Physique quantique

Nous allons nous intéresser au développement de la physique qui tente de décrire les caractéristiques de particules au sein des atomes.

Le photon

Rappelons le résultat essentiel déduit de l'effet photoélectrique : La lumière ne peut interagir avec les électrons d'un atome que par paquets d'énergie appelés quanta. Chaque quantum est associé à une entité appelée photon, dont l'énergie est donnée par la formule d'Einstein :

$$\boxed{E = h\,\nu}$$

Où ν est la fréquence associée à la radiation lumineuse et h est la constante de Planck :

$$\boxed{h = 6{,}62\,.\,10^{-34}}$$

En appliquant la formule de la dynamique relativiste pour une particule de masse nulle, telle qu'est supposée être le photon on obtient :

$$\boxed{E = p\,c}$$

Où p est la quantité de mouvement du photon, ce qui par identification conduit à :

$$\boxed{p = \frac{h\,\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi}\,k}$$

où λ est la longueur d'onde de la radiation et k son nombre d'onde.

L'electron autour de l'atome

Soit un électron autour d'un atome. Son énergie mécanique totale est la somme de son énergie cinétique et son énergie potentielle V, soit :

$$E = \frac{1}{2}\, m\, v^2 + V(x, y, z, t)$$

Ou encore, en introduisant la quantité de mouvement p :

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2\, m} + V(x, y, z, t)}$$

Selon la vue de Louis de Broglie, un électron présente un caractère ondulatoire, observé sous forme de figures de diffraction. Cela conduit à l'idée de décrire son comportement autour d'un atome par une fonction d'onde $\Phi(x, y, z, t)$.

Or grâce au théorème de Fourier, toute onde peut être décrite à l'aide d'ondes planes sinusoïdales propagatives décrites par une fonction complexe de la forme :

$$\boxed{\Phi(x, y, z, t) = \Phi_m\, e^{i\,(k_x\, x + k_y\, x + k_z\, z - \omega\, t)} \qquad \text{avec } \omega = k\, v}$$

Où Φ_m est l'amplitude complexe de l'onde, k son nombre d'onde, et v la vitesse de l'onde.

En adoptant la correspondance de De Broglie , on obtient la quantité de mouvement associé à une telle onde – particule :

$$\boxed{\vec{p} = \frac{h}{2\pi}\, \vec{k}}$$

D'autre part on a également :

$$\boxed{\omega = 2\, \pi\, \nu}$$

ν étant la fréquence de l'onde.

On en déduit :

$$\boxed{\Phi(x, y, z, t) = \Phi_m\, e^{i\, 2\pi \left(\frac{p_x\, x + p_y\, x + p_z\, z}{h} - \nu\, t\right)}}$$

Soit en dérivant :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \left(i \frac{2\pi}{h}\, p_x\right)^2 \Phi$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \left(i \frac{2\pi}{h}\, p_y\right)^2 \Phi$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = \left(i \frac{2\pi}{h}\, p_z\right)^2 \Phi$$

Soit :

$$\Delta\Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 \left({p_x}^2 + {p_y}^2 + {p_z}^2\right) \Phi$$

Finalement :

$$\boxed{\Delta\Phi = -\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 p^2\, \Phi}$$

De même :

$$\boxed{\frac{\partial\, \Phi}{\partial\, t} = -2\pi\, i\, \nu\, \Phi}$$

On en déduit :

$$i\, \frac{h}{2\pi}\, \frac{\partial\, \Phi}{\partial\, t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \Delta\Phi = \left(h\nu + \frac{p^2}{2\, m}\right) \Phi$$

soit :

$$\boxed{i\, \frac{h}{2\pi}\, \frac{\partial\, \Phi}{\partial\, t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \Delta\Phi - V(x, y, z, t)\Phi = \left(h\nu - \frac{p^2}{2\, m} - V(x, y, z, t)\right) \Phi}$$

En considérant par principe de correspondance que hν représente comme dans le cas du photon l’énergie de l’électron, on est amené à postuler que le mebre de droite de la relation précédente est nul, ce qui aboutit à l’équation de schrôdinger :

$$\boxed{i\, \frac{h}{2\pi}\, \frac{\partial\, \Phi}{\partial\, t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \Delta\Phi - V(x, y, z, t)\Phi = 0}$$

On postule ainsi qu’un électron autour d’un atome dans un champ de potentiel V(x,y,z,t) crée essentiellement par les particules proches et chargées l'environnant (noyau de l'atome notamment et autres électrons) est caractérisé par une fonction d'onde solution de cette équation.

Or pour une onde plane, nous avons vu d'après ce qui précède :

$$i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = h\nu\, \Phi = E\, \Phi$$

Autrement dit Φ est une valeur propre de l'opérateur vectoriel fonctionnel, appelé opérateur énergie :

$$\boxed{H \;:\; \Phi \;\rightarrow\; i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Phi}{\partial t}}$$

Or d'après l'équation de Shrödinger, cet opérateur n'est autre que l'opérateur suivant appelé hamiltonien et noté H :

$$\boxed{H \;:\; \Phi \;\rightarrow\; -\frac{1}{2m}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \Delta\Phi + V(x,y,z,t)\, \Phi}$$

Comme dans le cas d'une corde vibrante et comme conséquence de la théorie de Fourier, la fonction d'onde Φ associée à un électron sera considérée comme une combinaison de fonctions Φ_n appelées états propres et définies comme étants les vecteurs propres de l'opérateur hamiltonien c'est-à-dire vérifiant :

$$\boxed{H \;\; \Phi_n = \; E_n \, \Phi_n}$$

Où E_n représente le niveau d'énergie de l'électron dans l'état Φ_n.