

Christophe Texier

Mécanique quantique

2^e ÉDITION

DUNOD

Couverture © Image par microscopie électronique d'un réseau de fils d'argent déposé sur un substrat isolant (le pas du réseau est $0.64 \mu\text{m}$). À très basse température, la mesure de la résistance électrique en fonction du champ magnétique (courbe superposée à l'image) donne un accès direct au rapport de la constante de Planck et de la charge de l'électron (le quantum de flux magnétique $\phi_0 = h/q_e$). Ces petites oscillations de la résistance électrique sont appelées « oscillations Aharonov-Bohm » et sont la manifestation d'un phénomène d'interférences quantiques (cf. chapitre 16). La courbe est caractéristique de l'échantillon et parfaitement reproductible. La température était $T = 0.4$ Kelvin, le champ magnétique varie entre 1.1 et 1.3 Tesla et l'amplitude des oscillations est $\delta R \sim 2 \text{ m}\Omega$ pour une résistance $R \simeq 100 \Omega$. (cf. figure 16.1).

L'échantillon et les mesures ont été réalisés pendant la thèse de Félicien Schopfer, dans l'équipe de Christopher Bäuerle et Laurent Saminadayer (Institut Néel, Grenoble). Données publiées dans : F. Schopfer, F. Mallet, D. Mailly, C. Texier, G. Montambaux, C. Bäuerle & L. Saminadayer, *Dimensional crossover in quantum networks : from mesoscopic to macroscopic physics*, Phys. Rev. Lett. **98**, 026807 (2007).

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos	VI
Mode d'emploi	IX
Notations	X
Chapitre 1. Introduction	1
1.1 Qu'est-ce que la mécanique quantique ?	1
1.2 Brèves considérations historiques	2
1.3 La structure des théories physiques	11
1.4 Aperçu des postulats de la mécanique quantique	13
1.5 Premières conséquences importantes	16
Annexe 1.A : La physique quantique en quelques dates	23
Annexe 1.B : Rappels de mécanique analytique	32
Chapitre 2. Équation d'onde de Schrödinger	37
2.1 Équation d'onde – Premières applications	37
2.2 Fonction d'onde dans l'espace des impulsions	48
2.3 Inégalités de Heisenberg	50
Annexe 2.A : Transformation de Fourier	53
Annexe 2.B : Distributions	56
Exercices	61
Chapitre 3. Formalisme de Dirac – Postulats (1)	63
3.1 Introduction	63
3.2 Prélude : espace des fonctions d'onde	63
3.3 Formalisme de Dirac	67
Annexe 3.A : Quelques rappels d'algèbre linéaire	78
Exercices	80
Chapitre 4. La mesure – Postulats (2)	81
4.1 Motivations	81
4.2 Les postulats de mesure	82
4.3 Valeur moyenne d'une observable	85
4.4 Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC)	86
Exercices	87
Chapitre 5. Évolution temporelle – Postulats (3)	89
5.1 Résolution de l'équation de Schrödinger	89
5.2 Théorème d'Ehrenfest	94
5.3 Point de vue de Heisenberg	95
Annexe 5.A : Matrice de diffusion (matrice S) d'une lame séparatrice	97
Exercices	99

Mécanique quantique

Chapitre 6. Symétries et lois de conservation	103
6.1 Symétries	103
6.2 Transformations en mécanique quantique	105
6.3 Groupes continus – Générateur infinitésimal	110
6.4 Potentiel périodique et théorème de Bloch	113
Exercices	116
Problème 6.1. Groupe de Galilée	118
Chapitre 7. Oscillateur harmonique	121
7.1 L'oscillateur harmonique classique	121
7.2 Le spectre de l'oscillateur harmonique	122
Exercices	129
Problème 7.1. États cohérents	130
Chapitre 8. Moment cinétique – Spin	133
8.1 Moment cinétique	133
8.2 Le spin	150
Annexe 8.A : Rotation de 2π du spin d'un neutron	165
Exercices	168
Chapitre 9. Addition des moments cinétiques	169
9.1 Inégalité triangulaire : valeurs de j permises	170
9.2 Construction des vecteurs $ j_1; j_2; j; m\rangle$	172
9.3 Composition de deux spins $1/2$	173
Exercices	175
Chapitre 10. Introduction à la théorie des collisions	177
10.1 Ce que le chapitre discute... et ce dont il ne parle pas	177
10.2 Collisions en une dimension	180
10.3 Formulation générale – Équation de Lippmann-Schwinger	189
10.4 Diffusion dans la situation bidimensionnelle	191
10.5 Diffusion dans la situation tridimensionnelle	198
Annexe 10.A : Fonctions de Green	201
Exercices	204
Problèmes 10.1. Résistance électrique d'un fil quantique unidimensionnel	206
10.2. Temps de Wigner et capacité quantique	208
10.3. Interaction ponctuelle en dimension $d \geq 2$	210
Chapitre 11. Particules identiques et permutations – Postulats (4)	215
11.1 Postulat de symétrisation	216
11.2 Corrélations induites par le postulat de symétrisation	220
Annexe 11.A : Collision entre deux particules identiques	227
Exercices	228
Problèmes 11.1. Corrélations quantiques de la lumière	228
11.2. Collisions entre noyaux de carbone	231

Chapitre 12. Atome d'hydrogène	235
12.1 Atome d'hydrogène	235
12.2 Atomes et classification de Mendeleïev	243
Exercice	248
Chapitre 13. Méthodes d'approximation	249
13.1 Méthode des perturbations – cas stationnaire	249
13.2 La méthode variationnelle	254
13.3 La méthode JWKB et l'approximation semiclassique	255
Exercices	260
Problèmes	261
13.1. Théorème de projection et facteurs de Landé atomiques	261
13.2. Mécanisme d'échange – Interaction coulombienne dans l'atome d'hélium	263
13.3. Mécanisme de super-échange – Isolant de Mott et antiferromagnétisme	265
Chapitre 14. Structures fine et hyperfine du spectre de l'hydrogène	269
14.1 Structure fine	270
14.2 Corrections radiatives	274
14.3 Structure hyperfine du niveau $1s_{1/2}$	275
Chapitre 15. Problèmes dépendants du temps	277
15.1 Méthode des perturbations	277
15.2 Interaction atome-rayonnement	283
Exercices	289
Problème 15.1. Résonance magnétique dans un jet moléculaire	290
Chapitre 16. Particule chargée dans un champ magnétique	293
16.1 Introduction	293
16.2 Champ magnétique homogène	293
16.3 Vortex magnétique	298
Exercices	301
Problème 16.1. Conductivité Hall d'un gaz d'électrons 2D	303
Annexe A. Formulaire	305
A.1 Compléments mathématiques	305
A.2 Constantes fondamentales	311
Annexe B. Solutions des exercices et problèmes	313
Bibliographie	365
Index	367

AVANT-PROPOS

À Marie-Flore

Cet ouvrage propose un cours d'introduction à la mécanique quantique. Le cœur du texte a été écrit pour servir de support à un cours dispensé aux étudiants d'écoles d'ingénieurs (École Centrale, Supélec et SupOptique), inscrits au magistère de physique fondamentale de l'Université Paris-Sud, et qui avaient le courage d'étudier des sujets de physique fondamentale plusieurs soirs par semaine. Le cours, dont la structure a été pour l'essentiel imposée afin de respecter le programme suivi par les étudiants du magistère, a été rédigé en ayant le souci de produire un texte compact mais suffisamment complet pour pouvoir être utilisé de manière autonome (quelques notions mathématiques essentielles sont rappelées dans plusieurs annexes). De nombreuses références sont données afin de fournir des pistes pour un lecteur désireux d'approfondir les sujets présentés : vers des ouvrages de référence comme les livres d'A. Messiah [37], de L. Landau et E. Lifchitz [30] ou de C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë [8]. Des références plus récentes sont les excellents ouvrages de M. Le Bellac [33], J.-L. Basdevant et J. Dalibard [5] ou encore le monumental livre de C. Aslangul [3, 4] ; d'autres références spécialisées sont occasionnellement mentionnées.

Le cours s'ouvre sur un chapitre introductif rappelant quelques motivations historiques ayant conduit à la révolution quantique du début du XX^e siècle. L'exposé se poursuit avec une présentation de l'équation d'onde de Schrödinger, approche assez traditionnelle ayant l'avantage de jeter des ponts avec les acquis de physique classique des ondes. Les premiers postulats sont ensuite présentés : formalisme de Dirac, postulats de mesure et d'évolution temporelle. Le cadre ainsi dressé, un chapitre court discute succinctement le rôle des symétries et permet d'introduire des notions qui seront très utiles pour la suite de l'exposé. Nous étudions ensuite l'oscillateur harmonique et le moment cinétique. Le postulat de symétrisation est présenté. La théorie quantique (non relativiste) de l'atome d'hydrogène est exposée, puis nous discutons des méthodes d'approximation, mises en pratique pour l'étude des corrections relativistes dans l'atome d'hydrogène, et finalement les problèmes dépendant du temps (interaction atome-lumière). Ces sujets correspondent au programme du magistère d'Orsay. S'il est courant de tirer de la physique atomique les illustrations d'un premier cours de physique quantique, j'ai également choisi plusieurs applications inspirées par la matière condensée (résistance quantique, capacité quantique,

effet Hall, effet Aharonov-Bohm, courant permanent, antiferromagnétisme). Un très court chapitre consacré à l'étude de la dynamique d'une particule soumise à un champ magnétique (dans les deux situations extrêmes d'un champ uniforme ou concentré en un point) s'inscrit dans cette logique et clôt l'ouvrage. J'ai également jugé opportun d'insérer un chapitre (le 10) sur la théorie des collisions : si cette dernière a des applications évidentes et bien connues pour la physique des gaz ou la physique des particules, elle fournit aussi des outils puissants et assez intuitifs pour l'étude des phénomènes mésoscopiques¹. J'ai opté pour une présentation commençant par considérer le cas des basses dimensions (1 et 2) ; le cas tridimensionnel usuellement discuté dans les ouvrages n'est que brièvement abordé. Outre que cette approche présente des simplifications d'un point de vue didactique, une telle présentation systématique n'est à ma connaissance pas disponible dans les ouvrages, alors que la question de la mécanique quantique en basse dimension est tout à fait pertinente pour de nombreux développements modernes en physique atomique avec les progrès spectaculaires dans le domaine des atomes froids, ou pour la matière condensée. Ce chapitre est d'un niveau plus avancé que le reste du livre, cependant il présente le cadre dans lequel s'inscrit le concept de matrice S qui sera utilisé de manière intuitive dans plusieurs exercices/problèmes dans le corps de l'ouvrage.

J'ai bénéficié des conseils, remarques et encouragements de nombreuses personnes que je remercie chaleureusement : Hélène Bouchiat, Alain Comtet, Marie-Thérèse Commault, Richard Deblock, Julien Gabelli, Sophie Guéron, Thierry Jolicœur, Mathieu Langer, Alexandre Malamant, Gilles Montambaux, Nicolas Pavloff, Paolo Pedri, Hugues Pothier, Guillaume Roux, Emmanuel Trizac et Denis Ullmo. Je remercie Alain Cordier pour la confiance qu'il m'a témoignée en m'ayant proposé d'assurer ce cours, Alain Abergel pour ses conseils initiaux, Sandra Bouneau pour les vigoureuses discussions autour de la rédaction de l'exercice 2.18.

Je suis reconnaissant à Christophe Bäuerle et Laurent Saminadayar pour m'avoir fourni la superbe image de microscopie électronique reproduite sur la couverture : elle montre un réseau de fils d'argent de dimensions microscopiques déposé sur un substrat, dont ils ont étudié les propriétés de transport électronique il y a quelques années (cf. légende page ii et figure 16.1).

J'adresse de profonds remerciements à Amaury Mouchet, pour ses nombreuses suggestions et conseils, et Jean-Noël Fuchs avec qui j'ai eu l'immense plaisir de travailler dans l'équipe de mécanique quantique d'Orsay, ainsi que pour ses innombrables et toujours si pertinentes observations qui ont profondément marqué le texte ; plusieurs exercices du livre ont été rédigés avec lui.

1. La physique mésoscopique s'intéresse aux phénomènes quantiques (interférences quantiques et/ou effets de la quantification) en matière condensée.

Mécanique quantique

Mon éducation de mécanicien quantique doit beaucoup aux enseignants dont les cours lumineux m'ont permis d'entrer dans l'univers quantique : Françoise Balibar, Alain Laverne, Cécile Malegrange et Bernard Roulet.

Je remercie Caroline qui a stimulé le processus d'édition, et sans laquelle mon manuscrit dormirait peut-être encore dans mon bureau. Je suis reconnaissant à Dominique Decobecq pour tous ses conseils éditoriaux et à Marie Leclerc pour son efficacité.

Je dédie ce travail à Marie-Flore, Michel, Barbara et Andrea.

Orsay, le 22 avril 2011

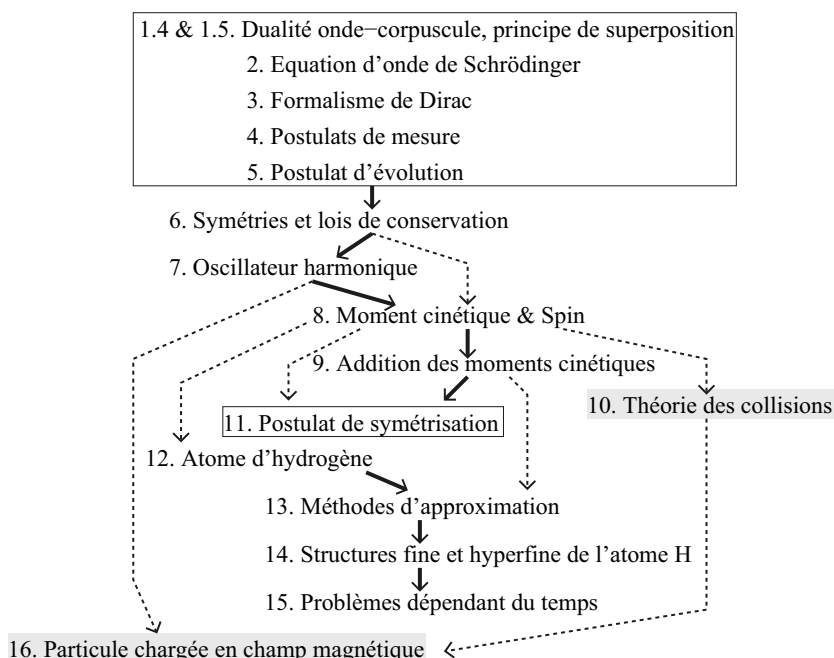
Cette seconde édition, impulsée par Lætitia Herin et mise en œuvre par Coline Laquêche, que je remercie chaleureusement, m'a donné l'occasion de corriger les coquilles de la première édition. J'en ai profité pour clarifier, restructurer ou même compléter certaines parties (chapitres 1 et 2, annexe 11.A). Un certain nombre d'exercices (5.2, 5.8, 5.9, 11.3, 12.4, 13.2, 15.3, 15.4, 16.4) et problèmes (7.1, 11.2, 15.1) ont été complétés ou simplement ajoutés.

Paris, 28 août 2014

MODE D'EMPLOI

• Structure de l'ouvrage

Le schéma suivant montre la structure de l'ouvrage. Les flèches indiquent les relations logiques entre les chapitres. Les flèches épaisses définissent un cheminement « naturel » (le programme du cours de mécanique quantique du magistère d'Orsay).



Les deux branches qui ne s'inscrivent pas dans le chemin principal correspondent à deux chapitres ajoutés à la version initiale des notes de cours. Le chapitre 10, qui pourra être sauté sans nuire à la compréhension globale, est d'un niveau plus ardu.

• Structure des chapitres

Chaque chapitre est organisé selon le schéma suivant :

1. Le cours, au sein duquel sont insérés de petits exercices d'illustration ;
2. À la fin du chapitre, sont énoncées les idées importantes qui ont été introduites ;
3. Annexes ;
4. Exercices, dont le degré de difficulté est précisé : F, MF, D ou TD ;
5. Problèmes.

NOTATIONS

$\stackrel{\text{def}}{=}$	égal par définition	$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	matrices de Pauli
$\approx$	approximativement égal à	$Y_\ell^m(\theta, \varphi)$	harmonique sphérique
$\sim$	de l'ordre de	$\Gamma(z)$	fonction Gamma d'Euler
$\propto$	proportionnel à	$\psi(z)$	fonction digamma
$\mathbb{N}$	ensemble des entiers naturels	$C = \psi(1)$	constante d'Euler-Mascheroni
$\mathbb{Z}$	ensemble des entiers relatifs	$B(\mu, \nu)$	fonction Beta d'Euler
$\mathbb{R}$	ensemble des nombres réels	$H_n(z)$	polynôme d'Hermite
$\mathbb{C}$	ensemble des nombres complexes	$P_n(z), P_n^m(z)$	polynômes de Legendre
$\text{Re}(\dots)$	partie réelle	$L_n^\alpha(z)$	polynôme de Laguerre
$\text{Im}(\dots)$	partie imaginaire	$J_\nu(z)$	fonction de Bessel
$\bar{z}$ ou z^*	complexe conjugué de z	$N_\nu(z)$	fonction de Neumann (Bessel de 2ème espèce)
$\text{Tr} \{ \}$	trace	$H_\nu^{(1)}(z)$	fonction de Hankel (Bessel de 3ème espèce)
$\langle \dots \rangle$	moyenne	$K_\nu(z)$	fonction de MacDonald (Bessel modifiée de 3ème espèce)
$\text{Var}(\dots)$	variance	$\hbar = h/(2\pi)$	constante de Planck
ΔX	écart-type ($= \sqrt{\text{Var}(X)}$)	c	célérité de la lumière
$\theta_H(x)$	fonction de Heaviside	ϵ_0	permittivité diélectrique du vide
$\delta(x)$	distribution de Dirac	μ_0	permittivité du vide
$\delta_{i,j}$	symbole de Kronecker	m_e	masse de l'électron
$\tilde{\psi}(k)$	transformée de Fourier $\psi(x)$	q_e	charge de l'électron
$f * g$	produit de convolution	$e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$	couplage électromagnétique
$\vec{\nabla}$	gradient	m_*	masse effective
Δ	Laplacien	Principales unités (système MKSA)	
$\psi(\vec{r}; t)$	fonction d'onde	m	mètre
$\rho_\psi(\vec{r}; t)$	densité de probabilité	kg	kilogramme
$\vec{J}_\psi(\vec{r}; t)$	densité de courant de probabilité	s	seconde
$\mathcal{H}$	espace de Hilbert	J	Joule
$ \psi\rangle$	vecteur d'état (ket)	K	Kelvin
$\langle\psi $	dual du vecteur d'état (bra)	A	Ampère
$\langle\psi \chi\rangle$	produit scalaire	C	Coulomb
$\otimes$	produit tensoriel	V	Volt
$[,]$	commutateur	Ω	Ohm
$\mathbf{1}_N$	matrice identité de taille N	T	Tesla
H	hamiltonien	F	Farad
$\vec{J}$	moment cinétique (générique)		
$\vec{\ell}$	moment cinétique orbital		
$\vec{S}$	moment cinétique de spin		

1.1 QU'EST-CE QUE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE ?

Ses fondateurs considéraient la mécanique quantique comme le cadre théorique permettant de décrire le comportement de la matière et de la lumière aux échelles atomiques et subatomiques. Plus tard, avec la découverte de phénomènes quantiques macroscopiques, cette définition est néanmoins apparue trop restrictive. Cependant la définition du domaine quantique est déjà une question très délicate, aussi nous en resterons à ce premier point de vue, qui permet de toucher du doigt assez aisément la nécessité d'un abandon des concepts de la physique dite classique (nous entendons par là, la mécanique newtonienne et l'électromagnétisme) lorsque l'on s'intéresse aux échelles atomiques et subatomiques. Les notions qui constituent le socle de la physique classique ont été forgées à partir de notre expérience immédiate, or, si nous pouvons espérer deviner les lois fondamentales qui régissent le mouvement des corps matériels en analysant le mouvement d'une boule de billard, ou celui des planètes à l'aide d'un télescope, il n'y a *a priori* pas de raison évidente pour que ces lois s'appliquent encore dans le monde atomique et subatomique¹. Il n'est donc pas surprenant, rétrospectivement, que la description du comportement des atomes requière d'autres concepts que ceux utilisés pour analyser la dynamique des corps macroscopiques.

Commençons par quelques considérations historiques afin de dresser un rapide tableau de l'état de la physique à la fin du XIX^e siècle, à la veille de plusieurs grands bouleversements. Elles nous aideront à mieux saisir les paragraphes suivants qui seront consacrés à une description succincte de la structure des théories physiques et de la mécanique quantique en particulier.

1. Aujourd'hui les progrès de la physique quantique nous permettent de « voir » les atomes à l'aide des microscopes à force atomique ou à effet tunnel (figure 2.2). C'était loin d'être le cas à la fin du XIX^e siècle et les propriétés du monde atomique ne pouvaient qu'être déduites indirectement d'observations aux échelles macroscopiques. La réalité des atomes était contestée par quelques grands noms de la physique (par exemple Ernst Mach), tenants d'une approche « continue » opposée à la description « atomiste ». On peut considérer que la question de l'existence des atomes fut tranchée définitivement par la validation expérimentale, en 1908, par Jean Perrin (1870-1942, prix Nobel 1926), de la description du mouvement brownien proposée par Einstein en 1905. Le mouvement erratique d'une petite particule déposée à la surface de l'eau révèle les chocs incessants avec les molécules du liquide.

1.2 BRÈVES CONSIDÉRATIONS HISTORIQUES

Faisons un état des lieux en cette fin de XIX^e siècle. Il va de soi qu'une présentation de quelques pages ne peut être que très schématique. Nous évoquons ici les grandes théories cadres que sont : *la mécanique newtonienne, l'électromagnétisme et la thermodynamique/physique statistique*.

1.2.1 La mécanique newtonienne

On peut faire remonter les premiers balbutiements de la mécanique newtonienne au début du XVII^e siècle avec la formulation du principe d'inertie par Galileo Galilei (1564-1642). Les principes de la mécanique, dont la formulation fut rendue possible par l'invention du calcul différentiel attribuée à Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716) et Isaac Newton (1642-1727), furent établis par ce dernier (I. Newton, *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, 1687).

La mécanique newtonienne, en s'appuyant sur les notions de la cinématique (position, vitesse, accélération,...) et celle de force, permet de prédire le mouvement des corps solides à l'aide d'un certain nombre de lois universelles :

- Le principe d'inertie : les lois de la mécanique sont les mêmes dans tous les référentiels inertiels.
- Le principe d'action-réaction.
- La relation fondamentale de la dynamique (RFD) reliant l'accélération $\vec{a}$, i.e. une quantité cinématique, d'une particule de masse m , à la force $\vec{F}$ exercée sur celle-ci, i.e. une quantité dynamique² : $m \vec{a} = \vec{F}$.
- On doit ajouter à ces trois principes une quatrième loi fondant la théorie newtonienne de la gravitation : la force d'attraction, $\vec{F}_G = -\frac{GMm}{r^2}\vec{u}_r$, exercée par une masse M à l'origine, sur une masse en $\vec{r} = r\vec{u}_r$, où $G \simeq 6.67 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ est la constante universelle de gravitation (il semble exister une controverse entre Newton et Robert Hooke (1635-1703) quant à la paternité de la loi en $1/r^2$).

La théorie newtonienne a connu des succès éclatants, principalement pour la description du mouvement des corps célestes, culminant avec la découverte de Neptune par Urbain Le Verrier (1811-1877) grâce à l'analyse des aberrations de la trajectoire d'Uranus. Communiquée le 31 août 1846 devant l'Académie des sciences de Paris, sa prédiction de l'existence d'une nouvelle planète fut confirmée le 23 septembre par une observation de Johann Galle.

2. Nous sommes tellement habitués à la RFD que nous en oublions à quel point celle-ci ne va pas de soi ! C'est si vrai que des propositions antérieures reliaient la force à la vitesse, ce qui est contredit par une analyse expérimentale précise.

1.2.2 L'électromagnétisme

Parallèlement à la théorie du mouvement des corps matériels, les phénomènes de natures électrique et magnétique étaient décrits par un certain nombre de lois finalement unifiées dans ce qui est aujourd'hui appelé l'électromagnétisme.

La théorie des phénomènes électriques s'est développée principalement dans la seconde moitié du XVIII^e siècle. On peut citer les noms de Charles Augustin Coulomb (1736-1806), d'Alessandro Volta (1745-1827) et de Denis Poisson (1781-1840).

Les phénomènes magnétiques étaient décrits depuis longtemps (les aimants furent découverts par les Grecs dès l'Antiquité), mais ce n'est qu'en 1820 que la relation entre les phénomènes magnétiques et électriques fut démontrée par une expérience réalisée par Hans Christian Ørsted (1777-1851) montrant que l'aiguille d'une boussole est influencée par le courant électrique traversant un fil disposé à proximité. Les contributions importantes furent apportées par André Marie Ampère (1775-1836), Jean-Baptiste Biot (1774-1862) et Michael Faraday (1791-1867). La construction du bel édifice fut parachevée par James Clerk Maxwell (1831-1879) qui donna une vision unifiée de l'ensemble des phénomènes à travers les fameuses quatre équations qui portent aujourd'hui son nom, présentées devant la Royal Society en 1864. Il est aujourd'hui considéré comme un des précurseurs de la vision moderne de la physique, pour avoir donné une place centrale à la notion de symétrie dans une théorie physique. C'est apparemment des considérations purement esthétiques (on dirait aujourd'hui « de symétrie ») qui le conduisirent à ajouter un dernier terme dans la dernière des quatre équations. Ces quatre équations aux dérivées partielles décrivent la dynamique des champs électrique $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et magnétique $\vec{B}(\vec{r}, t)$: un premier couple d'équations fixe des contraintes sur les champs $\text{div} \vec{B} = 0$ et $\text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$ (les deux champs dérivent des potentiels scalaire et vecteur) ; un second couple d'équations $\text{div} \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho$ et $\text{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}$ couple les champs à des sources les générant, densité de charge ρ et densité de courant $\vec{j}$. C'est à Oliver Heaviside (1850-1925) qu'on doit cette forme élégante des équations de Maxwell, que ce dernier avaient présentées sous la forme de vingt équations.

Mentionnons également le rôle déterminant de Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894) qui mit en évidence expérimentalement l'existence des ondes électromagnétiques, prédites par les équations de Maxwell, et montra que la lumière est une forme de rayonnement électromagnétique.

1.2.3 La physique statistique

La dernière des théories cadres est la physique statistique, à laquelle on peut attacher les noms de Rudolf J.E. Clausius (1822-1888) et J. C. Maxwell, pour le développement de la théorie cinétique des gaz, J. W. Gibbs (1839-1903) et Ludwig Boltzmann (1844-1906). La physique statistique s'attache à l'étude des systèmes à très grand

nombre de degrés de liberté (par exemple les gaz, les solides, etc.) et permet de déduire leurs propriétés aux échelles *macroscopiques* à partir de lois gouvernant les constituants élémentaires aux échelles *microscopiques* (par exemple l'échelle atomique pour les gaz). Basée sur un langage probabiliste, la masse d'information décrivant les détails de l'échelle microscopique est éliminée au profit d'un petit nombre de grandeurs : entropie statistique, température, pression, etc. Contrairement à la mécanique newtonienne et à l'électrodynamique, elle ne vise pas à décrire la dynamique des objets *élémentaires*, mais cherche au contraire à dégager des lois *fondamentales* contrôlant les phénomènes *collectifs*³. La relation entre la physique statistique et les autres théories cadres est subtile puisque le choix de la dynamique microscopique (classique ou quantique) est indépendant de l'idée centrale du *passage de l'élémentaire au collectif*.

1.2.4 Les impasses de la théorie classique

Si on résume la situation en cette fin de XIX^e siècle, il y a donc d'une part une théorie de la dynamique de la matière (la mécanique newtonienne), on pourrait parler de physique *corpusculaire*, d'autre part la théorie électromagnétique, qui est clairement de nature *ondulatoire* puisqu'elle décrit la dynamique des champs électrique et magnétique, ébranlements d'un milieu – le mystérieux éther ? – alors mal défini. Comme Hertz l'a démontré expérimentalement, cette théorie décrit les phénomènes lumineux : c'est une théorie du rayonnement. L'interaction entre matière et rayonnement est assurée d'une part par l'introduction de la force de Lorentz $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ dans la relation fondamentale de la dynamique, et d'autre part par les termes de sources donnant naissance aux champs, densité de charge ρ et densité de courant $\vec{j}$, dans les équations de Maxwell (figure 1.1). En dépit des succès remarquables de ces deux théories, le bel édifice était remis en question à la fin du XIX^e siècle par un certain nombre de problèmes, loin d'être secondaires comme nous le verrons, qui ne trouvaient pas de solution dans ce cadre.

Mentionnons une première difficulté : les équations de Newton et les équations de Maxwell ne sont pas invariantes sous le même groupe de transformations d'espace-temps : le groupe de Galilée laisse les premières invariantes tandis que le groupe de symétrie des secondes est le groupe de Poincaré. Autrement dit les deux théories ne sont pas affectées de la même manière par les transformations spatio-temporelles, ce qui contredit l'idée fondamentale de l'invariance des lois de la physique lors des changements de référentiels inertiels. L'incompatibilité entre groupes de symétrie des équations de Newton et de Maxwell fut résolue par l'élaboration, en 1905, d'une

3. Notons que la physique statistique s'oppose en cela à la thermodynamique : cette dernière se fonde directement sur l'échelle macroscopique et permet de construire des *théories phénoménologiques*, par contraste avec la physique statistique qui vise à construire des *théories microscopiques*.

1.2. Brèves considérations historiques

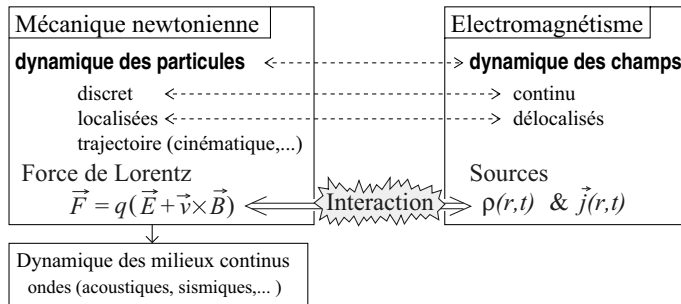


Figure 1.1- La dichotomie (classique) corpuscule-onde.

nouvelle mécanique (non quantique) permettant de décrire les corps aux très grandes vitesses (comparables à la vitesse de la lumière) : la théorie de la relativité restreinte d'Einstein qui remet en cause les conceptions sur la structure de notre espace-temps. Le cœur de la théorie de la relativité restreinte, *le principe de relativité*, i.e. l'universalité des lois de la physique (mécanique *et* électromagnétisme) dans tous les référentiels inertiels, apparaît comme une réponse aux expériences d'Albert Michelson et Edward Morley (entre 1881 et 1885) démontrant le caractère absolu de la vitesse de la lumière.

Les problèmes profonds de la physique classique portent sur les mécanismes d'*interaction matière-rayonnement*. La discussion de ces questions est inextricablement liée à l'exploration de la structure de la matière aux échelles atomiques et sub-atomiques.

a) La recherche des constituants élémentaires

• Les atomes

Bien que l'hypothèse atomique (de « *ατομος* », indivisible) remonte à l'Antiquité grecque, ce n'est qu'au tout début du XX^e siècle que l'existence des atomes fut mise en évidence en 1908 de manière indubitable par Jean Perrin, par son analyse du mouvement brownien et sa mesure du nombre d'Avogadro ($N_A \approx 6.023 \times 10^{23}$ atomes par mole). Les *fluctuations*, le mouvement erratique d'un grain de pollen à la surface de l'eau trouvant son origine dans les chocs incessants avec les molécules d'eau, révèlent la nature *discrète* de la matière.

• Les électrons

Les expériences d'ionisation des gaz raréfiés jouèrent un rôle important jusqu'à la démonstration, en 1897, de l'existence de l'électron par Joseph John Thomson (1856-1940, prix Nobel 1906), qui observa la déviation de rayons cathodiques (faisceaux

d'électrons) d'une lampe à vide par un champ magnétique. L'expérience fournit une mesure du rapport de la charge par la masse q_e/m_e . La mesure de la charge de l'électron $q_e \simeq -1.6 \times 10^{-19}$ C, sera réalisée en 1910 par Robert Andrews Millikan (1868-1953, prix Nobel 1923).

• La structure de l'atome

Au début du XX^e siècle, deux modèles d'atome sont proposés. D'une part un modèle *planétaire*, proposé par Perrin en 1901, d'électrons interagissant avec un noyau chargé positivement via l'interaction coulombienne, d'autre part un modèle *globulaire*, proposé par Thomson en 1903, d'électrons se mouvant sur un fond continu chargé positivement assurant la neutralité électrique de l'atome (figure 1.2) [24]. La question sera tranchée par une série d'expériences dues à deux étudiants d'Ernest Rutherford (1871-1937, prix Nobel 1908), Hans Geiger (1882-1945) et Ernest Marsden (1889-1970) en 1909, et leur interprétation par Rutherford en 1911. Un faisceau de particules α (des noyaux d'hélium) est envoyé sur une mince ($\sim 100 \mu\text{m}$) feuille d'or. Si la plupart des particules α ne sont pas déviées, certaines sont diffusées avec de grands angles. L'observation de *rétrodiffusion* avait particulièrement frappé Rutherford et invalide le modèle de J. J. Thomson : la rétrodiffusion des particules α fortement énergétiques ($v \approx 1.8 \times 10^7$ m/s, i.e. $E_c \approx 7$ MeV) ne peut s'expliquer que parce qu'elles rencontrent une concentration extrêmement forte de charges, le noyau atomique. Rutherford va plus loin et explique les données expérimentales à l'aide de son modèle théorique de diffusion d'une charge *ponctuelle* dans un champ coulombien (la particule α dans le champ du noyau d'or).

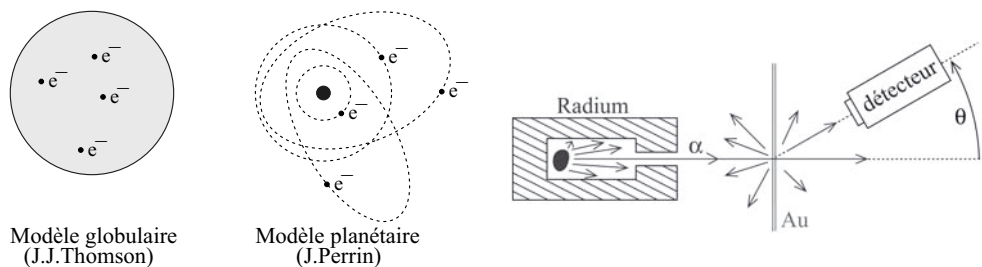


Figure 1.2 – La structure de l'atome.

À gauche : Deux modèles d'atomes. À droite : Principe des expériences de Geiger, Marsden et Rutherford : bombardement d'une feuille d'or (épaisseur $\sim 100 \mu\text{m}$) par des particules α émises par une source radioactive de radium.

• Les ions et les isotopes

Francis William Aston (1877-1945, prix Nobel 1922) met au point en 1919 la technique de *spectroscopie de masse* consistant à dévier un faisceau d'atomes ionisés (des

ions) par un champ magnétique et à les trier en fonction de leur masse (d'où le nom de la technique). Il montre d'une part que les masses des noyaux sont (approximativement) *quantifiées* en multiples entiers de la masse du proton (le noyau de l'atome d'hydrogène), et d'autre part que la masse du noyau d'un même élément chimique peut fluctuer de quelques unités. L'existence de différents *isotopes* est derrière cette observation⁴.

• La radioactivité

Une découverte importante, en 1896, est le phénomène de *radioactivité* par Henri Becquerel (1852-1908, prix Nobel 1903). Trois types de radioactivité furent observés : l'émission α (un noyau d'hélium), l'émission β (un électron) et l'émission γ (un photon). Le phénomène de radioactivité est une *transition* entre deux états du noyau atomique (émission γ) ou la *transmutation* d'un noyau (émission α et β). La découverte de la radioactivité était donc annonciatrice de la découverte du noyau atomique et son occurrence stochastique de la nature probabiliste de la théorie quantique (cf. chapitre 2 de l'ouvrage [3])

b) Impasse n° 1 : L'instabilité classique des atomes

Le problème qui paraît le plus grave est relatif à la question de la stabilité de la matière. L'expérience de Geiger-Marsden-Rutherford fournit donc une image claire pour la structure de l'atome : des électrons tournant autour d'un noyau chargé positivement. Or l'électron accéléré dans le champ électrique du noyau devrait émettre un rayonnement électromagnétique et voir son énergie (mécanique) diminuer. Le rayon de l'orbite de l'électron devrait alors diminuer et l'atome s'effondrer sur lui-même. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, on trouve une durée de vie de 10^{-11} s (cf. exercice 15.5) ! *La physique classique prédit donc que les atomes ont une durée de vie finie*, extrêmement courte, ce qui est (heureusement pour nous) contredit par l'expérience.

c) Impasse n° 2 : Absorption et émission de lumière

L'absorption et l'émission de lumière par la matière révèlent un caractère discontinu qui ne s'explique pas dans le cadre classique.

4. Le nombre de neutrons dans le noyau varie d'un isotope à l'autre, par exemple dans le carbone 12 (6 protons et 6 neutrons) et le carbone 14 (6 protons et 8 neutrons). Les propriétés chimiques des isotopes sont identiques, puisqu'elles dépendent de la structure électronique, i.e. du nombre de protons, seule la masse varie. Pour éviter tout anachronisme, notons que le neutron, dont l'existence a été conjecturée par Rutherford en 1920, ne sera découvert qu'en 1932 par Chadwick.

• *Spectroscopie atomique*

Les expériences d'absorption ou d'émission de la lumière par un gaz atomique montrent que la lumière n'est absorbée/émise qu'à certaines fréquences *discrètes*⁵. Cet ensemble de fréquences constitue le *spectre* de l'atome et joue le rôle de sa « carte d'identité ».

Cette observation sera à l'origine du modèle de l'atome de Bohr : essentiellement le modèle d'atome planétaire auquel on ajoute une règle de quantification.

• *Effet photoélectrique*

Découvert par Heinrich Rudolf Hertz (1857-1894) en 1887, l'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par un métal soumis à un rayonnement ultraviolet.

Décrivons l'expérience : un morceau de métal est placé dans le vide et éclairé par un rayonnement ultraviolet monochromatique de pulsation ω . Une différence de potentiel V est appliquée entre le métal et une cathode. Le courant I d'électrons arrachés de l'anode est mesuré en fonction de la tension V (figure 1.3). Lorsque la tension est inférieure à la *contre-tension* V_0 les électrons sont repoussés par la cathode et le courant électrique ne passe pas. V_0 fournit donc une mesure de l'énergie cinétique maximale des électrons arrachés : $\max[E_c^{\text{el.}}] = -V_0$.

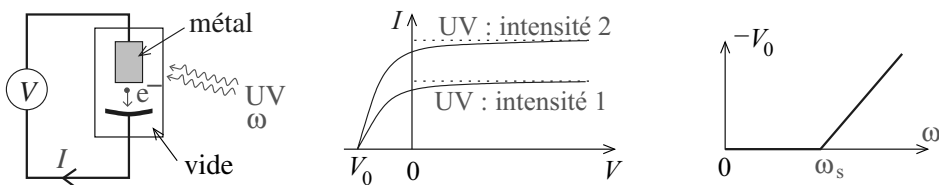


Figure 1.3 - Effet photoélectrique.

À gauche : émission d'électrons par un métal soumis à un rayonnement ultraviolet monochromatique de pulsation ω . Au milieu : courant d'électrons arrachés en fonction de la tension. À droite : contre-tension en fonction de la pulsation.

En augmentant l'intensité lumineuse du rayonnement monochromatique on augmente l'énergie déposée dans le métal. On pourrait penser qu'on augmente ainsi l'énergie cinétique des électrons arrachés, cependant il n'en est rien comme l'illustre la figure, puisque la *contre-tension* V_0 est indépendante de l'intensité lumineuse. Seul le flux d'électrons arrachés varie.

La contre-tension est tracée en fonction de la fréquence du rayonnement (figure 1.3). On observe l'existence d'une *fréquence de seuil* ω_s en-deçà de laquelle

5. Il est intéressant de noter que dès 1905, Henri Poincaré (1854-1912) suggérait l'analogie entre l'existence des raies spectrales atomiques et les harmoniques de certaines équations différentielles apparaissant dans d'autres domaines de la physique (acoustique, théorie de l'élasticité, électromagnétisme) [12].

la lumière n'est pas absorbée. Au-delà de cette fréquence, la relation entre contre-tension (i.e. énergie cinétique maximale des électrons) et fréquence est linéaire

$$E_c^{\text{el.}} = \hbar (\omega - \omega_s) \quad (1.1)$$

où $\hbar$ est une constante universelle (alors que ω_s dépend du métal, $\hbar$ en est indépendante). L'existence du seuil, incompréhensible classiquement, suggère à Albert Einstein (1879-1955, prix Nobel 1921) en 1905 que **l'énergie du rayonnement monochromatique ne peut être absorbée que par quanta** $E_{\text{quantum}} = \hbar \omega$. L'équation (1.1) s'interprète comme un bilan d'énergie : l'énergie déposée par le rayonnement monochromatique (un multiple entier de « paquets » $E_{\text{quantum}} = \hbar \omega$) se distribue pour partie en énergie cinétique de l'électron, et pour partie en énergie potentielle nécessaire pour l'arracher au métal, au minimum $\hbar \omega_s$, expliquant le seuil.

• Équilibre thermique lumière/matière

Dans une étoile, les photons émis lors de la nucléo-synthèse diffusent depuis le cœur vers les couches externes. Les multiples processus d'émission/absorption conduisent à l'existence d'un équilibre thermique entre matière et lumière. En supposant le système isolé et à l'équilibre (« corps noir »), ce qui suppose que les pertes d'énergie sont faibles relativement, la thermodynamique prédit que la distribution des fréquences du rayonnement est une loi *universelle*, uniquement fonction de la température T (remarquons que la température correspondant au rayonnement émis par l'étoile est celle des couches externes, quelques milliers de K, et non du cœur beaucoup plus chaud, quelques millions de K).

Notons $u(\omega, T)d\omega$ la densité (volumique) d'énergie des fréquences de l'intervalle $[\omega, \omega + d\omega]$. La physique classique prédit une densité présentant le comportement $u_{\text{RJ}}(\omega, T) \propto T\omega^2$ (la loi de Rayleigh-Jeans, obtenue par Lord Rayleigh en 1900 puis corrigée en 1905 par James Jeans, est déduite du théorème d'équipartition de l'énergie de la physique statistique). Elle conduit à une densité d'énergie *infinie* après intégration sur les fréquences : Ehrenfest évoquera en 1911 une « catastrophe ultraviolette » pour désigner cette divergence $\int_0^\infty d\omega u_{\text{RJ}}(\omega, T) = \infty$. D'autre part, Wilhelm Wien (1864-1928, prix Nobel 1911) avait obtenu en 1894 la loi portant son nom $u_{\text{Wien}}(\omega, T) = \omega^3 f(\omega/T)$; pour rendre compte des expériences, il propose en 1896 une forme exponentielle *décroissante*, $f(x \rightarrow \infty) \simeq A e^{-Bx}$ où A et B sont des constantes *universelles*.

En 1900, Max Planck (1858-1947, prix Nobel 1918) démontre la loi qui portera son nom, interpolant entre les lois de Rayleigh-Jeans et de Wien et en bon accord avec l'expérience :

$$u_{\text{Planck}}(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \hbar \omega \frac{1}{\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1}, \quad (1.2)$$