l'électron** en fonction des **nombre quantiques** n, l, m : $|\Psi_{n,l,m}\rangle$
- La **probabilité de présence** d'un électron autour de la position (r, θ, ϕ) est

$$\langle x | \Psi_{n,l,m} \rangle = \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_m^l(\theta, \phi)$$

- Avec une **partie radiale** (qui dépend du rayon) égale à : $R(r) = r^l L_{n,l}(r) e^{-r/n}$

- Avec $L_{n,l} = \sum_{p=0}^{\infty} a_p r^p$ et $a_{p+1} = \frac{2(p-n+l+1)}{n(p+1)(p+2l+2)} a_p$

- Et une **partie angulaire** (« **harmonique sphérique** ») $Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$

- Avec

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{\partial^{m+l} [(x^2-1)^l]}{\partial x^{m+l}}$$

- L'**énergie** de la couche n vaut $E_n = -\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0 h^2 n^2} = -\frac{R_H}{n^2}$ R_H : constante de Rydberg = 13,6 eV
(valeurs propres)

1 **électronvolt** = énergie cinétique acquise par un électron accéléré depuis le repos par une différence de potentiel d'un volt : $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$

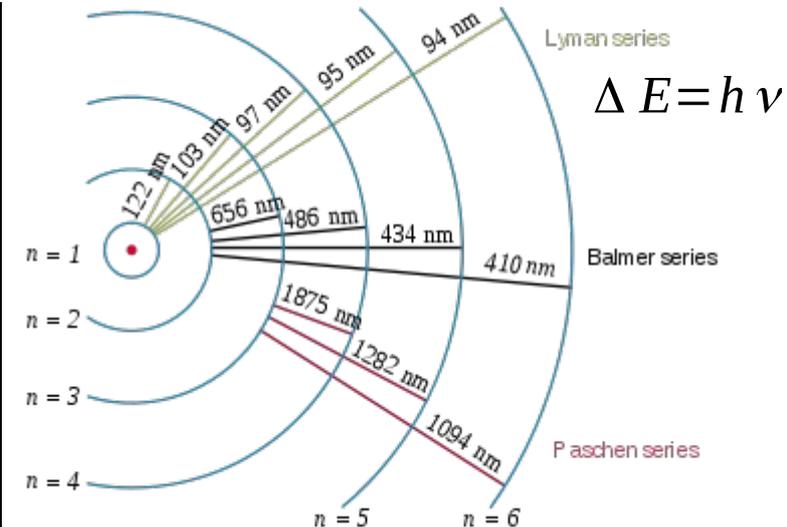
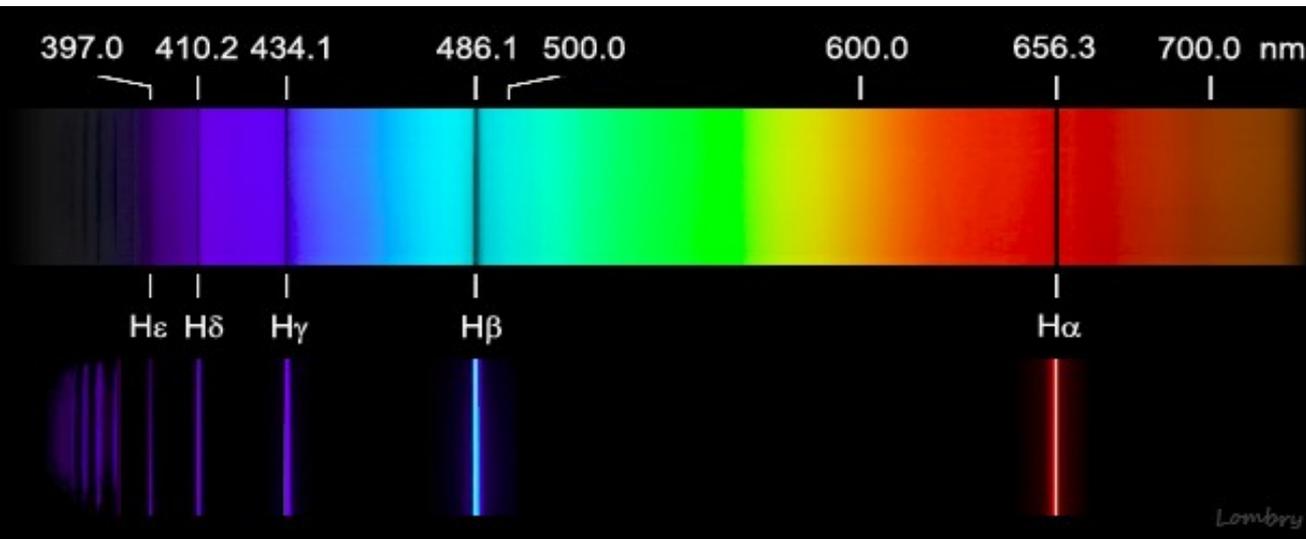
Les raies de l'hydrogène

- **Raies de l'hydrogène** mesurées par Angström en 1862

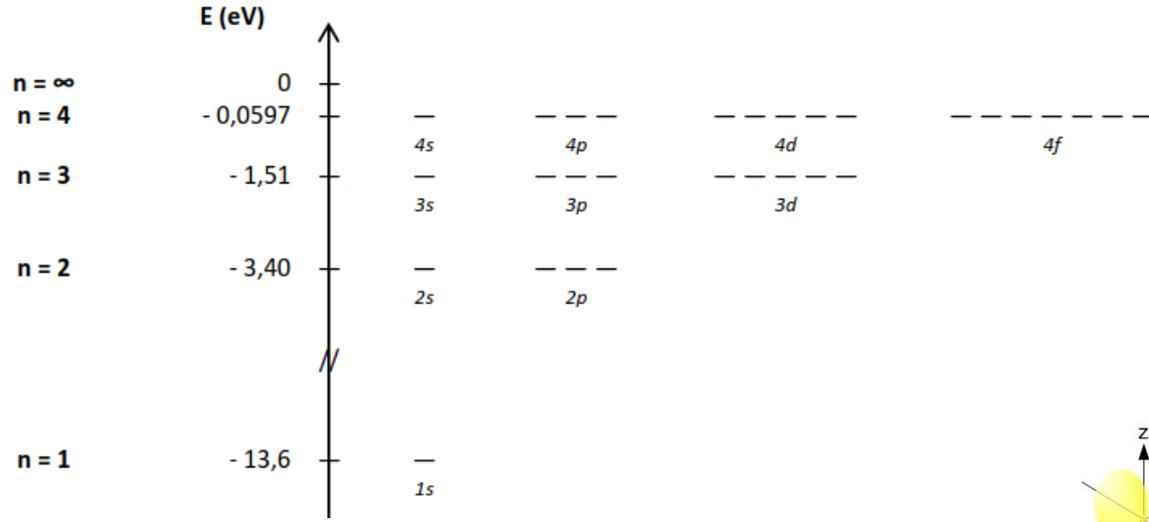
- Formule **empirique** : Balmer (1885)

$$\nu_n = \frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

- Correspond à la solution **analytique** de l'équation de Schrödinger



Forme des orbitales électroniques

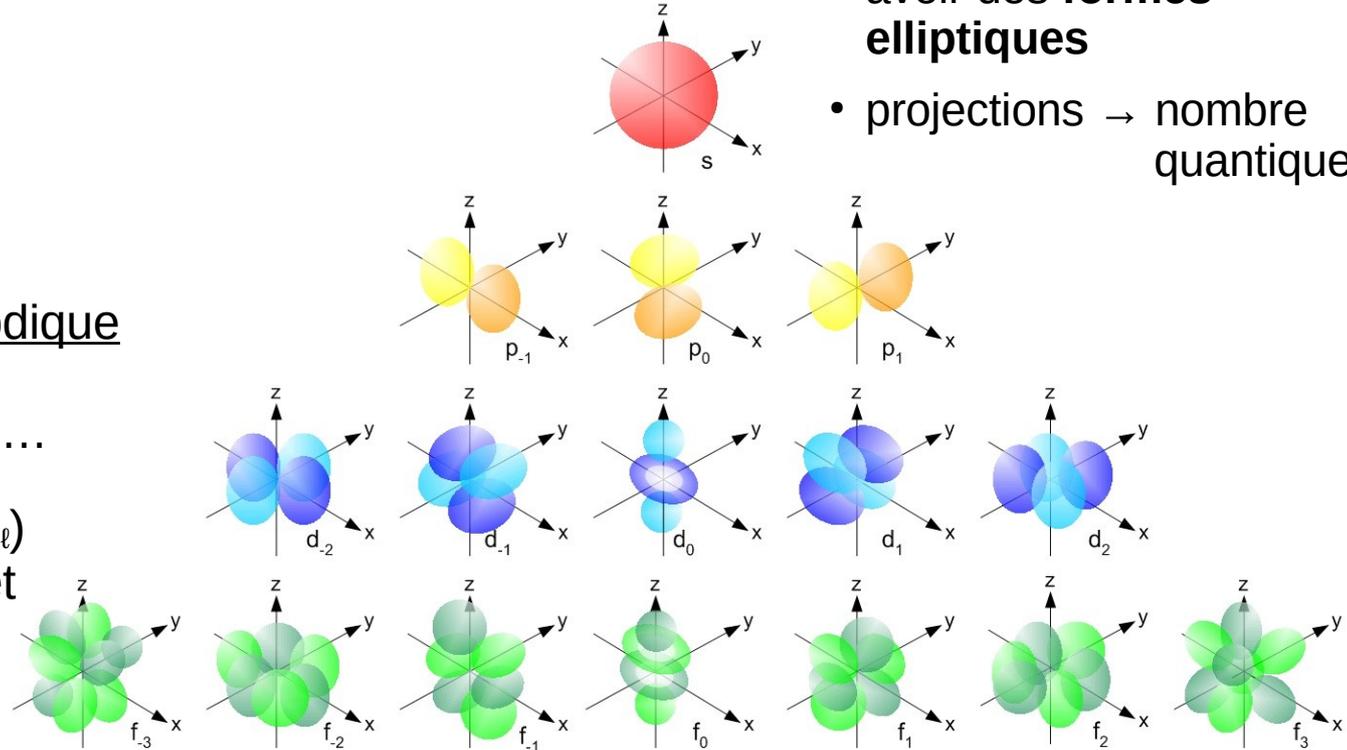


Modèle de Sommerfeld-Bohr

- Les sous-couches peuvent avoir des **formes elliptiques**
- projections \rightarrow nombre quantique m_ℓ

Lien avec la classification périodique

- Couches (n) = 1, 2, 3, ...
- Sous-couches (l) = s, p, d, f, ...
 - Nb = n° de la couche
- Orientations des orbitales (m_ℓ)
- On retrouve la règle de l'octet

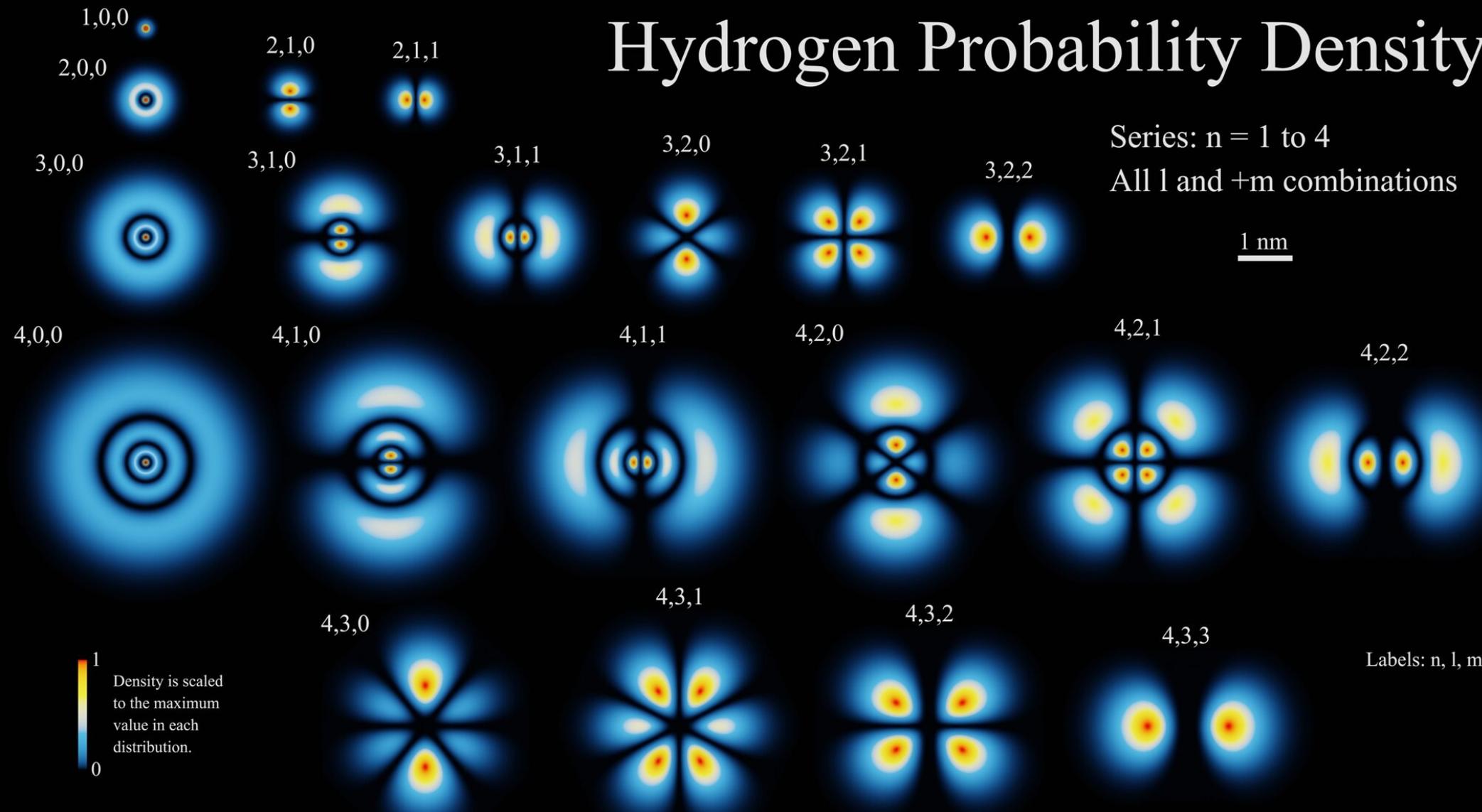


Hydrogen Probability Density

Series: $n = 1$ to 4

All l and $+m$ combinations

1 nm



1
Density is scaled to the maximum value in each distribution.
0

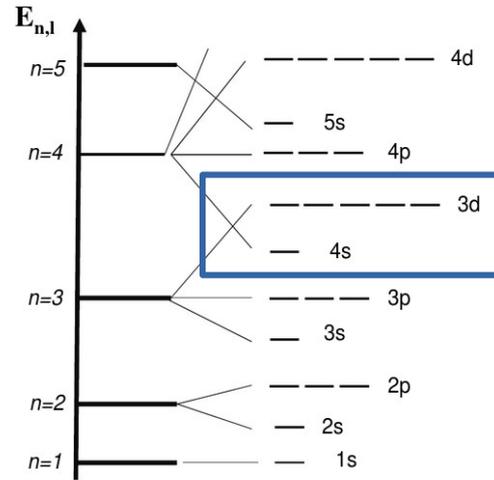
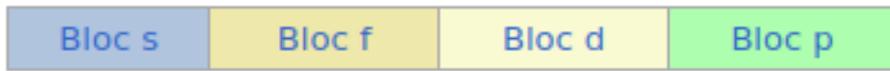
Labels: n, l, m

Répartition des électrons

$n...$	ℓ	Nom de la sous-couche	m_l	Nb d'orbitales dans la sous-couche	Nb d'orbitales dans la couche	Nb d'électrons dans la couche
1	0	1s	0	1	1	2
2	0	2s	0	1	4	8
	1	2p	-1, 0, 1	3		
3	0	3s	0	1	9	18
	1	3p	-1, 0, 1	3		
	2	3d	-2, -1, 0, 1, 2	5		
4	0	4s	0	1	16	32
	1	4p	-1, 0, 1	3		
	2	4d	-2, -1, 0, 1, 2	5		
	3	4f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7		
...						

Remplissage des orbitales électroniques

- Pour des **raisons énergétiques**, les couches ne se remplissent **pas dans l'ordre** : 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, ...
- = « **règle de Klechkowski / Madelung** »
 - (il existe des exceptions)
- Explique la forme du tableau périodique
 - Blocs = sous-couches



→ **1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, ...**

	$l=0$							$l=3$					$l=2$					$l=1$		
1s																				
2s																2p	2p	2p		
3s																3p	3p	3p		
4s													3d	3d	3d	3d	3d	4p	4p	4p
5s													4d	4d	4d	4d	4d	5p	5p	5p
6s	4f	4f	4f	4f	4f	4f	4f	5d	5d	5d	5d	5d	5d	6p	6p	6p				
7s	5f	5f	5f	5f	5f	5f	5f	6d	6d	6d	6d	6d	6d	7p	7p	7p				

1	H	
2	Li	Be

Convention pour n=1

					He
B	C	N	O	F	Ne

Physique quantique relativiste

- Equation de Schrödinger **incompatible avec la relativité restreinte** (invariance des lois physiques par changement de référentiel galiléen)
- **Invariance** du **quadrivecteur impulsion-énergie** : $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$
- On pose $c=1$ (on écrit les vitesses en fractions de c) et $\hbar=1$
- **Equation de Klein-Gordon** (1926)

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\nabla^2 \psi + m^2 \cdot \psi$$

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \psi = 0$$

$$(\square + m^2) \psi = 0$$

correspondances

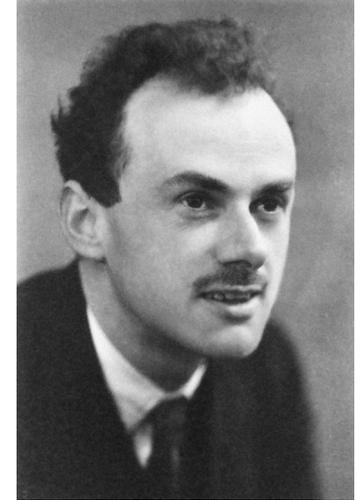
$$E \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{et} \quad \vec{p} \rightarrow -i \vec{\nabla}$$

$$\begin{pmatrix} E \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right) \quad \text{et} \quad \partial^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right) \quad (\mu=0,1,2,3)$$

$$\square = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Équation de Dirac (1928)



- L'équation de Klein-Gordon contient des **carrés**

$$(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \psi = 0$$

- Dirac a eu l'idée de « prendre la **racine carrée** »

$$(i \gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi = 0 \quad \text{« notation covariante »}$$

$\mu=0,1,2,3$

$$\begin{cases} a^2 - b^2 = (a+b)(a-b) \\ a^2 + b^2 = (a+ib)(a-ib) \end{cases}$$

ou $(i \cancel{\partial} - m) \psi = 0$ « slash de Feynman »

$$i^2 = -1$$

- Ψ : « **spinner** » de Dirac à 4D, γ^μ : « **matrices** de Dirac » (4x4)
- Cette équation a permis de **prédire l'existence de l'antimatière**
 - Découverte du **positron** e^+ (anti-électron) en 1932

Représentation de Feynman

- Inspirée par un article de Dirac (1933) :
« The Lagrangian in quantum mechanics »

spectively. The work of the preceding section now shows that

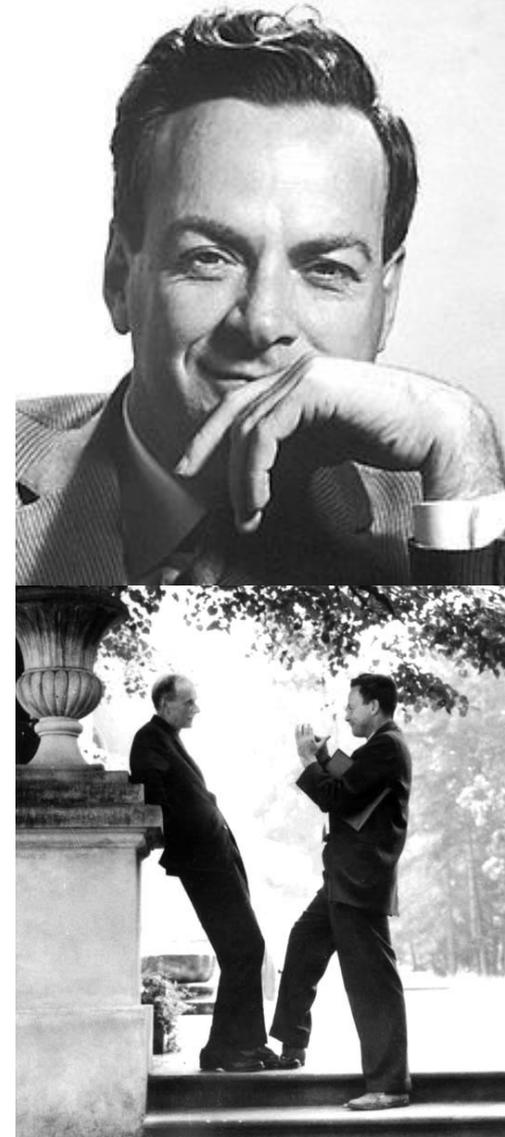
$$(q_t | q_T) \text{ corresponds to } \exp \left[i \int_T^t L dt / \hbar \right], \quad (8)$$

where L is the Lagrangian. If we take T to differ only infinitely little from t , we get the result

$$(q_{t+dt} | q_t) \text{ corresponds to } \exp [iL dt / \hbar]. \quad (9)$$

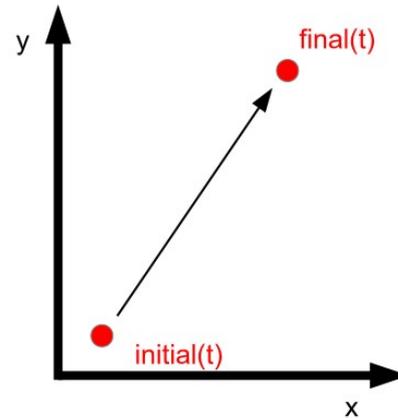
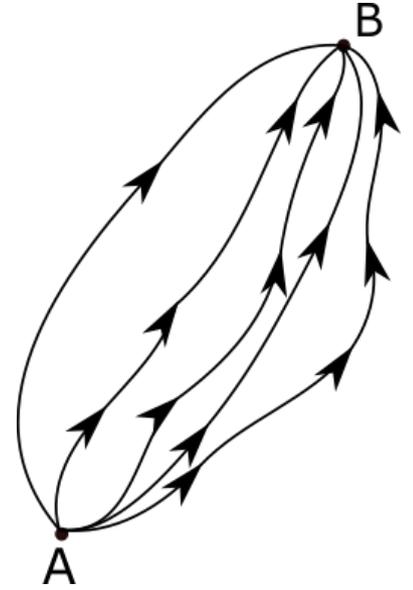
- Feynman recherchait une autre formulation de la mécanique quantique

(faisant intervenir le lagrangien plutôt que l'hamiltonien)

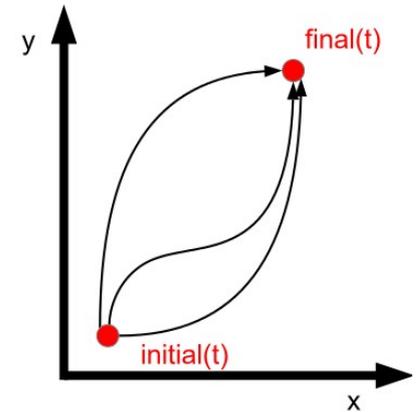


Intégrale de chemin

- Interprétation **plus géométrique**
- Ex. : représentation de 5 chemins **parmi une infinité qu'une particule peut emprunter** pour aller de A à B entre deux temps t et $t' > t$
- On **somme les probabilités pour tous les chemins**
- Très éloigné de la représentation classique



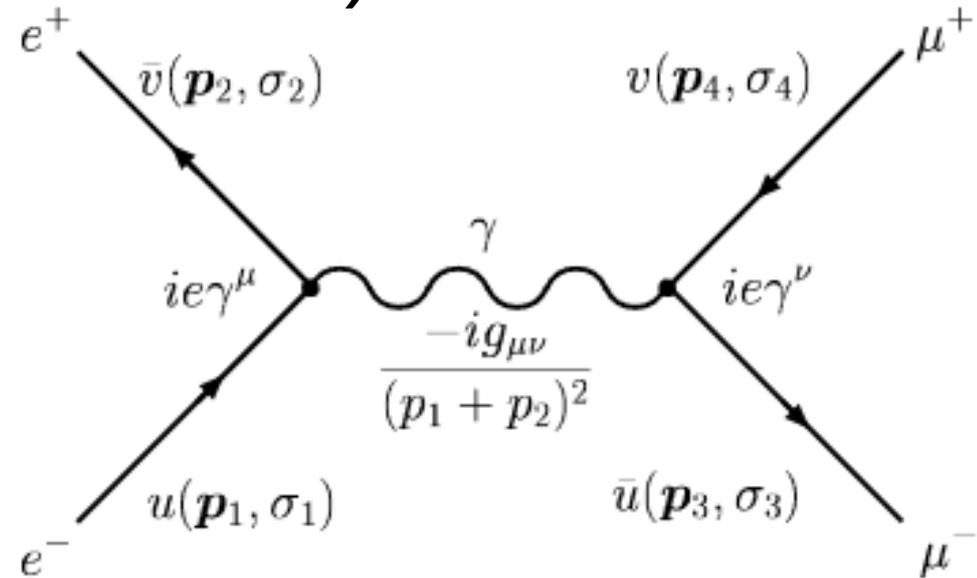
Classical particle



quantum particle

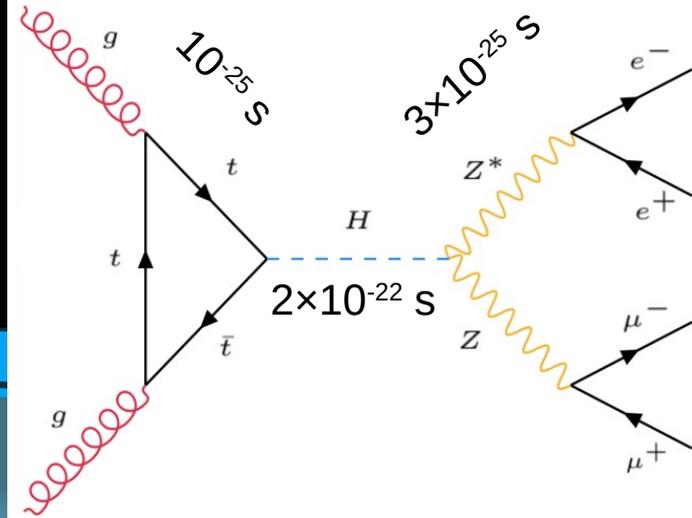
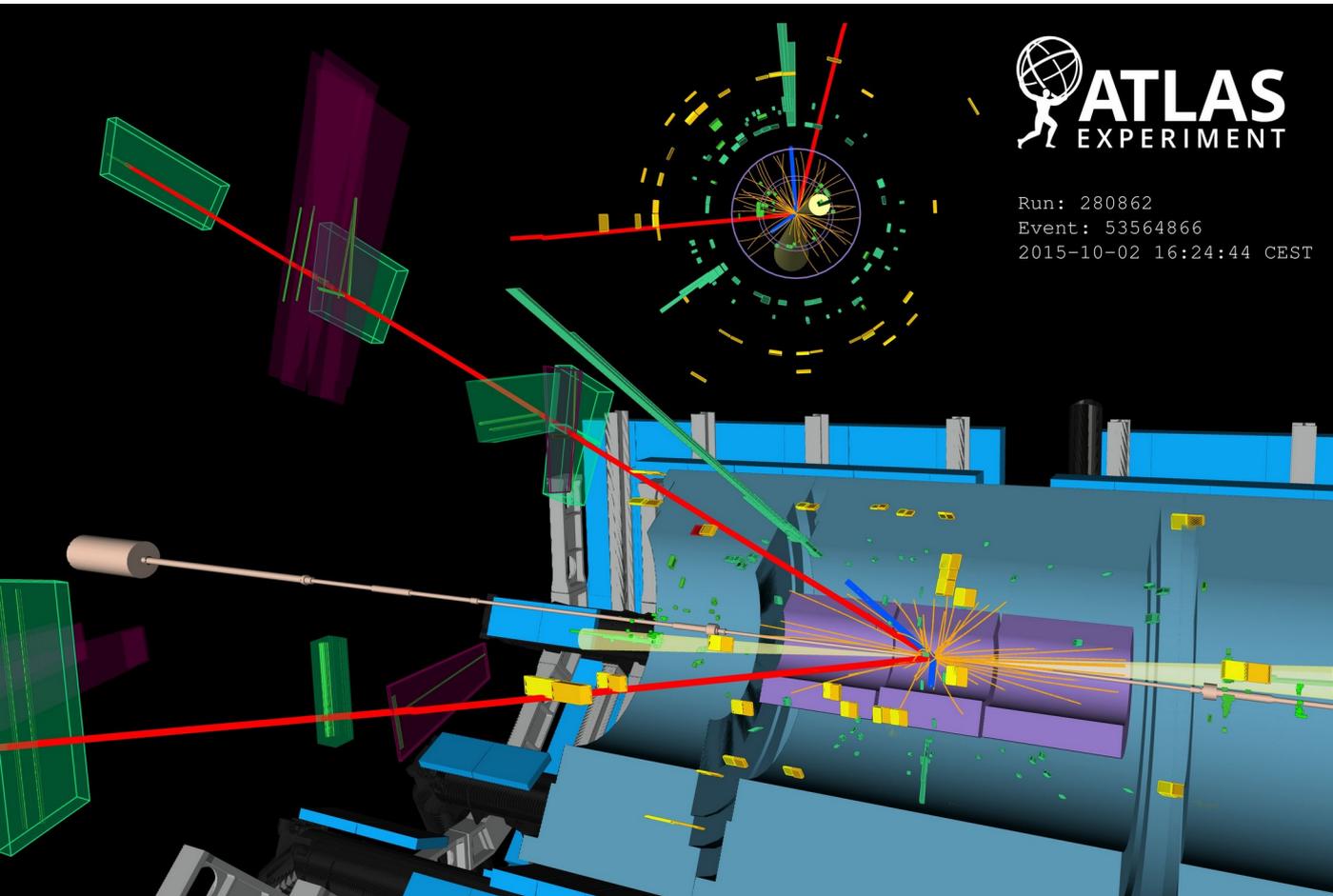
Les diagrammes de Feynman

- Permettent de **calculer les interactions entre particules** (« **sections efficaces** »)
- **Outil incontournable en physique des particules**
 - Exemple : $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$



De nombreux diagrammes ici : https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_Feynman_diagrams

Un exemple : « Higgs en 4 leptons »



<https://cds.cern.ch/record/2799213>
<https://cds.cern.ch/record/2790064>