

Physique Quantique (I)

Table des Matières

1	Introduction	9
1.1	L'hypothèse atomique	9
1.2	L'électron	10
1.3	Les ions	13
1.4	Modèles d'atome	14
2	La radioactivité	17
2.1	La radioactivité : découverte et faits expérimentaux	17
2.2	Loi de décroissance radioactive	21
3	Les expériences de Rutherford	25
3.1	Principes généraux des expériences	25
3.2	Généralités sur les collisions élastiques à deux corps	26
3.2.1	Lois de conservation	26
3.2.2	Réduction du problème à deux corps en interaction centrale	27
3.3	Déviation d'une particule chargée par un noyau d'atome	28
3.4	Section efficace de collision	30
3.5	Section efficace différentielle pour la diffusion Rutherford	32
4	Quantification de l'énergie : le rayonnement thermique	35
4.1	Le rayonnement thermique	35
4.1.1	Faits expérimentaux et nature physique du rayonnement thermique	35
4.1.2	Description phénoménologique du rayonnement thermique [13]	38
4.1.3	Loi de Stefan (1879)	41
4.2	Loi de Planck (1900)	43
4.2.1	Retour sur la loi du déplacement de Wien	43
4.2.2	Formule de Rayleigh - Jeans	44
4.2.3	Loi de Planck	49

5	Quantification de l'énergie : le photon	53
5.1	L'effet photoélectrique	53
5.1.1	Découverte et faits expérimentaux	53
5.1.2	L'interprétation d'Einstein (1905)	54
5.2	Le photon	57
5.2.1	Relation de dispersion du photon	57
5.2.2	Comparaison avec la description corpusculaire classique de la pression de radiation	58
5.3	L'effet Compton	59
5.3.1	Diffusion des rayons X par les atomes	60
5.3.2	Les expériences de Compton et leur interprétation (1921-1923)	60
6	Structure atomique, raies spectrales, théorie de Bohr	67
6.1	Spectre de raies	67
6.1.1	Élargissement des raies spectrales	67
6.1.2	Formule de Balmer et généralisation de Ritz	69
6.2	Le modèle de Bohr (1913)	70
6.2.1	Difficultés du modèle planétaire et proposition de Bohr	70
6.2.2	Orbites stationnaires de Bohr	71
7	Quantification de l'énergie : confirmations	77
7.1	Le phénomène de résonance optique	77
7.2	Les expériences de Lenard	78
7.3	Les expériences de Franck et Hertz (1914)	80
8	L'Ancienne Théorie des Quanta	83
8.1	Rudiments de Mécanique Analytique	83
8.1.1	Principe de moindre action (PMA) et équations de Lagrange	83
8.1.2	Équations de Hamilton	88
8.1.3	Équation de Hamilton - Jacobi	90
8.1.4	Crochets de Poisson	93
8.2	La règle de Planck pour l'oscillateur harmonique	94
8.3	Les règles de quantification de Bohr - Wilson - Sommerfeld	96
8.3.1	Généralisation de la règle de Bohr	96
8.3.2	Application à l'atome d'hydrogène	96
8.3.3	Corrections relativistes	99

9	Structure du noyau atomique	103
9.1	Charge du noyau	103
9.2	Rayon du noyau	105
9.3	Composition du noyau	108
9.4	Energie de liaison du noyau	109
9.4.1	Défaut de masse	109
9.4.2	Formule de Weizsäcker et le modèle de la goutte liquide	110

Préambule

La première partie du cours (ch. 1 à 9) est consacrée à une sorte d'état des lieux des aptitudes de la Physique Classique à expliquer les phénomènes atomiques ou subatomiques et certaines propriétés du rayonnement électromagnétique. On verra ainsi que, à la charnière entre le XX^{ème} siècle et le précédent, des expériences fondamentales ont peu à peu accumulé des évidences imposant une révision complète et révolutionnaire des concepts classiques quand il s'agit de décrire des phénomènes survenant à l'échelle dite microscopique. La remise en cause dont il sera question par la suite n'est en fait qu'une face du bouleversement presque total qui s'est produit à cette époque, trouvant son couronnement dans la fin des années 20 par l'achèvement de l'édification d'une nouvelle mécanique, la Mécanique Quantique. L'autre face est essentiellement constituée par l'émergence des idées relativistes, engendrées elles aussi sous la pression des faits expérimentaux et formulés par Einstein dans une démarche dont l'audace et l'élégance figurent au panthéon des prouesses de l'esprit humain.

Ces deux avancées majeures se rejoignent souvent et se sont enrichies mutuellement en partageant certains concepts. En théorie relativiste, il est concevable de créer une paire particule-antiparticule par la focalisation de rayonnements électromagnétiques de haute énergie : la matière naît de la lumière et le phénomène inverse est tout autant possible ; ainsi, le nombre de particules de matière n'est pas fixé, les seuls principes à l'œuvre étant celui de la conservation de l'énergie, traduit par la formule célèbre dite de l'équivalence masse-énergie $E = mc^2$ associé au principe de conservation de l'impulsion. De la même façon, en Mécanique Quantique non-relativiste, il est courant de rencontrer des situations où la brique élémentaire du champ considéré est une entité parfaitement définie¹, le nombre de ces objets irréductibles ne se conservant pas toujours lors des processus élémentaires. Par exemple, les vibrations d'un solide parfaitement cristallisé se décrivent par des *quanta* élémentaires (phonons) dont le nombre peut varier : dans un métal, un électron presque libre crée ou absorbe des phonons par suite des collisions avec les ions du réseau. Dans le même ordre d'idée, la Mécanique Statistique ou le Problème à N corps empruntent depuis longtemps des notions ou des techniques construites pour la Théorie Quantique des Champs et la Physique des Hautes Énergies. L'unification des idées (et souvent des techniques) repose sur l'omniprésence de concepts liés à la symétrie (de l'espace, du temps ou de concepts plus abstraits comme l'invariance de jauge) et à la nécessité de principes variationnels, définissant une structure sous-jacente universelle. Il n'est pas exagéré de dire que toute la Physique est construite sur l'exploitation systématique de la symétrie, articulée autour de quelques principes fondamentaux : le principe de causalité, la conservation de l'énergie – et bien sûr le second principe de la Thermodynamique.

Historiquement, l'élaboration complète (des premières vraies remises en question jusqu'à l'interprétation actuellement presque unanimement acceptée, en passant par la structuration du formalisme mathématique) s'est déroulée sur une cinquantaine d'années, en gros de 1880 à 1930. Durant cet intervalle, des propositions *ad hoc* ont vu le jour, essentiellement ce que l'on appelle aujourd'hui l'Ancienne Théorie des Quanta, à la manière de la théorie de l'éther. Ces tentatives seront exposées en détail, non seulement pour rendre justice à ses pionniers (Bohr, Wilson et Sommerfeld) mais aussi pour donner un exemple de la démarche qui conduit aux vrais progrès : associant rigueur et pragmatisme, articulée sur quelques étapes décisives qui n'auraient pu être franchies sans une audace intellectuelle stupéfiante, elle a produit une avancée spectaculaire, prodigieuse et féconde.

La deuxième partie du cours (ch. 10 à 17) est un exposé de l'élaboration de la Mécanique Quantique et à ses premières applications. Cette théorie a maintenant près de quatre-vingts ans d'âge² et, comme toute théorie dont on peut dire qu'elle est presque achevée en ce qui concerne son corps de doctrine³, il est possible d'en donner un exposé axiomatique, posant d'emblée les postulats nécessaires. Cette façon de procéder n'a pas que des avantages : si elle est par essence déductive et séduit l'esprit cartésien, elle écarte *ipso facto* les processus historiques de germination des idées et peut donner l'impression d'une progression linéaire – incompréhensible en raison de l'indéniable révolution conceptuelle –, erronée et trompeuse au seul vu de la chronologie. Après tout, les plus grands physiciens du siècle passé ont réfléchi pendant des années sur les difficultés de la Physique Classique avant que puisse éclore, au prix parfois d'errements et d'égarements, une théorie aux fondements

¹au sens où on connaît sa relation de dispersion, donnant la dépendance de l'énergie en fonction de l'impulsion.

²On peut considérer que l'anne décisive fut 1925 qui vit d'abord Heisenberg proposer sa Mécanique des Matrices puis, quelques mois plus tard, Schrödinger dériver l'illustrissime équation portant son nom. Il convient d'ajouter que la stricte antériorité chronologique revient à de Broglie, qui soutint sa thèse le 29 novembre 1924, mais dont l'apport n'a certainement ni l'envergure ni la cohérence des contributions magistrales de Heisenberg et Schrödinger.

³Il reste cependant quelques problèmes non complètement résolus, comme celui de la Théorie de la Mesure.

totalelement révolutionnaires pour la pensée classique⁴. Passer sous silence cette progression hésitante marquée par des avancées spectaculaires où le raisonnement intuitif, ou analogique, ou heuristique a joué un rôle décisif, ne rend pas justice aux pionniers⁵ grâce auxquels nous disposons aujourd'hui d'une théorie à la cohérence remarquable et au pouvoir explicatif incontestable⁶ et d'ailleurs incontesté.

L'exposé qui suit reprendra donc le plus souvent, mais pas toujours pour des raisons d'économie de temps, la démarche originale des Pères Fondateurs de la Mécanique Quantique : la présentation de son élaboration suivra naturellement le fil conducteur du développement historique. Bien sûr, ici et là, on prendra en compte des apports ultérieurs qui ont permis de mieux comprendre l'essence de cette théorie⁷, et en temps utile sera exposée la structure axiomatique de la Mécanique Quantique telle qu'on a pu la formuler une fois achevée la phase de construction par essai et erreur.

Note

Les références données en fin de chaque chapitre reflètent un goût personnel, tant sont nombreux les ouvrages traitant les questions abordées dans le texte. Il serait vain de vouloir donner une liste exhaustive des ouvrages consacrés, même à un niveau élémentaire, à la Physique Quantique et aux premières applications de la Mécanique Quantique.

⁴et ayant d'ailleurs un statut très particulier, peut-être unique : tout en constituant une généralisation de la Mécanique Classique, la Mécanique Quantique ne peut être construite de façon indépendante, mais doit s'appuyer sur cette limite classique pour être formulée en détail. À l'inverse, par exemple, la Relativité Restreinte repose sur deux postulats et rien de plus et produit par elle-même, dans la limite convenable, la Mécanique ordinaire de Galilée, Lagrange et Hamilton.

⁵Heisenberg reçut le Prix Nobel en 1932, Dirac et Schrödinger le partagèrent l'année suivante : il s'est donc écoulé près d'une décennie entre les premières formulations (pourtant définitives) et leur reconnaissance institutionnelle. Sur les hésitations et les réticences du Comité Nobel, voir l'article de Robert Marc FRIEDMAN (*Quantum theory and the Nobel prize*, Physics World, **15**(8), 33, août 2002).

⁶Au sens où, à l'heure actuelle, aucune expérience ne prend la Mécanique Quantique en défaut. Dans les années '80, des expériences ont même confirmé certaines prévisions de la Mécanique Quantique dans ce qu'elle a, peut-être, de plus "paradoxal" (expériences d'Alain Aspect notamment) au sujet du fameux paradoxe posé par Einstein, Podolsky et Rosen en 1935.

⁷Comme par exemple l'approche de Feynman, très physique mais très technique, qui sera tout juste mentionnée et réduite à ce qui en fait la substance conceptuelle.

Chapitre 1

Introduction

1.1 L'hypothèse atomique

L'idée suivant laquelle la matière est composée de petits grains est très ancienne et remonte à l'Antiquité grecque. Usuellement, c'est à Lucrèce¹ que l'on attribue la paternité de la notion d'atome telle qu'elle fut acceptée jusqu'à la fin du 19^{ème} siècle, mais on peut déjà en sentir la genèse chez Démocrite² et Épicure^{3,4}. Selon R. Lenoble, l'ouvrage fondamental de Lucrèce, *De Natura Rerum*, "*va lui [à l'atomisme] donner la forme qu'il gardera jusqu'à l'époque moderne*". L'imagination des Grecs ne reposait évidemment sur aucun fait expérimental et leur affirmation de l'existence de constituants premiers de la matière résultait essentiellement de leur désir de définir une réalité en soi, donnant ainsi une identité à la Nature, et faisant de la découverte de celle-ci un projet humaniste. Il est assez remarquable qu'il ait fallu attendre l'époque moderne pour que l'atome s'impose comme une réalité expérimentale, un objet de laboratoire, sous la poussée d'expériences cruciales. Dans cet ordre d'idées, il vaut la peine de noter que Henri Poincaré, "*soutenait encore, en 1912, que l'atome véritable, s'il existait, resterait sans doute toujours hors de nos prises*" ([1], p. 89).

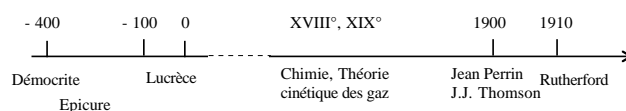


Figure 1.1: Chronologie sommaire

Purement spéculative (et essentiellement métaphysique), l'idée d'atome va commencer à trouver une assise expérimentale au 18^{ème} siècle grâce d'abord à la Chimie (dont le pionnier fut Dalton⁵), construite sur la constatation que les assemblages matériels se constituent toujours dans des proportions simples (par exemple, 2 g d'hydrogène et 16 g d'oxygène pour faire une mole d'eau), ce qui évoque irrésistiblement l'intervention de "briques" élémentaires dans un jeu de construction. Le concept d'atome sera définitivement accepté durant la seconde moitié du 19^{ème} siècle lors de la construction de la théorie cinétique des gaz (Maxwell⁶), parachevée

¹Lucrèce (ca. 98-55), poète latin né à Rome, dont le *De Natura Rerum* est un exposé lyrique de la doctrine d'Épicure.

²Démocrite (ca. 400-370), philosophe grec né à Abdère, pour qui l'Être était constitué d'atomes en nombre infini. Ainsi, on doit à Démocrite l'affirmation suivante : "*Une chose n'est douce ou amère qu'en apparence, en réalité, il n'existe que des atomes et l'espace vide*".

³Épicure (341-270), philosophe grec né à Samos ou à Athènes, qui faisait du plaisir le souverain bien.

⁴à ce sujet, voir la référence [1].

⁵John Dalton (1766-1844), chimiste et physicien anglais, considéré comme le père de la chimie moderne. C'est lui qui proposa la "loi des proportions multiples", énonçant précisément comment les proportions (exprimées en nombres entiers) de deux corps simples sont nécessaires pour la fabrication d'un corps composé. On lui doit également une étude sur les aberrations chromatiques physiologiques (confusion entre le rouge et le vert), connue depuis sous le nom de daltonisme.

⁶James Clerk Maxwell (1831-1879), physicien écossais né à Édimbourg. Surtout connu pour l'édification de l'Électromagnétisme, il fut aussi le pionnier de la Théorie cinétique des gaz et ouvrit la voie à Boltzmann.

(dans le cadre classique) par le grand œuvre de Boltzmann⁷. L'idée importante est ici l'existence de petits objets individualisés en proie au chaos moléculaire : on ne peut les voir car ils sont trop petits, mais leur existence est avérée par l'émergence des lois des grands nombres permettant de comprendre qu'un système aussi complexe peut en fait être décrit par un très petit nombre de grandeurs physiques (par exemple : pression, volume, température).

Une étape importante fut franchie en 1908 par Jean Perrin⁸ qui fut le premier à obtenir une valeur assez précise du nombre d'Avogadro, \mathcal{N} , par une étude systématique du mouvement Brownien⁹ [2]. Bien avant que des modèles explicites d'atome ne soient proposés, la connaissance de $\mathcal{N} \sim 10^{23}$ permet, à partir de la densité d'un corps, d'obtenir l'ordre de grandeur des dimensions atomiques, à savoir 10^{-10} m, soit par définition 1 Å. En effet, la densité ρ du fer est égale à 7,8 g/cm³ ; imaginant qu'à l'état solide les atomes de fer sont juxtaposés comme des petits cubes de côté a , et connaissant sa masse atomique ($M_{\text{Fe}} = 56$ g), on a :

$$\rho = \frac{M_{\text{Fe}}}{\mathcal{N}a^3} \iff a = \left(\frac{M_{\text{Fe}}}{\mathcal{N}\rho} \right)^{1/3} \sim \left(\frac{56}{7.8 \times 10^{23}} \right)^{1/3}_{\text{cm}} \sim 4 \times 10^{-8} \text{ cm} . \quad (1.1)$$

Ainsi, la taille typique d'un atome, telle qu'elle ressort de ce cas précis, est de l'ordre de 10^{-10} m. D'autres exemples numériques fournissent évidemment le même ordre de grandeur.

Il est quelque peu surprenant de constater que la conviction établie de l'existence des atomes n'a semblé-t-il pas conduit les physiciens et les chimistes à placer au premier plan de leurs préoccupations le souci de construire un *modèle* d'atome : les premières propositions en ce sens ont été formulées à l'orée du 20^{ème} siècle par Jean Perrin et par Joseph John Thomson.

L'atome tel que nous le connaissons aujourd'hui n'est pas, et de très loin, le constituant ultime de la matière et la terminologie historique¹⁰ ne doit pas conduire à des contre-sens. En réalité, l'atome est composé de particules plus élémentaires au sens où ce sont les mêmes particules qui entrent dans la composition de deux atomes aussi différents que celui d'hydrogène et celui d'uranium. Comme l'ont prouvé les expériences de Rutherford (vers 1910), l'atome est constitué par un noyau positif au voisinage duquel se trouvent localisés des électrons. Depuis le début des années 1930, on sait que le noyau est formé de protons et de neutrons ; à l'heure actuelle, il est admis que le proton et le neutron sont eux-mêmes composés de particules encore plus "élémentaires"¹¹ appelées *quarks*. Dans ce Cours, le découpage ultime de la matière s'arrêtera à la trinité électron-proton-neutron. Par ailleurs, il convient de se souvenir que matière et énergie sont indissociables par la relation d'Einstein $E = mc^2$; de ce fait, aux très hautes énergies (typiquement, le GeV et plus), on ne peut pas se poser la question en seuls termes de quantité de matière au sens classique (possibilité de création de paires particule/antiparticule par focalisation de deux faisceaux lumineux de haute énergie). Ce domaine des hautes énergies ne sera pas abordé dans la suite.

1.2 L'électron

La théorie cinétique des gaz et la chimie ont donc imposé définitivement la notion d'atome qui, pour le chimiste, est la "brique fondamentale" donnant lieu aux réactions chimiques, permettant de les classer et de les prédire¹².

⁷Ludwig Boltzmann (1844-1906), physicien autrichien né à Vienne. Boltzmann fut l'un des très grands génies précurseurs de la Physique moderne et doit être considéré comme le Père fondateur de la Mécanique Statistique, une branche majeure de la Physique. On doit à Boltzmann d'avoir compris la notion d'irréversibilité du monde réel et sa formulation en terme d'entropie et de Second Principe. La fin tragique de Boltzmann (par suicide), précédée d'une longue dépression morale, est en grande partie due à l'incompréhension par ses contemporains des idées révolutionnaires qu'il avait introduites ; sur sa tombe (située dans le cimetière de Vienne) est inscrite l'illustrissime formule $S = k \log W$.

⁸Jean Perrin (1870-1942). La lecture de son petit livre *Les atomes*, est vivement recommandée. Par ailleurs, Jean Perrin appartient au jury devant lequel Louis de Broglie soutint sa thèse en 1923. L'histoire raconte que Jean Perrin manifesta un grand scepticisme sur les idées avancées par de Broglie, ce qui ne l'empêcha pas d'insister auprès de Schrödinger pour que celui-ci ne s'en tienne pas à sa première impression ...

⁹Cette mesure fut effectuée lors de l'étude du mouvement Brownien, à propos duquel Jean Perrin énonça d'ailleurs des sentences intuitives mais absolument visionnaires, comme par exemple celle de suspecter que les trajectoires browniennes sont un exemple physique de ces "monstres" que les mathématiciens venaient à peine de concevoir (des courbes continues partout mais nulle part dérivables). Cette détermination du nombre d'Avogadro valut à Jean Perrin l'attribution du Prix Nobel en 1926.

¹⁰atome vient du grec et signifie *insécable*.

¹¹définies par leur propriétés physiques intrinsèques : masse, charge, spin, ...

¹²Bien sûr, la chimie moderne dispose maintenant de schémas explicatifs où l'électron est un acteur à part entière dans les mécanismes fondamentaux.

Une fois acceptée la notion d'atome, il devenait naturel de se poser la question de la constitution de ce dernier, et impératif de mettre au point des techniques expérimentales permettant de percer l'identité de l'atome en allant plus loin dans la dissection de la matière. Pour cette tentative, l'étude des décharges électriques dans les gaz *raréfiés* a joué un rôle majeur.

L'expérience montre que l'application d'une tension assez élevée (qui peut aller jusqu'à quelques kV) à un tube muni de deux électrodes et rempli d'un gaz à basse pression (~ 0.1 mm de mercure ou moins), provoque le passage d'un courant électrique résultant d'un mouvement de charges dans l'espace¹³. Ainsi est mis en évidence un courant de quelques microampères dans le circuit extérieur, apportant la preuve que l'atome, globalement neutre électriquement, contient des charges de signes opposés dont certaines, grâce à leur faible masse, peuvent donner lieu effectivement à un transport de courant.

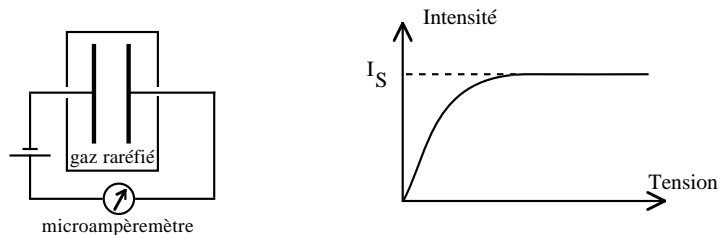


Figure 1.2: Schéma de principe de l'étude de la décharge dans un gaz et allure de la caractéristique courant - tension

L'allure de la caractéristique (fig 1.2 à droite) se comprend simplement. Sous l'effet du champ électrique créé dans l'enceinte contenant le gaz raréfié par la ddp appliquée aux électrodes, une faible fraction des atomes perdent un électron (ionisation). Ces électrons affranchis assurent la conduction électrique ; en outre, accélérés par la chute de potentiel, ils contribuent à leur tour à provoquer l'ionisation par choc d'autres atomes. D'un autre côté, les collisions entre les électrons libérés antérieurement et les ions positifs déjà présents peuvent donner lieu soit à une recombinaison produisant un atome neutre, soit à une diffusion de l'électron. Au bout d'un temps très court, pour une tension appliquée donnée, un régime permanent s'établit donnant lieu à une intensité mesurable dans le circuit extérieur. La caractéristique intensité-tension démarre linéairement puis sature à une valeur appelée courant de saturation I_S .

Ces deux comportements spécifiques s'expliquent comme suit. À faible tension, le mouvement des particules chargées est lent et, en régime permanent, la densité des porteurs prend la même valeur en tout point de l'espace. Le gaz se comporte alors exactement comme un milieu conducteur dont la densité de porteurs est donnée une fois pour toutes et où ont lieu des phénomènes de dissipation (les porteurs sont freinés par les collisions avec les atomes du gaz), deux conditions assurant l'existence de la loi d'Ohm qui exprime une simple proportionnalité entre intensité et tension appliquée : la courbe $I(V)$ démarre linéairement, sa pente donnant l'inverse de la résistance effective. À l'inverse, lorsque la tension est assez élevée, le mouvement des porteurs devient très rapide pourvu que la pression, elle, reste faible. Les phénomènes de recombinaison sont de moins en moins efficaces (ils n'ont guère le temps de se produire pendant le bref temps de transit d'un porteur donné d'une électrode à l'autre) ; de surcroît, l'énergie élevée des porteurs les rend à la fois moins vulnérables à la recombinaison et plus aptes à créer de nouvelles charges "libres" par collisions. À la limite, on comprend que l'intensité ne peut dépasser une certaine valeur, celle pour laquelle *tous* les porteurs créés (ions et électrons) atteignent effectivement leur électrode de prédilection : alors l'intensité I devient indépendante de la tension – pourvu que celle-ci reste dans des limites raisonnables (en l'augmentant suffisamment, on assisterait à un claquage, un arc électrique jaillissant entre les deux plaques grâce à la formation d'un plasma).

Les études systématiques de Crookes¹⁴, Plücker (1858) et Hittorf (1869), poursuivies par J. J. Thomson,

¹³Le champ électrique appliqué a deux effets : d'une part il provoque l'ionisation d'une faible fraction d'atomes, d'autre part il assure aux charges libérées un mouvement uniformément accéléré entre deux collisions avec le fond de la vapeur. La conductivité des gaz peut aussi être analysée en exposant ceux-ci au rayonnement d'une source radioactive émettant ce que l'on a alors naturellement appelé un rayonnement *ionisant* (rayons X ou γ).

¹⁴Crookes observa que les "rayons cathodiques" (terminologie proposée par E. Goldstein, puisque ces rayons semblaient issus de l'électrode négative), observés aisément lorsque l'enceinte contenant le gaz avait la forme d'un tube allongé, se déplacent en ligne droite, sont capables de mettre en rotation des petits moulins situés sur leur passage et sont déviés par des aimants.

devaient déboucher sur la découverte [3] de l'électron¹⁵ par ce dernier (1897)¹⁶. L'astuce cruciale de Thomson¹⁷ fut d'étudier systématiquement l'effet d'un champ magnétique \vec{B} sur les rayons cathodiques ; le sens de la déviation du faisceau – piloté par la force magnétique dont l'expression $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$ était connue – démontra que les particules en mouvement dans le tube portaient une charge *négative*. Par la suite, le résultat quantitatif majeur obtenu par Thomson fut la mesure du rapport entre la charge¹⁸ e et la masse m de l'électron, grâce à l'étude systématique de la déviation d'un faisceau électronique entre les plaques d'un condensateur plan ; celle-ci est d'autant plus grande que la charge est élevée (grande force électrique) et d'autant plus petite que la masse est grande (grande inertie). Au total, la déviation latérale δ dépend essentiellement du *rapport* charge/masse ; elle vaut précisément :

$$\delta = \frac{|e|VL^2}{2mv^2l} \propto \frac{|e|}{m} . \quad (1.2)$$

Dans cette expression, L est la longueur du condensateur, l la distance entre les armatures, v la composante de la vitesse de l'électron le long de ces dernières et V la tension appliquée. Exprimé en unités M. K. S., le rapport $|e|/m$ (qui a une dimension physique !) vaut environ 2×10^{11} .

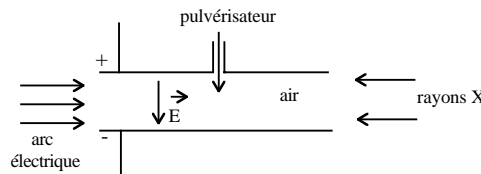


Figure 1.3: Principe du schéma de l'expérience de Millikan

Une fois e/m déterminé, il convenait de trouver soit la masse, soit la charge de l'électron. Il revient à Millikan d'avoir démontré l'existence d'une charge élémentaire (*atomisme* de la charge électrique), puis d'avoir obtenu la valeur numérique de celle-ci. Les expériences de Millikan, menées à partir de 1909, consistaient à suivre au microscope optique le mouvement dans l'air de petites gouttelettes d'huile accélérées par un champ électrique appliqué de module \mathcal{E} , et à mesurer leur vitesse limite¹⁹ v_l compte tenu du frottement dans l'air. Dans le régime des basses vitesses et pour une gouttelette sphérique de rayon a , la force de frottement $\vec{F}_{\text{freinage}}$ est donnée par la loi de Stokes :

$$\vec{F}_{\text{freinage}} = -6\pi\eta a\vec{v} , \quad (1.3)$$

où η est un coefficient phénoménologique appelé viscosité (ici, c'est la viscosité de l'air, $\eta \simeq 1,8 \times 10^{-5}$ MKS dans les conditions normales). En désignant par p la poussée d'Archimède, par Q la charge de la gouttelette, l'équation dynamique le long de l'axe vertical est ($\dot{v} = dv/dt$) :

$$M\dot{v} = Mg - p + Q\mathcal{E} - 6\pi\eta av . \quad (1.4)$$

En notant ρ_0 et ρ les densités de l'air et de l'huile, on trouve que la vitesse verticale d'une gouttelette obéit à l'équation :

$$\dot{v} + \frac{1}{\tau}v = g \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right) + \frac{3Q\mathcal{E}}{4\pi a^3 \rho} , \quad (1.5)$$

où $\tau = 2a^2\rho/(9\eta)$ est homogène à un temps²⁰. La solution générale de cette équation est la somme d'un transitoire exponentiel $\propto e^{-t/\tau}$ (dépendant de la vitesse initiale) et d'un terme à vitesse constante représentant le régime observé de fait dans les conditions de l'expérience.

¹⁵Le terme vient du grec $\epsilon\lambda\epsilon\kappa\tau\rho\eta$ (*elektron*), ambre (selon la légende, Thalès de Milet (624-546) aurait observé que l'ambre, une fois frotté, attire les corps légers). L'attribution du vocable électron à la charge élémentaire revient à G. Stoney (1826-1911).

¹⁶H. A. Lorentz fut semble-t-il le premier à soutenir que les rayons cathodiques sont composés de particules ayant une masse et une charge bien définies. La vérification expérimentale de cette hypothèse fut entreprise par Jean Perrin dans sa thèse (juin 1897).

¹⁷Joseph John Thomson (1856-1940), physicien anglais, reçut le Prix Nobel en 1906.

¹⁸Dans le cours, on désignera par e la charge *négative* de l'électron.

¹⁹Dans les conditions de l'expérience, l'échelle de temps τ des transitoires était de l'ordre de 10^{-4} s, bien trop courte pour être visible, d'où les sauts de vitesse sur la figure 1.4.

²⁰le vérifier !

Dans ce régime²¹, la relation entre $v_1 - v_{10}$ et la force électrique est une simple proportionnalité :

$$v_1 - v_{10} = \frac{1}{6\pi\eta a} Q\mathcal{E} \equiv \mu F , \quad (1.6)$$

où, par définition, μ est la mobilité. Clairement, la mesure de $v_1 - v_{10}$ permet de remonter à la charge Q d'une gouttelette ... à condition de connaître a , qui n'est pas facilement accessible. En pratique, Millikan passa par la vitesse limite en champ nul pour exprimer finalement la charge Q d'une gouttelette en termes de quantités aisément mesurables :

$$Q = \frac{18\pi\eta}{\mathcal{E}} \sqrt{\frac{v_{10}\eta}{2(\rho - \rho_0)g}} (v_1 - v_{10}) , \quad (1.7)$$

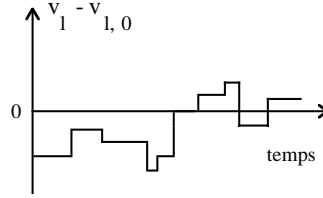


Figure 1.4: Variation au cours du temps de la vitesse d'une même gouttelette d'huile

Millikan déduisit de ses observations que la charge d'une gouttelette était toujours un *multiple entier d'une même charge*, laquelle fut élevée au statut de charge élémentaire. En raison de la méconnaissance, à l'époque, de la viscosité de l'air, l'incertitude des mesures de Millikan était de l'ordre de 10^{-3} . Les valeurs sont actuellement connues [7] avec une grande précision²² :

$$m = 9.109\,381\,88 \times 10^{-31} \text{ kg} , \quad e = -1.602\,176\,462 \times 10^{-19} \text{ C} . \quad (1.8)$$

1.3 Les ions

L'atome est neutre, c'est un fait d'expérience. La mise en évidence d'objets chargés négativement (les électrons) lorsque l'atome est soumis à certains traitements entraîne que les fragments résiduels sont chargés positivement. Il s'agit d'ions positifs, étant entendu qu'il existe aussi des ions négatifs, fabriqués dans d'autres circonstances à la suite de la capture par un atome d'un ou plusieurs électrons.

La suite logique de l'histoire consistait donc à étudier ces ions. Ce fut le départ de la spectroscopie de masse, initiée par Aston en 1919. Ce dernier étudia la trajectoire d'un faisceau d'ions positifs de masse M (obtenus par bombardement électronique d'atomes issus d'un four à haute température (~ 1000 K)), accélérés jusqu'à la vitesse v par une d. d. p. V (de l'ordre de 500 à 1000 V) puis déviés par un champ magnétique \vec{B} . En raison de leur charge Q , les ions suivent une trajectoire en arc de cercle²³ dans la région où règne le champ magnétique ; en écrivant $Mv^2/R = QvB$, on voit que le rayon R de ce cercle est donné par :

$$R = \frac{Mv}{QB} . \quad (1.9)$$

Les ions sont détectés à l'aide d'une plaque sensible ; la mesure de la position de leur point d'impact permet de remonter jusqu'à la masse M , la charge Q étant connue.

Les expériences d'Aston ont révélé deux faits capitaux. Le premier est le suivant : tout corps *pur* au sens du chimiste est en fait un *mélange* (dans des proportions bien déterminées) d'objets identiques par leurs

²¹En l'absence de champ électrique, la gouttelette tombe sous son propre poids (corrigé de la poussée d'Archimède) et a donc une vitesse limite finie, notée v_{10} .

²²Pour les applications numériques, on se bornera à considérer $m \simeq 9 \times 10^{-31} \text{ kg} \simeq 511 \text{ keV}$ et $e \simeq -1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, et surtout à mémoriser les ordres de grandeur.

²³La force $Q\vec{v} \times \vec{B}$ est perpendiculaire à la vitesse : son travail est donc nul, d'où il résulte que le module v de la vitesse reste constant ; au total, le mouvement est circulaire uniforme.

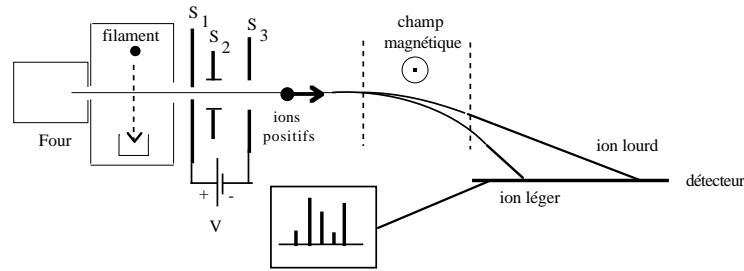


Figure 1.5: Schéma de principe du spectrographe de masse d'Aston

propriétés chimiques²⁴ mais différant par leur masse. Le chlore, par exemple se comporte exactement comme s'il était composé d'un mélange de plusieurs constituants : aussi bien avec des ions Cl^+ qu'avec des ions Cl^{++} , il existe un mélange de deux éléments de masses atomiques respectives 35 et 37, alors que la masse atomique du chlore tel que le perçoivent les chimistes vaut à peu près $35,5 \text{ g}^{25}$. Cette observation constitue la découverte des isotopes, la terminologie étant naturelle : les différents isotopes occupent la même place dans le tableau périodique des éléments, principalement dû à Mendeleïev, qui les ordonne exclusivement par leurs propriétés chimiques. Dans les expériences d'Aston, la détermination de l'histogramme des masses permet aussi d'obtenir la distribution statistique de celles-ci et donc les proportions des différents isotopes dans le faisceau.

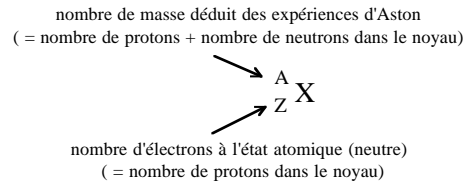


Figure 1.6: Notation précise d'un isotope

D'autre part, la masse M des ions apparut comme un multiple *entier* d'une même masse élémentaire. Cette masse est celle d'un nucléon, constituant primordial du *noyau* de l'atome, noyau que devaient révéler les expériences de Rutherford. On apprend par la suite qu'il existe en fait deux sortes de nucléons, les neutrons et les protons, de masses très voisines ($m_{\text{neutron}}/m_{\text{proton}} \simeq 1.002$) mais pas strictement égales²⁶, d'où cette confusion à l'âge de la préhistoire nucléaire. En tout cas, le besoin de préciser le nombre de nucléons s'exprime dans la notation explicite $^A_Z \text{X}$ pour un isotope donné. A est le nombre de nucléons (protons et neutrons) ; Z est le nombre de protons dans le noyau, égal au nombre d'électrons pour un atome. La notation est redondante, puisque le nombre d'électrons est en correspondance biunivoque avec le symbole chimique traditionnel X .

Dans toute la suite, on s'arrêtera à ce stade dans la dissection de la matière en petits morceaux : le noyau, composé de protons et de neutrons, et les électrons présents au sein de l'atome. C'est le cadre de la physique dite des basses énergies (de l'ordre de $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ pour les processus physico-chimiques jusqu'à quelques dizaines de keV pour les rayons X).

1.4 Modèles d'atome

Une fois acceptée l'idée d'atome et de ses constituants tels qu'ils pouvaient être caractérisés par les expériences brièvement décrites ci-dessus, la nécessité s'imposait de *construire* un modèle d'atome.

²⁴c'est pourquoi le chimiste le considérait comme pur.

²⁵ $M_{\text{Cl}} = 35,46 \text{ g}$.

²⁶Le neutron est instable à l'état libre (sa durée de vie est voisine de 890 s, soit environ 15 minutes [8]) ; pour autant que l'on sache, le proton est au contraire stable.

Deux propositions ont été faites. La première²⁷, due à J. Perrin²⁸ (1901), imaginait l'atome comme un système solaire en miniature (modèle dit planétaire) : une concentration quasi ponctuelle de matière chargée positivement (le noyau), autour de laquelle “gravitent” les électrons²⁹. La force électrostatique attractive exercée par le noyau sur un électron, variant comme $1/(\text{distance})^2$, donne à ce dernier (supposé lié) une trajectoire elliptique (le calcul prouvant ceci sera fait ultérieurement).

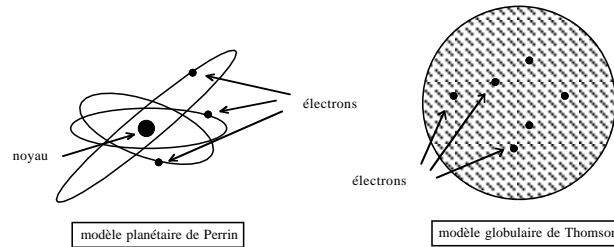


Figure 1.7: Représentations schématiques des modèles d'atomes de Perrin et de Thomson

La seconde proposition émana de Thomson (1903), qui imaginait l'atome comme une “grosse” boule positive, de dimension atomique, au sein de laquelle se déplacent les électrons (modèle dit globulaire). En désignant par R le rayon de cette boule d'électricité positive (supposée chargée uniformément en volume), et en tirant parti de la symétrie sphérique du système, le théorème de Gauss permet d'obtenir immédiatement l'expression du champ électrostatique E créé par la distribution de charge constituant la boule. Celui-ci est radial, dirigé vers l'extérieur ; son module, à la distance r du centre de la boule est, suivant le théorème de Gauss :

$$4\pi r^2 E(r) = \begin{cases} Q(r)/\varepsilon_0 & \text{si } r \leq R \\ Q_{\text{tot}}/\varepsilon_0 & \text{si } r \geq R \end{cases} . \quad (1.10)$$

$Q(r)$ est la charge contenue dans la sphère de rayon r ; Q_{tot} est la charge totale du globule de taille R . On a donc, en vertu de l'hypothèse d'uniformité de la distribution de charge :

$$Q(r) = \left(\frac{r}{R}\right)^3 Q_{\text{tot}} . \quad (1.11)$$

Il en résulte que le champ E varie comme r à l'intérieur de l'atome de rayon R et comme r^{-2} à l'extérieur. Pour un électron atomique, la force, dirigée vers le centre puisque $e < 0$, a pour module :

$$F(r) = \frac{|e|Q_{\text{tot}}}{4\pi\varepsilon_0 R^3} r \quad (r \leq R) . \quad (1.12)$$

C'est une force proportionnelle à la distance au centre, comme pour un ressort isotrope parfait à trois dimensions (oscillateur harmonique). Il est commode d'introduire la pulsation propre de l'oscillateur, ω_0 , telle que (m est toujours la masse de l'électron) :

$$F(r) = m\omega_0^2 r \iff \omega_0 = \frac{|e|}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m R^3}} . \quad (1.13)$$

En prenant pour R l'ordre de grandeur connu de la taille atomique, par exemple $R = 3 \text{ \AA}$, on trouve :

$$\omega_0 \simeq 3 \times 10^{15} \text{ rad/s} \iff \nu_0 \simeq 5 \times 10^{14} \text{ Hz} . \quad (1.14)$$

Par $\lambda_0 = c/\nu_0$, on trouve $\lambda_0 \simeq 0.6 \text{ \mu}$, en plein milieu du spectre visible. Ce résultat, rapproché de ce que l'on avait commencé à observer (les atomes peuvent émettre de la lumière visible et notamment produisent le phénomène de résonance optique – tout comme un oscillateur entre en résonance quand il y a accord entre fréquence propre et fréquence d'excitation), est en grande partie à l'origine du succès (éphémère) de l'atome selon Thomson³⁰.

²⁷Voir [4], p. 70 et sq. Peu après, la même idée fut avancée par Nagaoka (1903).

²⁸Curieusement, l'hypothèse du modèle planétaire apparaît pour première fois [5] dans une revue de haute vulgarisation [6].

²⁹L'expression, imagée, ne doit pas faire croire que c'est la force de *gravitation* qui est en jeu !

³⁰On verra dans la suite que les expériences de Rutherford ont définitivement écarté le modèle globulaire, au profit de celui de Jean Perrin.

Il convient de se souvenir que, de toute façon, aucun modèle *mécanique* de l'atome (au sens classique du terme) n'est satisfaisant. Afin de constituer un édifice atomique stable, le noyau (quel qu'il soit) et les électrons doivent être en interaction par des forces donnant lieu à un mouvement *confiné* pour ces derniers. Ce type de mouvement n'est possible que s'il y a une accélération (si le mouvement de l'électron est circulaire uniforme, l'accélération est centripète) ; or toute charge accélérée rayonne de l'énergie (formule de Larmor). Il en résulte que le système est électrodynamiquement instable : au bout d'un temps court à l'échelle humaine³¹ (de l'ordre de 10^{-8} seconde), l'électron perdant peu à peu son énergie finit par tomber sur le noyau en spiralant. En d'autres termes, les lois de la Physique classique (mécanique et électromagnétisme) conduisent à la conclusion que l'atome n'existe pas, ce qui est bien ennuyeux. On verra que cette difficulté majeure est propre à la description classique : seule la théorie quantique est en mesure de fournir une explication satisfaisante de la stabilité de l'atome et, plus généralement, de la matière.

³¹mais toutefois très long à l'échelle atomique, comme on peut le voir en calculant l'ordre de grandeur de la durée d'une révolution électronique.

Chapitre 2

La radioactivité

2.1 La radioactivité : découverte et faits expérimentaux

On doit à Henri Becquerel la découverte (fortuite ? [10]¹) de la radioactivité (1896), détectée premièrement par le noircissement de plaques photographiques situées dans le voisinage d'échantillons de certains sels d'uranium. Les premières observations montrèrent qu'il n'y a pas *une* radioactivité mais plusieurs, se distinguant par leur pouvoir de pénétration, et par la charge et la masse des particules constituant le rayonnement.

Le rayonnement impressionnant les plaques photos fit d'abord penser aux rayons X (qui venaient d'être découverts par Roentgen, annoncés par ce dernier le 3 janvier 1896), mais fut vite reconnu comme étant encore plus énergétique que ceux-ci, tellement d'ailleurs qu'il ne pouvait pas être attribué aux électrons présents dans l'uranium. On en vint peu à peu à la conviction que ce rayonnement avait une autre origine et prenait naissance dans des processus se tenant au sein du noyau de l'atome que les expériences de Rutherford devaient mettre en évidence un peu plus tard, en 1911. De fait, l'énergie associée aux émissions radioactives est située dans la gamme des MeV ($1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$, $1 \text{ eV} \simeq 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$), ce qui permet de soupçonner dès le début que l'origine du phénomène réside dans la partie de l'atome qui ne joue aucun rôle dans les réactions physico-chimiques, lesquelles se produisent sur une échelle de l'ordre de l'eV ou moins.

Ainsi naquit l'idée que l'atome contient un objet robuste au sens de la chimie, à la structure complexe puisqu'étant formé de particules plus "élémentaires", capable dans certaines conditions de se transformer et d'évacuer vers l'extérieur certains de ses constituants ou leurs "descendants", sous forme de particules ou sous forme de rayonnement électromagnétique².

¹Sur le site [11], on peut lire :

C'est le 20 janvier 1896, encouragé par Henri Poincaré qu'il [Henri Becquerel] décide d'entreprendre des recherches pour savoir si la fluorescence des sels d'uranium, étudiée depuis deux générations au Muséum, est de même nature que les rayons X. Guidé par cette idée – qui allait bientôt se révéler fausse [²³⁸U est un émetteur α] – Becquerel choisit pour ses expériences un sel qu'il est en train d'étudier : le sulfate double d'uranyle et de potassium (sel d'uranium). Pour obtenir la phosphorescence, il l'expose d'abord au soleil pendant quelques heures, puis le place sur une plaque photographique préalablement enveloppée de noir ; il enferme le tout dans une boîte, espérant qu'un rayonnement émanant du sel phosphorescent viendra impressionner la plaque. Effectivement, au développement, la plaque est impressionnée. Il communique sa découverte à l'Académie des Sciences le lundi 24 février 1896. Pendant plusieurs jours, le physicien laisse dans un tiroir les cristaux à côté des plaques photos car aucune exposition au soleil n'est possible (on est à la fin février). Le dimanche 1er mars 1896, le soleil reparaît. Henri Becquerel va pouvoir recommencer ses expériences mais, dans une intuition géniale, il vérifie d'abord l'état de l'une des plaques restées dans le tiroir pendant plusieurs jours. À son grand étonnement, la plaque a été impressionnée bien que le cristal soit resté à l'abri du soleil. Il en arrive à la conclusion que les sels d'uranium émettent naturellement des radiations pénétrantes sans excitation préalable à la lumière. Dès le lundi 2 mars 1896, à la séance hebdomadaire de l'Académie des Sciences, Henri Becquerel annonce la découverte des rayons uraniques.

²Il n'y a pas, à proprement parler, de photons dans le noyau. Il n'y a pas non plus de particules α : celles qui constituent le rayonnement α apparaissent comme telles à l'extérieur du noyau, en tant qu'association de constituants primaires, présents, eux, au sein du noyau (deux protons et deux neutrons) ; on peut concevoir l'émission α comme une "condensation" de ces nucléons près la surface interne du noyau, donnant lieu à une évaporation de gouttes (les α) à l'extérieur. Quant à l'émission β (β^-), émission d'électrons par un noyau ne contenant que des protons (chargés positivement) et des neutrons, elle apparaît encore plus énigmatique. On verra qu'elle résulte de la fission d'un neutron du noyau en un proton et un électron ; le proton peut rester au sein du noyau,

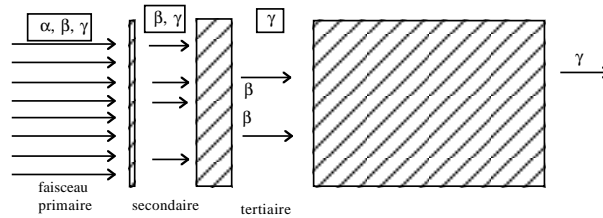


Figure 2.1: Illustration des pouvoirs de pénétration des trois composantes α , β et γ de la radioactivité

L'étude systématique révèle que le "rayonnement" des sources radioactives a une structure complexe ne se réduisant pas à une seule composante ; trois types de rayons furent mis en évidence, auxquels furent donnés, faute de mieux, les noms de radioactivité α , radioactivité β et radioactivité γ . Une méthode simple démontrant le polymorphisme de l'émission radioactive consiste à interposer des écrans d'épaisseur variable sur le trajet d'un faisceau radioactif contenant ces trois composantes. On observe qu'un écran de faible épaisseur arrête (absorbe) une partie importante du faisceau primaire et que l'on peut augmenter assez sensiblement l'épaisseur sans que l'absorption s'en trouve modifiée. Le rayonnement ainsi arrêté fut appelé radioactivité α (à partir d'une certaine épaisseur, tout le rayonnement α est absorbé). Toutefois, si on augmente considérablement l'épaisseur, on voit alors à nouveau qu'une partie du faisceau (secondaire) est à son tour en grande partie absorbée, complètement au-delà d'une certaine épaisseur ; ce constituant fut dénommé³ radioactivité β . Le rayonnement présent finalement dans le faisceau tertiaire n'est jamais *complètement* absorbé, même par des écrans d'épaisseur très importante (plusieurs dizaines de centimètres) ; on lui donna le nom de radioactivité γ .

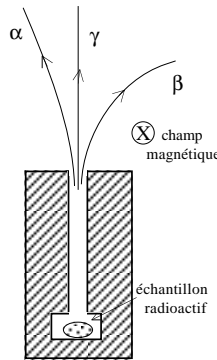


Figure 2.2: Mise en évidence de la charge électrique des trois composantes de la radioactivité

D'autres expériences cruciales permirent de comprendre que les composantes ainsi mises en évidence étaient de nature très différente, notamment par la charge électrique des "particules" les constituant. Le principe de ces expériences est simple et est schématisé sur la figure 2.2. Un échantillon radioactif est déposé au fond d'un conteneur aux parois épaisses muni d'une cheminée. Le rayonnement émis est soumis à un champ magnétique (celui-ci est perpendiculaire à la figure et dirigé vers l'arrière). On observe alors que le rayonnement α est dévié vers la gauche (il est donc constitué de particules portant une charge positive), le rayonnement β vers la droite (il s'agit donc de particules chargées négativement) ; quand au rayonnement γ , il ne subit aucune déviation et est donc constitué d'objets électriquement neutres.

au milieu des autres nucléons, grâce à l'interaction forte. L'électron, en revanche, est violemment expulsé : il n'est pas sensible à l'interaction forte et n'a donc aucune raison de rester confiné dans l'espace nucléaire ; c'est en fait un intrus dans la mer de nucléons qui constitue le noyau.

³Pour ce tour d'horizon phénoménologique, on ne considère que la radioactivité β observée l'époque. On découvrit plus tard que ce rayonnement peut se présenter sous deux formes : le rayonnement plus précisément appelé β^- (électron issu d'une désintégration d'un neutron du noyau en un électron – qui part accompagné d'un antineutrino – et un proton – qui reste), et le rayonnement β^+ qui résulte de l'émission d'un positron (antiélectron) accompagné d'un neutrino.

Radioactivité α

L'expérience montre que les sources α émettent leurs particules avec une énergie bien déterminée E_α . La charge des α a été trouvée par Regener (1909) et vaut $2|e|$; leur masse vaut 4 unités atomiques : les particules α ne sont rien d'autre que des noyaux d'Hélium, ${}^4_2\text{He}$. Ceci se confirme en enfermant une source α dans un tube scellé : au bout d'un certain temps, le tube contient de l'Hélium atomique, identifiable par son spectre de lumière caractéristique⁴.

Un élément donné (plus précisément le *noyau* de cet élément) émet des particules α ayant toujours la même énergie, ou une même suite discrète d'énergies, toujours situées dans la gamme de quelques MeV : ce fait caractéristique permet naturellement de fonder une spectroscopie α tout comme on sait reconnaître, par des moyens optiques par exemple, la présence d'un atome dans un milieu par sa signature spectrale. Autrement dit, l'analyse spectroscopique (énergétique) du rayonnement α d'une substance permet d'identifier les noyaux présents au sein de cette substance.

La trajectoire d'une α dans le milieu extérieur est une sorte de marche au hasard lui faisant perdre graduellement son énergie par tout petits morceaux (de l'ordre de 10 eV, de quoi ioniser un atome ou une molécule de la matière ordinaire⁵). Après avoir parcouru une longueur bien déterminée⁶ – pour des conditions données de température et de pression –, son énergie devient d'ordre $k_B T$; suffisamment ralentie, la particule α a alors le temps d'interagir assez longtemps avec une dernière molécule du milieu, lui prend deux électrons et se retrouve alors atome d'He ; une fois thermalisé à l'ambiante, celui-ci a une vitesse de l'ordre de 1 km/s. En définitive, toutes les particules α d'une source donnée, ayant toutes la même énergie, parcourent la *même* distance d_{\max} : en fonction de la distance d à la source, le courant⁷ correspondant est donc constant pour $d < d_{\max}$, puis chute à zéro au-delà⁸. Pour une énergie initiale E_α égale à 10 MeV, la distance d'arrêt d'une α dans l'air est à peine 10 cm, mais provoque plusieurs centaines de milliers d'ionisations des molécules d'air. Bien évidemment, cette distance est d'autant plus courte que le milieu est plus dense.

Radioactivité β

La mesure de la charge et de la masse des particules β montre qu'il s'agit en fait d'électrons, fortement relativistes par le simple fait que $m_e c^2 \simeq 511$ keV est du même ordre de grandeur⁹ que l'énergie typique de la radioactivité (pour une énergie de 3 MeV, on a $v/c \simeq 0.99$ et la masse vaut à peu près 7 fois la masse propre de l'électron). Leur charge étant plus faible que celle des α , l'interaction avec le milieu ambiant est plus petite, de sorte que toutes choses égales par ailleurs la distance de pénétration des β est beaucoup plus grande (dans l'air, une α de 3 MeV parcourt environ 1,7 cm, alors qu'une β (un électron !) de même énergie se déplace d'environ 12,5 m, soit 735 fois plus). Toutefois, pour les β comme pour les α , l'interaction avec le milieu conduisant à la perte d'énergie par petits à-coups est essentiellement l'interaction de Coulomb et, de ce fait, a un caractère universel (au contraire des γ). Par ailleurs, les sources β émettent leurs particules dans une bande *continue* d'énergie (alors que le spectre des émetteurs α est discret), bornée par une certaine énergie maximale E_{\max} ; il en résulte que le courant du faisceau dans le milieu extérieur décroît *graduellement* en fonction de la distance parcourue et non pas brutalement (en créneau) comme pour les α : les β de haute énergie parcourent une longue distance, celles de faible vitesse s'arrêtent vite. Cette extinction progressive peut néanmoins être caractérisée par une certaine longueur : expérimentalement, la décroissance est vaguement exponentielle (voir figure 2.3) en fonction de la distance d parcourue (l'intensité est $\propto e^{-\mu d}$, μ^{-1} étant la longueur caractéristique d'atténuation). Pour des raisons pratiques, on définit un taux de réduction égal à $1/2$, conduisant à une autre longueur notée $d_{1/2}$

⁴On savait depuis peu, notamment grâce à Balmer (1885), que l'atome d'un élément donné a un spectre caractéristique pouvant jouer le rôle d'une empreinte digitale. Le nom Hélium vient de *helios* : l'Hélium a été découvert [10] par l'astronome Lockyer grâce à l'observation dans l'atmosphère solaire d'une raie ne correspondant à aucun élément connu à l'époque. L'inertie chimique et la faible masse de l'Hélium expliquent en partie que ce gaz rare ne fut pas détecté plus tôt par des expériences courantes. La découverte de la présence d'Hélium sur la Terre est due à Ramsay, qui en trouva dans un minerai d'Uranium (1895).

⁵C'est pourquoi on parle de *rayonnement ionisant*.

⁶La distance parcourue par une α d'énergie donnée est presque certaine, par le jeu de la loi des grands nombres.

⁷En régime permanent, on a $\text{div } \vec{j} = 0$ soit $dj/dx = 0$ à une dimension.

⁸En toute rigueur, d_{\max} est une variable aléatoire, mais compte tenu du nombre énorme d'ionisations, ses fluctuations sont très petites.

⁹Au contraire, pour une particule α , on a $M_\alpha c^2 \sim 4 \text{ GeV} \gg 1 \text{ MeV}$: une α d'1 MeV est faiblement relativiste.

portant le nom de demi-épaisseur. La relation entre $d_{1/2}$ et μ se déduit de :

$$\frac{1}{2}I_0 = I_0 e^{-\mu d_{1/2}} \iff d_{1/2} = \mu^{-1} \log 2 \simeq \frac{0.693}{\mu} . \quad (2.1)$$

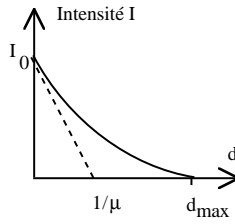


Figure 2.3: Atténuation d'un faisceau β

Il existe toutefois une distance maximum d_{\max} , traduisant le fait qu'un électron d'énergie donnée finit tôt ou tard, par être capturé ; l'intensité doit donc s'annuler strictement pour une longueur de parcours finie, correspondant aux électrons ayant l'énergie maximale E_{\max} . En fait, seul le début de la courbe a un comportement exponentiel.

La loi (empirique) de Soddy stipule qu'une transformation radioactive produisant la radioactivité α fait reculer l'élément correspondant de deux cases du tableau périodique, l'émission β le fait avancer d'une case. On comprend pourquoi il en est ainsi (la radioactivité réalise de façon naturelle le vieux rêve des alchimistes du Moyen Âge).

Les rayonnements α et β sont souvent appelés rayonnements "ionisants", ce qui peut être source de confusion puisque le rayonnement γ peut, lui aussi et bien que neutre, induire des ionisations dans le milieu où il se propage. Quoi qu'il en soit, la distance de parcours dans la matière condensée est évidemment beaucoup plus faible que dans un gaz, tout simplement parce que la densité d'atomes ou de molécules est très élevée dans un solide, dans un liquide – ou dans un tissu vivant – comparée à ce qu'elle est dans un gaz. Dans un liquide ordinaire (de l'eau par exemple), la distance de parcours est à peu près 1000 fois plus faible que dans l'air ; dans un solide, elle est encore bien plus petite (1600 fois plus petite dans l'aluminium, 5000 fois plus petite dans le plomb). Dans ce dernier cas, les α parcourent quelques centièmes de millimètres et les β quelques millimètres. C'est pourquoi ces deux rayonnements α et β , d'une façon générale, ne présentent pas de trop grands dangers – ou du moins est-il relativement facile de s'en protéger. Il en va tout autrement des rayons γ , qui sont toujours extrêmement dangereux.

Radioactivité γ

Les γ émis par une source donnée ont une énergie caractéristique de cette source¹⁰. Insensibles aux champs électriques et magnétiques, les rayons γ sont extrêmement pénétrants et, au contraire des α et des β , leur interaction avec le matériau exposé dépend de la constitution physique de ce dernier en termes d'éléments (interaction sélective). L'intensité du faisceau décroît exponentiellement avec la distance parcourue dans un matériau absorbant donné : la longueur caractéristique d'extinction (intensité divisée par 2) est de 150 m dans l'air ! Pour les tissus biologiques, cette distance est de l'ordre de 15 cm. En outre, si le nombre de "particules" γ décroît avec la distance parcourue dans le milieu, la plupart d'entre elles¹¹ conserve la *même énergie* jusqu'à sa disparition¹² : le plus souvent, une particule γ garde son énergie de départ (plusieurs MeV ou plus) jusqu'à sa mort, et c'est bien ce qui, allié au fort pouvoir de pénétration, en fait l'extrême dangerosité. Les rayons γ sont en fait du rayonnement électromagnétique de très haute énergie, bien supérieure à celle des rayons X. La différence n'est que dans l'ordre de grandeur des énergies : les rayons X impliquent des processus électroniques profonds (~ 50 keV), alors que le rayonnement γ provient de transitions entre états nucléaires (~ 10 MeV).

¹⁰comme pour le rayonnement α , d'où la possibilité d'identifier un noyau par sa signature spectroscopique, à l'instar d'un atome. Évidemment, une même source peut émettre à différentes énergies (spectre de raies)

¹¹celles qui ne subissent pas une diffusion Compton, qui les fait "rougir".

¹²Un γ ne "ralentit" pas, et pour cause : c'est un *photon*, et les photons ne se divisent pas. Les γ sont donc de redoutables photons.

L'interaction des rayons γ avec la matière donne lieu à des phénomènes complexes sur lesquels on reviendra par la suite (effet Compton, émission photoélectrique, création de paires pour les γ très énergétiques). Essentiellement, les photons γ sont soit diffusés inélastiquement (effet Compton), soit absorbés par un atome (effet photoélectrique). Leur vitesse reste celle de la lumière dans le milieu ; quant à leur énergie, elle diminue lors d'une collision Compton, ou disparaît au profit de l'atome lors de l'effet photoélectrique. Finalement, les photons sont soit diffusés, soit disparaissent purement et simplement en tant que tels. L'électron atomique émis par effet photoélectrique est éjecté avec une énergie énorme (en gros celle du photon puisque l'énergie d'ionisation de l'atome est très faible devant celle du γ) ; c'est à proprement parler cet électron secondaire très énergétique qui peut à son tour provoquer une multitude d'ionisations dans le milieu, y induisant de véritables ravages ; on peut imaginer le désastre causé par le rayonnement γ au sein de la matière vivante.

Remarque

Un noyau excité évacue donc des particules d'une nature ou d'une autre pour revenir à un état d'énergie inférieure. Il ne faut pas pour autant en déduire que ces particules sont des *constituants* du noyau en tant que tels. En réalité, les électrons formant le rayonnement β résultent de la fission préalable (au sein du noyau) d'un neutron en un proton – qui y reste – et d'un électron (qui est un intrus dans l'espace nucléaire). De même, les particules α recueillies à l'extérieur proviennent de la formation spontanée d'un complexe instable de nucléons au sein du noyau, mais près de la surface de ce dernier. Quant aux γ , (qui sont des photons), déclarer qu'ils sont dans le noyau n'a pas grand sens¹³ ; les photons sont les particules véhiculant l'interaction électromagnétique et sont donc “présents” partout dès que des charges sont en jeu¹⁴.

2.2 Loi de décroissance radioactive

La radioactivité résulte de l'évacuation d'énergie vers le milieu extérieur par un noyau situé initialement dans un état élevé et se retrouvant à la fin dans un état d'énergie inférieure¹⁵ ; schématiquement, la conservation de l'énergie s'écrit :

$$\text{noyau d'énergie } E_i \rightarrow \text{noyau d'énergie } E_f + \text{produits d'énergie } (E_i - E_f) , \quad (2.2)$$

avec ($E_i > E_f$). Ce processus tient finalement au fait que, dans la situation initiale, le noyau est dans un état instable. Cette évacuation d'énergie est irréversible, tout comme l'émission spontanée d'un photon par un atome.

En pratique, on utilise des sources macroscopiques contenant un nombre énorme ($\sim \mathcal{N}$) de noyaux. L'observation élémentaire révèle un phénomène *a priori* un peu surprenant : la source n'émet pas d'un seul coup (pas de *flash*), mais peu à peu, alors que tous les noyaux la constituant sont réputés identiques – ce qui laisse à penser que le mécanisme élémentaire produisant le basculement du noyau est de nature essentiellement *aléatoire*, d'où la nécessité d'une description probabiliste (voir ci-dessous)¹⁶.

En tout cas, la question la plus élémentaire est la suivante : sachant que la source contient à l'instant initial N_0 noyaux instables, combien en contient-elle encore à l'instant t , soit $N(t)$? La réponse expérimentale est traduite par la formule suivante :

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} . \quad (2.3)$$

La quantité λ , homogène à l'inverse d'un temps, est une caractéristique de la source ; la quantité λ^{-1} est appelée traditionnellement durée de vie (au bout d'un temps λ^{-1} , il reste $(100/e)\%$ de noyaux actifs). De façon équivalente, il est d'usage d'introduire la *période* T (appellation impropre), définie comme :

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} \simeq \frac{0.693}{\lambda} . \quad (2.4)$$

¹³Pour le photon, de masse nulle, on ne sait pas définir une fonction d'onde définissant sa probabilité de présence dans l'espace ordinaire.

¹⁴même si, au sein du noyau, l'interaction électromagnétique est négligeable devant l'interaction forte.

¹⁵On dit parfois “désintégré”, mais la terminologie est peu heureuse, sauf si on la prend au strict sens étymologique où “intègre” signifie “entier” : un noyau qui s'est désexcité a perdu un peu de lui-même et n'est plus de la sorte “entier”.

¹⁶À ce propos, on pourrait soupçonner l'existence d'un paramètre interne inconnu qui viendrait, à l'insu de l'observateur, différencier entre eux les noyaux, et expliquer pourquoi leurs désexcitations surviennent à des instants différents. Cette possibilité renvoie à ce que l'on appelle en Mécanique Quantique les *variables cachées* ; dans un contexte purement classique, on peut dire que cette ignorance (éventuelle) est traduite par l'introduction à la main d'un élément constitutif aléatoire.

Au bout d'un temps T , le nombre de noyaux actifs est divisé par 2. Les valeurs de T s'étendent sur de nombreux ordres de grandeurs, suivant les émetteurs : pour le ^{212}Po , $T = 0.29 \mu\text{s}$, pour ^{238}U , $T \simeq 4.5$ milliards d'années. Les radioéléments à courte période constituent un danger provisoire ; ceux dont la période est longue posent d'évidents problèmes de stockage.

La loi empirique exprimée par (2.3) peut recevoir une interprétation théorique simple, en faisant l'hypothèse que tout noyau instable a une probabilité *constante* λdt de se désexciter entre deux instants¹⁷ séparés de dt ¹⁸. En effet, partant de cette idée, on peut écrire pour un noyau donné :

$$\begin{aligned} \text{probabilité de survie à l'instant } t + dt &= \\ &= \text{probabilité de survie à l'instant } t \times \text{probabilité de non-désexcitation entre } t \text{ et } t + dt, \end{aligned} \quad (2.5)$$

soit, avec des symboles :

$$P(t + dt) = P(t) (1 - \lambda dt) ; \quad (2.6)$$

l'intégration de (2.6) est immédiate et reproduit (2.3), pour peu que l'on confonde $N(t)/N_0$ et $P(t)$ (ce qui revient, en gros, à assimiler fréquences normalisées et probabilités dans la limite des grands nombres, et que l'on assimile une variable aléatoire peu fluctuante avec sa valeur moyenne – voir plus loin).

L'activité d'une source, \mathcal{A} , est le nombre de désintégrations par seconde ; de par cette définition, on a :

$$\mathcal{A}(t) = \left| \frac{dN}{dt} \right| = \lambda N. \quad (2.7)$$

L'activité décroît donc proportionnellement au nombre de survivants à l'instant t , c'est-à-dire exponentiellement avec l'âge de la source : une vieille source est *a priori* moins dangereuse qu'une jeune source (toutes choses égales par ailleurs) au sens où, *en moyenne*, le courant émis est exponentiellement plus faible dans le premier cas que dans le second (mais voir plus loin la question des fluctuations). Pour des raisons historiques, l'activité se mesure en Curie, noté c ($1c = 3.7 \times 10^{10}$ désintégrations par seconde, à peu près l'activité d'une source jeune¹⁹ de 1 g de Radium). On utilise aussi le Rutherford, plus pratique (par définition, 10^6 désintégrations par seconde).

La définition ci-dessus de l'activité se réfère au cas le plus simple : un noyau instable produisant des noyaux stables. En pratique, la situation est souvent plus complexe et donne une filiation sur plusieurs générations : une espèce A (noyau père) produit une espèce B (noyau fils) qui, à son tour peut donner une espèce C (noyau petit-fils), et ainsi de suite jusqu'à la formation d'un isotope stable²⁰. Il faut alors définir plusieurs populations ($N_A(t)$, *etc.*), chacune avec sa constante de déclin (λ_A , *etc.*), et écrire les équations de *bilan* traduisant ce qui se passe entre deux instants t et $t + dt$. En pareil cas, il est naturel de poser que l'activité de l'espèce I, \mathcal{A}_I , est égale, non pas à la variation totale²¹ dN_I/dt , mais à la seule *émission* de N_I , soit $\lambda_I N_I$.

Remarque

La présentation précédente du déclin radioactif laisse de côté des effets importants et risque aussi de conduire à des contre-sens. Le phénomène d'émission pour *un* noyau est foncièrement aléatoire, de sorte que la grandeur $N(t)$ apparaissant dans les écritures ci-dessus est, au mieux, la valeur *moyenne* – au sens de la Théorie des probabilités²² – de la variable aléatoire N , nombre de noyaux excités à l'instant t . L'observation d'*une* seule source, à l'aide d'un compteur de bonne résolution en coups, permet de voir une descente continue mais pas lisse de l'activité. C'est seulement la moyenne prise sur un très grand nombre de sources qui permet de reconstruire peu à peu l'exponentielle²³.

Comme pour tout processus aléatoire (stochastique), la description théorique maximale consiste à définir et à calculer un jeu de probabilités $\{P_n\}_n$, ici dépendant du temps ; ceci étant fait, on pourra en déduire

¹⁷ λ est donc une probabilité par unité de temps ; $[\lambda] = \text{T}^{-1}$.

¹⁸Cette probabilité est donc indépendante de l'âge du noyau. Les jeunes et les vieux noyaux ont exactement les mêmes chances de basculer à l'instant d'après.

¹⁹Pour un élément à très longue période, l'activité est constante à l'échelle d'une expérience humaine.

²⁰Les durées de vie (ou périodes) peuvent être très différentes d'une génération à l'autre.

²¹dont le signe, d'ailleurs, peut varier au cours du temps.

²²ou encore espérance mathématique.

²³ou, de façon équivalente, en adoptant un intervalle de temps de comptage Δt assez grand pour contenir un grand nombre de coups afin de réduire le bruit.

les valeurs moyennes des grandeurs d'intérêt (la population de noyaux excités, par exemple) par les formules habituelles ; ces moyennes seront des fonctions du temps par l'intermédiaire des probabilités $P_n(t)$.

Soit donc précisément la probabilité $P_n(t)$ de trouver n noyaux actifs à l'instant t , sachant qu'il y en avait N_0 à l'instant initial ($t = 0$) : clairement, n est un entier variant entre 0 et N_0 (autrement, la probabilité est nulle). L'enjeu est maintenant de trouver la variation dans le temps des $N_0 + 1$ probabilités $P_n(t)$, que l'on peut atteindre en établissant d'abord une équation d'évolution pour les $\{P_n(t)\}_n$ puis en la résolvant.

En appliquant les règles usuelles :

- événements indépendants \leftrightarrow multiplication des probabilités $\iff \text{Prob}[A \text{ et } B] = P(A)P(B)$
- événements exclusifs \leftrightarrow addition des probabilités $\iff \text{Prob}[A \text{ ou } B] = P(A) + P(B)$,

et en faisant l'inventaire des processus élémentaires pouvant survenir entre deux instants très voisins²⁴, on obtient les équations de bilan :

$$P_n(t + dt) = (1 - \lambda dt)^n P_n(t) + (n + 1) \lambda dt P_{n+1}(t) + \mathcal{O}((\lambda dt)^k \geq 2) \quad (n = 0, 1, \dots, N_0) . \quad (2.8)$$

Le premier terme provient de la possibilité : aucun des n noyaux présents à l'instant t n'a changé d'état ; le second terme signifie qu'il y avait $n + 1$ noyaux à l'instant t et que l'un de ces $n + 1$ noyaux a basculé. Le symbole noté \mathcal{O} rassemble des termes d'ordre supérieur en dt (par exemple : plusieurs noyaux se sont désexcités durant dt). Au même ordre en dt , le système (2.8) est :

$$P_n(t + dt) = (1 - n\lambda dt) P_n(t) + (n + 1) \lambda dt P_{n+1}(t) + \mathcal{O}((\lambda dt)^k \geq 2) \quad (n = 0, 1, \dots, N_0) . \quad (2.9)$$

Après division par dt et passage à la limite $dt \rightarrow 0$, on obtient le système²⁵ différentiel suivant, de dimension $N_0 + 1$:

$$\frac{dP_n}{dt} = (n + 1)\lambda P_{n+1}(t) - n\lambda P_n(t) \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N_0; P_{N_0+1}(t) \equiv 0) . \quad (2.10)$$

Avec la condition initiale $P_n(t = 0) = \delta_{n, N_0}$, la solution est²⁶ :

$$P_n(t) = C_{N_0}^n e^{-n\lambda t} (1 - e^{-\lambda t})^{N_0-n} . \quad (2.11)$$

Une fois obtenue la distribution de probabilités, il est possible de calculer toutes les valeurs moyennes par la relation ordinaire donnant l'espérance mathématique d'une fonction quelconque de la variable aléatoire N , nombre de noyaux encore actifs à l'instant t :

$$\langle f(N) \rangle(t) = \sum_{n=0}^{N_0} f(n) P_n(t) . \quad (2.12)$$

La moyenne, désignée par les crochets, est une fonction du temps par l'intermédiaire des P_n . Un calcul simple utilisant (2.11) donne :

$$\langle N \rangle(t) = N_0 e^{-\lambda t} \quad \Delta N^2 \equiv \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = N_0 e^{-\lambda t} (1 - e^{-\lambda t}) . \quad (2.13)$$

ΔN est la mesure la plus simple des fluctuations de N (écarts par rapport à la moyenne). On note que les fluctuations relatives $\Delta N / \langle N \rangle$ varient essentiellement comme $e^{+\lambda t/2}$: elles divergent exponentiellement aux grands temps, ce qui ouvre la possibilité d'une bouffée quand on ne l'attend plus. La valeur moyenne $\langle N \rangle$ coïncide heureusement avec le résultat élémentaire (2.3) déduit d'une expérience effectuée avec un rapport signal/bruit élevé.

Remarque

Une question reste posée : pourquoi l'émission d'un noyau est-elle de nature aléatoire ? “Parce que la Nature est ainsi” répond Feynman. La radioactivité, comme tous les phénomènes à l'échelle atomique ou subatomique relèvent de la Mécanique Quantique, qui est une théorie essentiellement probabiliste, précisément pour rendre compte des faits. Cette théorie permet en outre, en principe, de calculer la probabilité de désintégration par unité de temps, λ .

²⁴Par exemple, la probabilité qu'aucun des n noyaux vivants à t ne bascule entre t et $t + dt$ est $(1 - \lambda dt)^n$.

²⁵Il est facile de vérifier que la somme des premiers membres est bien égale à zéro.

²⁶Ce résultat peut aussi s'obtenir directement en jouant avec la distribution binômiale et les deux probabilités $p = e^{-\lambda t}$ et $q = 1 - e^{-\lambda t}$ représentant respectivement les probabilités de l'état d'un noyau (vivant ou mort) à l'instant t .

Appendice

Une façon commode de résoudre le système (2.10) est la suivante. On définit la fonction :

$$f(t; s) = \sum_{n=0}^{N_0} s^n P_n(t) , \quad (2.14)$$

que l'on peut appeler²⁷ *fonction génératrice* des probabilités puisque, au facteur $n!$ près, les dérivées successives de f en $s = 0$ sont précisément ces probabilités ($P_n = n!^{-1}[(\partial^n / \partial s^n) f(t; s)]_{s=0}$). À partir de (2.10), on voit de suite que f satisfait l'équation aux dérivées partielles :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \lambda(1-s) \frac{\partial f}{\partial s} , \quad (2.15)$$

avec la condition aux limites $f(t = 0; s) = s^{N_0}$ puisque $P_n(t = 0) = \delta_{n N_0}$. L'inspection²⁹ de cette équation montre que sa solution est de la forme $F[(1-s)a(t)]$, où F est une fonction pour l'instant quelconque, et à condition que $a(t)$ satisfasse l'équation $\dot{a} = -\lambda a \iff a(t) = e^{-\lambda t}$, d'où résulte :

$$f(t; s) = F[(1-s)e^{-\lambda t}] . \quad (2.16)$$

La condition aux limites impose $F(1-s) = s^{N_0} \iff F(S) = (1-S)^{N_0}$ et finalement :

$$f(t; s) = [1 - (1-s)e^{-\lambda t}]^{N_0} = [(1 - e^{-\lambda t}) + se^{-\lambda t}]^{N_0} . \quad (2.17)$$

Le développement de cette expression en puissances de s (suivant la formule du binôme), et l'identification avec le développement (2.14), reproduit l'expression (2.11) des probabilités.

²⁷En posant $s = e^{iu}$, f devient une certaine fonction $F(t; u)$ appelée fonction caractéristique²⁸ ; c'est une sorte de transformée de Fourier discrète des P_n .

²⁹Une procédure moins intuitive et plus systématique consiste à passer par la transformée de Laplace de f , définie comme $F(z; s) = \int_0^{+\infty} e^{-zt} f(t; s) dt$; $F(z; s)$ satisfait une équation différentielle ordinaire. Après intégration de celle-ci, et après transformation de Laplace inverse, on obtient l'expression (2.17).

Chapitre 3

Les expériences de Rutherford

3.1 Principes généraux des expériences

Les expériences de Geiger et Marsden (1910), complétées par celles de Rutherford¹ (1911 - 1913), et surtout interprétées par ce dernier, ont joué un rôle capital en permettant d'éliminer définitivement le modèle Thomson ; fondamentalement, ces expériences démontrent l'existence du noyau de l'atome, concentration énorme de masse et de charge et, par ricochet, mettent aussi en lumière l'extraordinaire nature *lacunaire* de la matière atomique élémentaire².

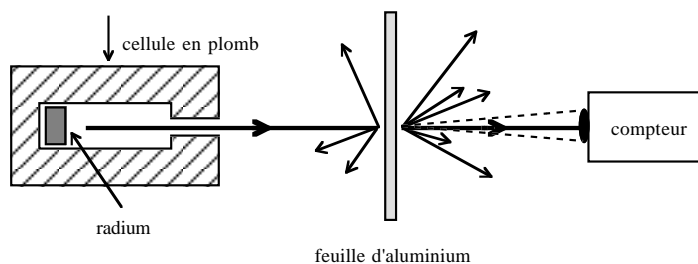


Figure 3.1: Schéma de principe des expériences de Rutherford

Le principe de l'expérience est simple. Des particules α sont envoyées perpendiculairement en direction d'une mince feuille métallique (Al, Au), de quelques centièmes de mm d'épaisseur. Un compteur mobile permet de dénombrer les particules qui sont déviées d'un angle donné θ par rapport à leur direction incidente. Les résultats, contre toute attente³, montrèrent que si la plus grande partie des α étaient peu déviées, une (petite) partie d'entre elles subissaient une forte déviation, certaines (rares) allant même jusqu'à faire presque demi-tour !

Selon le modèle de Thomson, la déviation devrait toujours être faible, compte tenu de la répartition spatiale *diffuse* de la charge positive : quand la particule α traverse l'hypothétique globule, il y a presque autant de charge d'un côté que de l'autre, les effets se compensent presque et le projectile ne peut être que peu dévié, d'autant plus que finalement la densité de charge positive est faible (quelques $|e|$ réparties sur un volume de

¹Ernest Rutherford (1871-1937) physicien britannique, Prix Nobel (de Chimie) en 1908, est surtout connu pour les expériences capitales décrites dans ce chapitre ; sa contribution à l'étude expérimentale de la radioactivité ne doit toutefois pas être oubliée.

²Le noyau représente environ 99.95 % de la masse de l'atome ; le rayon nucléaire est $\sim 10^{-15} \text{ m} = 10^{-5} \text{ \AA}$ (le volume nucléaire est donc environ 10^{15} fois plus petit que le volume atomique). En conséquence, si la matière ordinaire est pleine de vide, la matière nucléaire est au contraire d'une densité vertigineuse (de l'ordre de 10^{14} g/cm^3).

³Selon Rutherford lui-même, cité en [15] :

“C’était la plus incroyable surprise de ma vie. C’était comme si un obus de 380 mm tiré sur un morceau de papier de soie était revenu en arrière et avait touché l’artilleur.”

l'ordre de 1 \AA^3). L'existence des grandes déviations observées ne peut résulter que d'une très forte concentration de charge dans un domaine très petit à l'échelle atomique : c'est précisément le *noyau*, dont la densité de charge (et aussi de masse) est faramineuse. Pour prendre une image : si on tire au pistolet sur ce que l'on croit être un sac de sable et que certaines balles reviennent presque en arrière, il faut logiquement en conclure que des petits morceaux de roche dure sont noyés dans le sable. La conclusion qu'en tira Rutherford fut celle-ci : durant la traversée de la feuille d'aluminium, le plus souvent il ne se passe pas grand'chose, mais il arrive parfois qu'une particule α passe à proximité d'une concentration extrêmement dense de charge positive, seule capable de donner une grande déviation, au point de la faire (rarement) presque rebondir en arrière.

De plus, Rutherford a été en mesure de fournir une explication quantitative de ses observations, en calculant la section efficace différentielle (définie plus bas, section (3.4)) d'une cible (le noyau) et d'un projectile (la particule α), supposées en interaction par la force de Coulomb en $1/r^2$. Le résultat majeur (dit formule de Rutherford) est en remarquable accord avec l'expérience. La contribution magistrale de Rutherford est donc de double : d'une part elle permet de trancher entre les deux modèles d'atomes⁴ ; d'autre part, elle apporte la preuve que c'est bien l'interaction électrostatique qui, dans le modèle de Perrin, lie l'électron au noyau.

Le calcul de Rutherford n'est pas difficile (voir par exemple [16], p. 152), et repose sur quelques notions universelles relatives aux collisions, qu'il est opportun de rappeler maintenant.

3.2 Généralités sur les collisions élastiques à deux corps

3.2.1 Lois de conservation

Dans la suite, on considère la collision⁵ (non-relativiste) entre deux objets matériels ponctuels, sans structure interne, en interaction par des forces newtoniennes⁶, en l'absence de tout autre champ de force extérieur. Dans ces conditions :

- l'impulsion totale est conservée
- la collision est élastique ; dans l'état final – où l'interaction entre particules a disparu –, l'énergie mécanique se réduit à l'énergie cinétique ; en conséquence, l'énergie cinétique finale est égale à l'énergie cinétique initiale, avant que la cible et le projectile ont commencé à interagir.

Ces deux lois de conservation donnent rapidement des renseignements (intégrales premières) très utiles. Une loi de conservation s'écrit toujours schématiquement :

$$\text{Avant} = \text{Après}$$

“Avant” signifie que les particules n'ont pas encore interagi, “après” veut dire que leur interaction s'est éteinte⁷. S'agissant de l'impulsion, on a :

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 \quad (\text{P}) . \quad (3.1)$$

⁴La validation du modèle de Perrin est toute relative : la grande question de la stabilité électrodynamique de l'atome est toujours sans réponse, et le restera tant que la Mécanique Quantique ne se sera pas imposée (la proposition de Bohr (1913) – voir ch. 6 – rationalisera certains faits d'expérience mais ne règlera rien au fond).

⁵Le terme *collision* est à prendre au sens du physicien ; il désigne l'envoi de particules à la rencontre les unes des autres et les mouvements qui en résultent. La déflexion des trajectoires est une conséquence de l'interaction entre les particules (pas d'interaction, pas de déviation) : l'étude des déviations permet donc de remonter aux interactions fondamentales. En tout cas, la notion de collision ne contient aucune référence à celle de *choc*, même si le choc entre deux boules de billard constitue une collision très particulière : dans ce cas, l'interaction se réduit à une interaction de contact.

⁶La force exercée par l'une sur l'autre est opposée à celle exercée par l'autre sur l'une.

⁷Ceci implique que l'on peut définir un temps de collision, τ_{coll} , qui est la durée de l'interaction entre les deux particules. Pour des forces à courte portée, ce temps est fini ; au contraire, pour des interaction à portée infinie (exemple : la force de Coulomb), $\tau_{\text{coll}} = +\infty$. Dans ces conditions, “Avant” signifie $t = -\infty$, “après” correspond à $t = +\infty$.

\vec{p}_1 et \vec{p}_2 sont les impulsions initiales des deux particules ($\vec{p} = m\vec{v}$) ; \vec{p}'_1 et \vec{p}'_2 sont les impulsions finales. En ce qui concerne l'énergie ($(1/2)m\vec{v}^2 = \vec{p}^2/(2m)$) :

$$\frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\vec{p}'_1{}^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}'_2{}^2}{2m_2} \quad (\text{E}) . \quad (3.2)$$

Les deux lois de conservation fournissent au total 4 équations scalaires – qui ne permettent évidemment pas de résoudre complètement le problème dynamique, mais fournissent néanmoins une somme d'informations.

3.2.2 Réduction du problème à deux corps en interaction centrale

Il s'agit de montrer que pour un système de deux particules en interaction mutuelle, on peut se ramener à un problème beaucoup plus simple, avec une seule particule dite *fictive*. Cette simplification résulte de l'homogénéité de l'espace au sens de Galilée : les deux particules forment un système isolé dont le centre de masse a un mouvement rectiligne uniforme. Le repère du centre de masse est donc galiléen et toutes les lois de la Physique s'y expriment de la même façon⁸ que dans n'importe quel autre repère galiléen.

La position des deux particules est fixée par la donnée de leurs rayons-vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 , définis relativement à un repère choisi d'avance et joignant l'origine du repère au point M_i où elles se trouvent. Comme pour tout système isolé, il est utile (et même recommandable) d'introduire le référentiel lié au centre de masse G . En posant précisément $\vec{r}_i = \overrightarrow{GM_i}$, on a :

$$m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2 = 0 . \quad (3.3)$$

Ceci donne une première relation (vectorielle) entre les six scalaires nécessaires pour fixer les positions des deux particules dans \mathbb{R}^3 . Il est par ailleurs naturel de considérer le vecteur \vec{r} défini comme :

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 , \quad (3.4)$$

dont l'origine est M_2 et l'extrémité M_1 . Les deux équations (3.3) et (3.4) donnent à l'envers :

$$\vec{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} , \quad \vec{r}_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r} . \quad (3.5)$$

Le référentiel du centre de masse est galiléen ; par définition, l'équation fondamentale de la dynamique (EFD) pour la particule 1 s'écrit :

$$m_1 \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = \vec{F} \quad (3.6)$$

où \vec{F} est la force exercée par 2 sur 1. Par (3.4), un petit calcul donne :

$$\mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F} . \quad (3.7)$$

La grandeur μ , homogène à une masse, s'appelle la masse réduite :

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} . \quad (3.8)$$

Le même raisonnement, appliqué à l'autre particule, n'apprend rien de plus et reproduit exactement l'équation (3.7).

F ne peut pas avoir n'importe quelle dépendance en \vec{r} . En effet, son support est nécessairement la ligne joignant les deux points où se trouvent les deux particules : c'est la seule direction privilégiée disponible. En outre, en vertu de l'isotropie de l'espace (toujours au sens de Galilée) la force entre les deux particules ne peut dépendre de l'orientation de son support. En définitive, la force F est dite *centrale* et est de la forme :

$$\vec{F}(\vec{r}) = F(r) \frac{\vec{r}}{r} ; \quad (3.9)$$

⁸en principe du moins ... En tout cas, le caractère galiléen n'est utilisé que pour une description dynamique et les difficultés propres à l'Électromagnétisme restent sous le tapis.

il en résulte que le second membre de (3.7) ne contient que la variable \vec{r} . Dans ces conditions, l'équation (3.7) est fermée sur elle-même et contient toute la dynamique, étant entendu que G a par ailleurs un mouvement uniforme. En définitive, le nombre de variables dont il faut trouver la variation en temps est passé de 6 (les trois composantes de \vec{r}_1 et \vec{r}_2) à 3 (celles de \vec{r}) : c'est la réduction du problème à deux corps en interaction centrale, qui simplifie le problème initialement posé en introduisant une particule "fictive" de masse μ . On vérifie facilement que si $m_1 = m_2 = m$, alors $\mu = m/2$ et que si $m_1/m_2 \rightarrow 0$, alors $\mu \rightarrow m_1$.

Remarques

1. Quand l'une des particules est infiniment massive (alors naturellement appelée cible), elle n'intervient dans les équations que par le champ de force qu'elle crée⁹, conférant au projectile une énergie potentielle V . Seules les variables dynamiques du projectile apparaissent dans les calculs ; bien évidemment, ni l'énergie mécanique totale, ni l'impulsion de ce dernier ne sont conservées au cours du mouvement. Dans l'état final (plus d'interaction), le projectile retrouve son énergie cinétique initiale ; en revanche, comme il a été dévié, on a clairement $\vec{p} \neq \vec{p}'$ (physiquement, la cible de masse infinie peut encaisser n'importe quelle quantité de mouvement) : ceci ne constitue nullement une violation de la loi de conservation de l'impulsion¹⁰.
2. Dans le cas général de deux masses quelconques – et puisque le centre de masse a un mouvement uniforme (son énergie cinétique est constante) –, l'énergie cinétique de la particule *réduite* est la même dans les états initial et final, lorsque l'interaction entre les deux particules est nulle :

$$\frac{1}{2} \mu \vec{v}^2 = \frac{1}{2} \mu \vec{v}'^2 . \quad (3.10)$$

3. La dérivation en temps de la relation de définition (3.3) montre que l'impulsion totale des deux particules dans le repère du centre de masse est toujours nulle (d'où $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2$). Si O est l'origine d'un autre repère (celui dit "du laboratoire" par exemple), on a $\vec{OM}_i = \vec{OG} + \vec{r}_i$. L'impulsion de chaque particule dans ce repère est donc $\vec{P}_i = m_i(\vec{OG} + \dot{\vec{r}}_i) \equiv m_i \vec{V}_G + \dot{\vec{r}}_i$, soit $\vec{P}_i = m_i \vec{V}_G + \vec{p}_i$. Au total, $\vec{P}_1 + \vec{P}_2 = (m_1 + m_2) \vec{V}_G$: la somme des impulsions $\vec{P}_1 + \vec{P}_2$ est une constante du mouvement.

Le moment cinétique, \vec{J} , est par définition le moment de la quantité de mouvement $m\vec{v}$ ($\vec{J} = \vec{r} \times m\vec{v}$) ; en conséquence de l'EFD :

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} . \quad (3.11)$$

Le second membre est nul si la force est centrale ($\vec{F} \propto \vec{r}$), d'où la conservation du moment cinétique pour une particule soumise à une force centrale. Dans le cas de deux particules, les moments cinétiques par rapport à O, $\vec{J}_{/O}$, et par rapport à G, $\vec{J}_{/G}$, sont tels¹¹ que $\vec{J}_{/O} = \vec{J}_{/G} + (m_1 + m_2) \vec{OG} \times \vec{V}_G$, comme le montre un calcul élémentaire. Pour une interaction centrale, $\vec{J}_{/G}$ est constant ; pour un système isolé, le vecteur \vec{V}_G est aussi constant. Il en résulte que le produit vectoriel $\vec{OG} \times \vec{V}_G$ l'est aussi, et il en va de même pour $\vec{J}_{/O}$.

3.3 Déviation d'une particule chargée par un noyau d'atome

Dans cette section, on se place dans le cadre des expériences de Rutherford : une particule α de masse m , de charge $q = 2|e|$ soumise à la répulsion électrostatique d'une charge positive $Q = Z|e|$, ponctuelle très massive (un noyau d'atome). Pour simplifier, on suppose même le noyau infiniment massif (il ne bouge pas), situé une fois pour toutes au centre de masse du système¹². Alors, la réduction du problème à deux corps se fait toute

⁹C'est d'ailleurs dans de telles circonstances que s'introduit la notion de champ en Physique.

¹⁰D'un autre point de vue : le projectile n'est pas isolé puisqu'il est soumis à la force exercée sur lui par la cible inerte puisque supposée infiniment massive ; par $d\vec{p}/dt = \vec{F}$, on voit bien que son impulsion n'est pas constante !

¹¹On vérifie sans peine que :

$$\vec{J}_{/G} = \sum_{i=1}^2 m_i \vec{r}_i \times \dot{\vec{r}}_i = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} \times \dot{\vec{r}} \equiv \mu \vec{r} \times \dot{\vec{r}} . \quad (3.12)$$

¹²Cette approximation, tout à fait justifiée dans le présent contexte, n'est pas essentielle. On peut toujours s'en affranchir, sachant écrire la relation entre les sections efficaces différentielles relative l'une au repère du centre de masse (calculée), l'autre au repère du laboratoire (mesurée). La différence des masses entre le projectile (léger) et la cible (lourde) justifie ici l'économie de cette complication.

seule : il reste *de facto* une seule particule en mouvement, la particule α , dont l'énergie potentielle dans le champ répulsif du noyau-cible est :

$$V(r) = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r} , \quad (3.13)$$

\vec{r} désignant simplement le rayon-vecteur du projectile, la cible étant à l'origine du repère. La force est centrale, son module varie comme $1/r^2$: la trajectoire de l' α est une branche d'hyperbole (mouvement non-lié) ; la trajectoire est plane, en raison de la conservation du *vecteur* \vec{J} , fixé une fois pour toutes par les conditions initiales. En introduisant un repère polaire (r, ϕ) pour situer le projectile dans ce plan (axe polaire parallèle à la vitesse initiale \vec{v}_0 du projectile), on a $\phi(t = -\infty) = \pi$ et la seule composante non-nulle de \vec{J} a pour expression :

$$J = mr^2 \dot{\phi} ; \quad (3.14)$$

elle est visiblement négative.

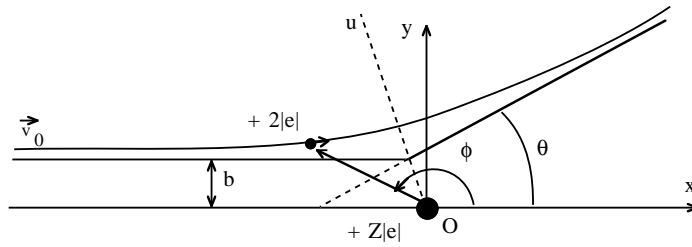


Figure 3.2: Géométrie utilisée pour le calcul de la relation (3.22)

Pour trouver le module du moment cinétique (qui est évidemment constant puisque le vecteur \vec{J} est une constante du mouvement), tout point quelconque de la trajectoire convient. On a (fig. 3.3) :

$$\vec{J} = m(\vec{OH} + \vec{HM}) \times \vec{v} . \quad (3.15)$$

En considérant le point extrême de la trajectoire situé à gauche, la vitesse devient la vitesse initiale de module v_0 et parallèle à Ox : le terme en \vec{HM} ne contribue donc pas et la longueur OH est par définition le paramètre d'impact¹³ b . Le module de \vec{J} est égal à mbv_0 , d'où¹⁴ :

$$J = -mbv_0 . \quad (3.16)$$

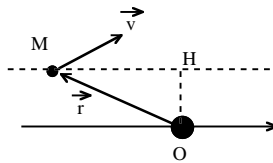


Figure 3.3: Calcul du module de \vec{J}

En définitive, la loi de conservation du moment cinétique tout au long du mouvement s'écrit :

$$mr^2 \dot{\phi}(t) = -mbv_0 \quad \forall t \quad (3.17)$$

et fournit immédiatement une relation entre les variables dynamiques $r(t)$ et $\dot{\phi}(t)$. L'équation fondamentale de la Dynamique est :

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3} . \quad (3.18)$$

¹³ b serait la distance minimale d'approche si la force était nulle.

¹⁴ $\dot{\phi}$ est visiblement négatif.

dont la projection sur la perpendiculaire à l'axe polaire donne :

$$m \frac{dv_y}{dt} = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sin \phi . \quad (3.19)$$

En utilisant (3.17) sous la forme $mr^2 = J/\dot{\phi}$ et en multipliant par dt , il vient :

$$dv_y = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 J} \sin \phi d\phi = -\frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 mbv_0} \sin \phi d\phi . \quad (3.20)$$

Cette équation relie à tout instant les accroissements infinitésimaux des deux variables dynamiques v_y et ϕ . Il est clair, en considérant les points extrêmes de la trajectoire, que l'on va tôt ou tard faire apparaître l'angle θ cherché. Intégrons donc cette relation entre ces deux points. Le premier membre donne la variation de la vitesse v_y qui passe de 0 à $v_0 \sin \theta$; en effet, par la conservation de l'énergie, le *module* de la vitesse reprend la même valeur à l'infini à droite, là où l'énergie potentielle est redevenue égale à zéro. Pendant le même temps, l'angle ϕ varie de π à θ . Il vient donc :

$$v_0 \sin \theta = \int_{\pi}^{\theta} -\frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 mbv_0} \sin \phi d\phi = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 mbv_0} (1 + \cos \theta) . \quad (3.21)$$

Quelques manipulations trigonométriques donnent finalement¹⁵ :

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2E_0} \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 b} . \quad (3.22)$$

$\theta = \phi(+\infty) - \phi(-\infty)$ est bien l'angle de déviation du projectile ; E_0 est l'énergie (purement cinétique) initiale et finale. Le résultat exprimé par (3.22) montre que si b est petit (le projectile passe tout près de la cible), la déviation n'est pas loin de π : la particule α fait alors presque demi-tour, le cas qui a tellement surpris Rutherford lui-même – cas toutefois assez rare en raison de la nature lacunaire de la matière (le noyau est vraiment tout petit comparé à la taille de l'atome, c'est finalement le résultat qualitatif le plus remarquable de l'expérience). Par ailleurs, sans surprise, la déviation est d'autant plus petite que l'énergie initiale de l' α est grande.

3.4 Section efficace de collision

On vient de décrire la déviation (diffusion) d'une particule α en raison d'une “collision” avec un noyau, collision dont la durée est de fait infinie puisque l'interaction nue de Coulomb est à très longue portée. En pratique, on opère avec un faisceau de particules (souvent cylindrique) que l'on envoie sur une cible – avec pour conséquence immédiate que le paramètre d'impact b n'est pas fixé et varie d'un projectile à l'autre.

Le faisceau incident – supposé homocinétique (“monochromatique”) – est caractérisé par un courant \mathcal{D} , égal au produit de la densité n de particules par leur vitesse v_0 . \mathcal{D} permet d'écrire le nombre $d\nu$ de particules traversant une petite surface dS normal au faisceau pendant l'intervalle de temps dt :

$$d\nu = \mathcal{D} dS dt . \quad (3.23)$$

Lue à l'envers, ceci montre que :

courant = nombre de particules traversant l'unité de surface droite par unité de temps .

Introduisons maintenant le nombre de collisions projectiles - cible par unité de temps, noté N_{coll} . Ce nombre est évidemment proportionnel au courant :

$$N_{\text{coll}} \propto \mathcal{D} . \quad (3.24)$$

L'analyse dimensionnelle montre que la constante de proportionnalité est une surface ; on la note usuellement σ , c'est la section efficace de collision, dont la relation de définition est :

$$N_{\text{coll}} \equiv \text{nombre de collisions par unité de temps} = \sigma \mathcal{D} , \quad ([\sigma] = \text{L}^2) . \quad (3.25)$$

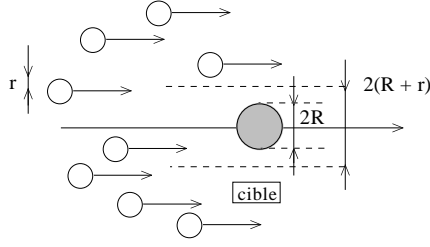


Figure 3.4: Section efficace de sphères dures de rayon fini

En définitive, on a :

$$\sigma = \frac{\text{nombre de collisions par unité de temps}}{\text{nombre de projectiles incidents par unité de surface et par unité de temps}} . \quad (3.26)$$

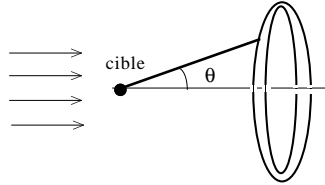
Par exemple, dans le cas trivial de sphères dures en interaction de contact ($r = \text{rayon des projectiles}$, $R = \text{rayon de la cible}$, voir fig. 3.4), on a :

$$\sigma_{\text{sphères dures}} = \pi (r + R)^2 ; \quad (3.27)$$

en effet, seuls les projectiles situés dans le cylindre de rayon $R + r$ vont subir un choc avec la cible. Le nombre de collisions (ici, il s'agit de chocs au sens usuel) par seconde est donc égal au nombre de particules traversant l'unité de surface par unité de temps (c'est le courant) multiplié par la surface $\pi(R + r)^2$ soit :

$$N_{\text{coll}} = nv_0 \pi (r + R)^2 . \quad (3.28)$$

La section efficace est ici le reflet direct des caractéristiques géométriques des particules, parce que l'interaction est strictement de contact. En règle générale, σ dépend de la portée de l'interaction¹⁶, et n'a pas toujours de rapport direct avec la taille¹⁷ des objets en présence.

Figure 3.5: Diffusion dans un élément d'angle solide $d\Omega$, défini par un angle de déviation donné θ

La section efficace ainsi définie (eqns. (3.25) et (3.26)) donne un renseignement global rassemblant toutes les diffusions, sans discrimination selon l'angle de déviation θ . Une description plus fine consiste à compter les collisions pour un angle donné. On écrit alors¹⁸ :

$$dN_{\text{coll}}(\theta) = \sigma_d(\theta) \mathcal{D} d\Omega . \quad (3.29)$$

$dN_{\text{coll}}(\theta)$ est maintenant le nombre de diffusions comptées par un détecteur d'ouverture $d\Omega$ et faisant la direction θ avec la direction d'incidence ($d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$). La constante de proportionnalité, σ_d est par définition la section efficace *différentielle* ; par définition, on a donc :

$$\sigma_d(\theta) = \frac{\text{nombre de collisions par unité de temps entre } \theta \text{ et } \theta + d\theta}{\text{nombre de projectiles incidents par unité de surface et par unité de temps} \times d\Omega} . \quad (3.30)$$

¹⁵Le second membre est visiblement sans dimension.

¹⁶Dans la mesure où on peut en définir une.

¹⁷Dans le cas de la diffusion *résonnante* de la lumière par un atome, la section efficace est $\sim \lambda_0^2$; dans le domaine optique ($\lambda_0 \sim 5 \times 10^3 \text{ \AA}$), elle est donc gigantesque par rapport à toute surface atomique.

¹⁸Cette définition repose sur deux hypothèses. La première est que le faisceau des projectiles est à symétrie cylindrique – ce que l'on peut toujours supposer, sans nuire à la généralité. La seconde est que la cible est isotrope (mêmes propriétés dans toutes les directions). Il arrive toutefois que la cible soit caractérisée par une grandeur *vectorielle* qui participe à l'interaction projectile - cible. En pareil cas, il apparaît une dépendance angulaire supplémentaire par rapport à l'azimut ϕ . En pareil cas, la section efficace différentielle est une fonction de θ et de ϕ , $\sigma_d(\theta, \phi)$.

L'intégration sur toutes les directions donne le nombre total de collisions, d'où la relation entre σ et σ_d :

$$\sigma = \int_{4\pi} \sigma_d(\theta) d\Omega = \int_0^\pi 2\pi \sin\theta d\theta \sigma_d(\theta) . \quad (3.31)$$

La deuxième expression résulte du fait qu'il n'y a pas de dépendance azimutale. Si σ_d ne dépend pas de θ (c'est le cas pour des sphères dures), alors $\sigma = 4\pi\sigma_d$. Inversement, on a aussi :

$$\sigma_d(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} , \quad (3.32)$$

3.5 Section efficace différentielle pour la diffusion Rutherford

Pour obtenir σ_d relative à l'expérience de Rutherford, il suffit de rassembler les résultats des sections (3.3) et (3.4). L'équation (3.22) donne la relation entre angle de déviation et paramètre d'impact, fournissant l'aspect quantitatif d'une évidence : plus la particule passe près du noyau, plus elle est déviée. Par ailleurs, d'après (3.30), les particules diffusées entre θ et $\theta + d\theta$ ($d\theta > 0$) sont celles qui sont contenues entre les deux cylindres coaxiaux de rayons¹⁹ $b - |db|$ et b , b étant fixé par (3.22) dès que θ est fixé. Compte tenu de ceci et d'après (3.30), il vient :

$$\sigma_d(\theta) = \frac{\mathcal{D}(2\pi b|db|)}{\mathcal{D}d\Omega} = 2\pi b \frac{|db|}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{1}{2\sin\theta} \left| \frac{d}{d\theta} b^2 \right| . \quad (3.33)$$

Un calcul élémentaire, compte tenu de (3.22), donne alors la formule de Rutherford :

$$\sigma_d(\theta) = \frac{(qQ)^2}{16(4\pi\epsilon_0)^2 E_0^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \equiv \frac{(d_{\min}/4)^2}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} , \quad (3.34)$$

où la longueur d_{\min} est la distance minimum d'approche d'un projectile d'énergie E_0 et de paramètre d'impact égal à zéro (approche frontale) :

$$d_{\min} = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0 E_0} . \quad (3.35)$$

L'expression (3.34) reproduit remarquablement les résultats expérimentaux de Rutherford – à un détail près (voir ci-dessous). Elle achève donc de valider le modèle mécanique de Perrin²⁰, confirmant de surcroît que c'est bien l'interaction de Coulomb qui est fondamentalement à l'œuvre, produisant une force répulsive responsable de la déviation entre deux charges positives, l'une, q , de valeur $2|e|$, l'autre Q , de valeur $Z|e|$.

À y regarder de près, on constate toutefois que la formule de Rutherford (3.34) ne reproduit pas l'expérience pour les très petits angles de déviation. D'ailleurs, cette anomalie se confirme en remarquant que σ_d n'est pas sommable : l'application brutale de (3.31) avec l'expression (3.34) donne $\sigma = +\infty$! Cette pathologie n'est pas grave, au fond ; elle résulte seulement²¹ du fait que le calcul a été conduit en considérant comme cible le seul noyau d'atome, avec sa charge $Z|e|$, et en ignorant complètement les électrons qui gravitent autour (noyau “nu”). Ceci est certainement correct pour les α qui passent très près du noyau en traversant l'atome de part en part en plein milieu (celles qui justement sont fortement déviées). À l'inverse, les α dont le paramètre d'impact b est de l'ordre ou sensiblement supérieur au rayon atomique (celles qui sont très peu déviées) ne voient pas la charge nue $Z|e|$ mais une charge effective écrantée par le mouvement des électrons²². Autrement dit, choisir $V(r) = C^{\text{ste}}/r$ est correct seulement si $r \lesssim 1 \text{ \AA}$ et incorrect à grande distance. L'écrantage a pour vertu de faire décroître beaucoup plus vite que $1/r$ l'interaction effective avec la distance. Pour une même distance, le potentiel écranté est plus petit que le potentiel “nu”, donc, pour un même paramètre d'impact, la déviation sera plus petite puisque la répulsion est plus faible. Par ailleurs, la relation (3.22), lue à l'envers, définit b comme une certaine fonction de θ :

$$(3.22) \quad \Longleftrightarrow \quad b = \frac{1}{2E_0} \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \cot \frac{\theta}{2} \equiv f_{\text{nu}}(\theta) ; \quad (3.36)$$

¹⁹ $d\theta$ et db ont visiblement des signes contraires.

²⁰délaissant toujours la question de l'instabilité électrodynamique.

²¹En particulier, la difficulté ne provient pas du traitement *classique* : le calcul quantique, avec le même potentiel Coulombien nu, fait apparaître la même difficulté (voir par exemple [17], C_{VIII}).

²²Si un électron atomique se trouve entre le noyau et l' α , la force électrostatique totale subie par cette dernière s'en trouve réduite.

$f_{\text{nu}}(\theta)$ est une fonction positive, monotone décroissante, partant de $+\infty$ en $\theta = 0$ et allant à 0 pour $\theta = \pi$. De la même façon, le calcul avec le potentiel écranté produit une autre relation du genre $b = f_{\text{écranté}}(\theta)$. Comme pour un même b la déviation est plus faible avec le potentiel écranté, on a (raisonner graphiquement) :

$$f_{\text{écranté}}(\theta) < f_{\text{nu}}(\theta) \iff b_{\text{écranté}}^2(\theta) < b_{\text{nu}}^2(\theta) . \quad (3.37)$$

Les modules des dérivées des deux fonctions satisfont la même relation, d'où l'on déduit (voir (3.34)) que pour une même valeur de θ , l'écrantage *diminue* la section efficace :

$$\sigma_{\text{d, écranté}}(\theta) < \sigma_{\text{d, nu}}(\theta) , \quad (3.38)$$

Ceci ne prouve pas pour autant que la section efficace est maintenant finie en $\theta = 0$, mais montre en tout cas que l'écrantage fait aller dans le bon sens.

Le calcul²³ (quantique, voir par exemple [17]) montre que la section efficace différentielle ne varie plus comme θ^{-4} près de $\theta = 0$: pour un potentiel de Yukawa, le dénominateur de l'expression (3.34) devient $[\sin^2 \frac{\theta}{2} + k^2 \xi^2 / 4]^2$, avec²⁴ $k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE_0}$; dans ces conditions, $\sigma_{\text{d}}(\theta)$ admet une limite finie en $\theta = 0$ et, *de facto*, devient intégrable.

²³par exemple avec un écrantage à la Yukawa :

$$V_{\text{eff}} = \frac{C}{r} e^{-r/\xi} , \quad (3.39)$$

où ξ est la longueur dite d'écran.

²⁴ k n'est autre que le vecteur d'onde de de Broglie du projectile.

Chapitre 4

Quantification de l'énergie : le rayonnement thermique

4.1 Le rayonnement thermique

L'étude du rayonnement thermique a joué un rôle déterminant dans l'histoire de la Physique. C'est en effet pour supprimer une nouvelle contradiction entre expérience et théorie (appelée *catastrophe ultraviolette*) que Max Planck écrivit en 1900 la formule :

$$E = h\nu . \quad (4.1)$$

Confirmée par l'interprétation d'Einstein de l'effet photoélectrique (1905) (voir ch. 5), cette relation de proportionnalité entre énergie et fréquence – nécessitant pour des raisons dimensionnelles l'introduction d'une nouvelle constante fondamentale de la Physique, h (constante¹ de Planck) – est usuellement considérée comme la marque de naissance de la théorie quantique.

4.1.1 Faits expérimentaux et nature physique du rayonnement thermique

L'expérience courante [14] montre qu'un corps porté à une certaine température émet de l'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique. Ce rayonnement est réparti sur l'échelle des fréquences et est nettement perceptible à l'œil² aux environs de 500° C, ce qui *grosso modo* signifie qu'à cette température, le spectre présente un maximum dans le rouge. Quand la température augmente, le corps vire au blanc, montrant que toutes les longueurs d'onde visibles sont alors à peu près également présentes. De toute évidence, le maximum se déplace vers les courtes longueurs d'onde quand la température augmente.

L'étude spectroscopique précise montre que la répartition en fréquence dépend fortement du matériau dont est fait le corps et aussi de l'état de sa surface : le spectre du rayonnement émis par un corps donné n'a donc aucun caractère universel, au sens où il est décrit dans le détail à l'aide de paramètres spécifiques du corps considéré. L'universalité d'une loi, au contraire, est caractérisée par le fait que la formulation précise de cette loi ne contient que des constantes physiques fondamentales et des grandeurs physiques définies indépendamment et jouant le rôle de paramètres variables (fréquence, température, par exemple)

Classiquement, l'image physique du rayonnement émis par un corps à la température T est la suivante. Un corps donné contient des particules (atomes, molécules) elle-mêmes formées de particules chargées, susceptibles d'émettre du rayonnement quand leur accélération n'est pas nulle. Or, sous l'effet des fluctuations thermiques, la vitesse d'une particule change rapidement d'un instant à l'autre. En définitive, qu'un corps porté à une certaine température émette de l'énergie sous forme de rayonnement est une conséquence naturelle des lois classiques.

¹ h a pour dimension ML^2T^{-1} . C'est une action (produit énergie \times temps, ou impulsion \times longueur).

²D'où l'expression : porter au fer rouge.

Ceci dit, on réalise que l'étude du rayonnement résultant des fluctuations thermiques implique inévitablement un système à deux composantes – dont la distinction est conceptuellement possible d'un point de vue classique ; il y a d'une part la matière et d'autre part le rayonnement électromagnétique. Finalement, c'est l'échange d'énergie entre ces deux morceaux qui permet le retour à l'équilibre et le maintien de ce dernier³.

Le rayonnement électromagnétique est un système physique en soi et, en tant que tel, soumis aux lois de la thermodynamique. Ainsi, cela a un sens de se poser la question : quel est l'état d'équilibre thermodynamique du rayonnement à la température absolue T ? Pour le coup, les lois qui vont décrire cet équilibre sont universelles, car il s'agit d'un système bien défini dont la description n'est pas tributaire de paramètres phénoménologiques liés à la matière éventuellement présente, sous quelque forme que ce soit. La grandeur essentielle à trouver est la répartition en fréquence (en couleurs) de l'énergie du rayonnement quand la température est fixée⁴. Dans la suite, on désignera par *rayonnement thermique* le rayonnement électromagnétique dans son état d'équilibre à la température T , aussi appelé *rayonnement du corps noir*, pour des raisons qui seront claires dans la suite.

Une fois posée cette question, en surgit une autre. Les équations de Maxwell sont linéaires. De ce fait, deux fréquences distinctes sont complètement indépendantes l'une de l'autre, comme le montre l'analyse de Fourier ; dès lors, comment un excès d'énergie⁵ déposée dans une bande de fréquence donnée peut-elle se déverser dans les autres fréquences, pour redonner en fin de compte la distribution d'équilibre ? La réponse est que, s'il n'y a *que* le rayonnement, c'est de fait impossible. En d'autres termes, le rayonnement tout seul ne peut retrouver son équilibre ; il ne peut y retourner que si on l'associe à un autre larron susceptible de jouer les intermédiaires pour prendre de l'énergie quelque part et la redistribuer là où il faut. Ce partenaire obligé est la matière, dont la présence est indispensable. Alors, les atomes vont pouvoir absorber à une fréquence donnée et émettre à une autre.

On peut citer une situation analogue, sinon équivalente, c'est le gaz parfait classique. Par définition, un gaz parfait est un gaz à densité si faible que les interactions (toujours présentes) entre les atomes du gaz peuvent être négligées. Il ne faut pas pour autant en déduire que ces atomes ne se voient jamais les uns les autres. Si tel était le cas, jamais le gaz partant d'un état hors d'équilibre ne pourrait retrouver tôt ou tard son équilibre. En réalité, ce sont les *collisions* entre atomes qui se chargent de redistribuer peu à peu les excès pour redonner finalement l'état d'équilibre prévu par la thermodynamique. Peu importe ce que sont ces collisions dans le détail, l'essentiel est qu'elles existent ; alors tous les gaz parfaits ont les mêmes propriétés thermodynamiques (même équation d'état et, plus généralement, même fonction de partition, indépendamment de leur identité physique ou chimique).

Dans le cas du rayonnement électromagnétique, le rôle des collisions est joué par la matière. Clairement, si celle-ci joue donc un rôle essentiel, il ne faut pas pour autant qu'elle soit en grande quantité, ou en tout cas en interaction forte avec le rayonnement⁶. Si tel était le cas, on ne pourrait pas mettre indiscutablement en évidence ce qui constitue les propriétés propres du rayonnement⁷, mais seulement les propriétés du système hybride, où la nature de la matière présente jouerait effectivement un rôle. Pour mettre en évidence les propriétés universelles du rayonnement à l'équilibre, il convient donc de supposer l'existence d'un peu de matière, en quantité assez faible pour ne pas altérer les caractères propres du rayonnement que l'on veut étudier, juste là pour assurer le retour à l'équilibre après une perturbation, ou sa pérennité. Alors, peu importe la nature précise de la matière, l'essentiel est qu'il y en ait.

Le rayonnement d'un corps donné présente évidemment des ressemblances avec le rayonnement thermique tel qu'il a été défini ci-dessus⁸, mais il en diffère. À l'inverse, soit un corps (maintenu à la température T) absorbant intégralement et uniformément *tout* rayonnement incident (aucune réflexion, même partielle), quelle que soit la fréquence ν de ce dernier. Cette propriété ne veut pas dire que le corps en question n'émet rien, bien au contraire : ce qu'il émet est justement le rayonnement thermique puisque, précisément ce dernier a une et

³Il y a évidemment un troisième partenaire, le thermostat (source de chaleur), qui impose sa température aux deux autres et qui n'échange que de la chaleur avec les autres composantes.

⁴L'équivalent de cette répartition pour le gaz parfait ordinaire est la distribution des vitesses des atomes, donnée par la loi de Maxwell $\propto e^{-\beta m \vec{v}^2/2}$.

⁵par rapport précisément à la situation d'équilibre thermodynamique.

⁶D'où la nécessité de pouvoir éliminer, ou rendre négligeables, les phénomènes de luminescence spécifique (résonance optique par exemple !)

⁷De la même façon, les collisions au sein du gaz parfait ne doivent pas être trop nombreuses ou trop violentes.

⁸De même, gardant l'analogie avec un gaz classique, on peut dire que les isothermes d'un gaz "réel" ressemblent à celles d'un gaz parfait (en tout cas loin de la température critique), mais sont paramétrées par des grandeurs spécifiques du gaz considéré. C'est seulement dans la situation de grande dilution que l'on tend vers les isothermes du gaz parfait, qui sont, elles, universelles – au point même de servir de définition à la température absolue T .

une seule origine – suivant l’image classique, c’est l’accélération de charges dans l’état d’équilibre à T . Un tel corps est appelé *corps noir*.

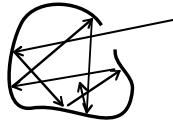


Figure 4.1: Réalisation expérimentale du corps noir

Cette remarque donne la recette pour construire en pratique un corps noir permettant une étude détaillée de l’équilibre du rayonnement : il suffit de construire une enceinte rigide⁹, maintenue à une température donnée T et percée d’une très petite ouverture¹⁰. Il est clair que tout rayonnement incident rentrant dans l’enceinte ne pourra jamais en ressortir, quelle que soit sa fréquence ; le rayonnement se propage, se réfléchit sur les parois, sillonne le four en tous sens et finit par trouver son équilibre, ou le maintient : l’ouverture fonctionne de fait comme la (petite) surface d’un corps noir ; en installant un spectrographe devant le petit trou, on peut de fait observer la distribution en fréquence du rayonnement à l’équilibre présent dans l’enceinte.

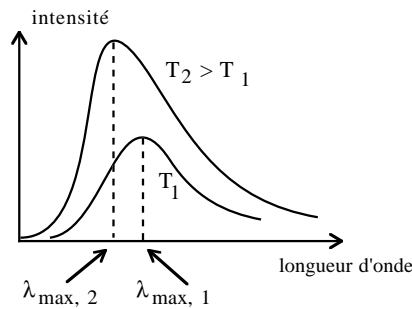


Figure 4.2: Répartition de l’intensité du rayonnement du corps noir en fonction de λ .

En s’y prenant ainsi, on peut observer plusieurs faits majeurs :

1. la répartition spectrale ne dépend¹¹ ni de la forme de l’enceinte, ni de la nature physique de ses parois, en conformité avec le Second Principe¹².
2. la répartition de l’intensité en fonction de la longueur d’onde λ a l’allure d’une courbe en cloche asymétrique, passant par un maximum pour la valeur λ_{\max} . La loi de Wien (empirique) stipule que le produit $\lambda_{\max} T$ est une constante. Plus précisément, on a :

$$\lambda_{\max} \simeq \frac{0.2898}{T_K} \text{ cm} \quad (\text{loi du déplacement de Wien}) . \quad (4.2)$$

Ainsi, quand la température augmente, le maximum se déplace du côté des petites longueurs d’onde¹³.

3. la répartition spectrale de l’énergie est une fonction universelle de la température et de la longueur d’onde (ou de la fréquence). Il apparaît expérimentalement que la bonne variable est le rapport ν/T (ou le produit λT). Ce rapport n’est pas adimensionné. En incorporant la constante de Boltzmann (inévitables physiquement), on peut fabriquer $\nu/k_B T$, qui a encore une dimension $(\text{ML}^2\text{T}^{-1})^{-1}$, soit l’inverse d’une action (voir (4.1)). Une nouvelle constante est bien nécessaire ; de fait, $h\nu/k_B T$ est sans dimension.

⁹Donc, pas de travail échangé avec l’extérieur.

¹⁰L’échange d’énergie avec l’extérieur *via* l’ouverture est de ce fait aussi petit que l’on veut et est négligé.

¹¹C’est aussi vrai pour le gaz parfait classique enfermé dans un bocal.

¹²Dans le cas contraire, avec deux enceintes différentes mais à la même température, on pourrait avec un peu d’astuce fabriquer un moteur.

¹³Pour $T = 300 \text{ K}$, le maximum est à $10 \mu\text{m}$, ce qui correspond à un maximum dans l’infrarouge (une caméra infrarouge permet, à l’ambiante, de détecter la présence d’une personne).

4. pour une température donnée et une fréquence donnée, l'intensité émise (par unité de surface) est toujours supérieure à celle de n'importe quel corps porté à la même température¹⁴. En effet, un corps quelconque diffuse et/ou réfléchit tout ou partie du rayonnement qu'il reçoit et absorbe le reste. À l'équilibre, la puissance émise thermiquement par ce corps est égale à la puissance "gardée" (absorbée). Elle est donc forcément plus petite que celle d'un corps noir qui, par définition, absorbe *tout*. En pratique, si l'on veut réduire le rayonnement thermique (inévitables) d'un corps ou d'une installation, on en revêt les parois d'une couverture aussi réfléchissante que possible. À l'inverse, on peint en noir la surface des radiateurs destinés à empêcher une élévation excessive de température au sein d'un dispositif (par exemple le processeur d'un microordinateur).

Remarques

1. L'expression "corps noir" est assez malheureuse : le qualificatif "noir" fait référence non à l'aspect visuel que l'œil perçoit mais à la propriété caractéristique : un corps noir absorbe intégralement et uniformément toute radiation venant de l'extérieur. Pour le reste :
 - Il est sûr que l'intérieur d'un four à l'ambiante ($T \sim 300$ K) est bien noir ; en revanche, aux environs de 3000 K, il est ... d'un blanc éclatant. Il en va de même pour une lame de platine noircie par un dépôt de carbone.
 - une méthode courante pour estimer la température (de surface !) d'une étoile consiste à admettre qu'elle émet à peu près comme un corps noir. Affirmer que le Soleil ressemble à un corps *noir* paraît à première vue saugrenu ; en réalité, s'il est plutôt jaune, c'est parce que sa température en surface est de l'ordre de 5500 K. L'étoile Sirius est nettement plus bleue, donc bien plus chaude.
2. L'analogie répétée entre le rayonnement à l'équilibre et un gaz parfait classique ne doit pas être poussée trop loin. Cependant, il vaut la peine de préciser que ce rayonnement est bel et bien un gaz au sens du physicien : c'est un gaz de photons, qui relève d'une statistique particulière (dite de Bose - Einstein), introduite en mécanique statistique quantique pour les particules de *spin* entier (de ce fait appelées bosons). Ce gaz (parfait, deux photons n'interagissent pas directement¹⁵) relève d'un traitement thermodynamique dont la méthodologie, sinon les règles détaillées¹⁶, est calquée sur celle utilisée dans le cas classique.

4.1.2 Description phénoménologique du rayonnement thermique [13]

L'émission d'une source est notamment caractérisée par sa puissance totale rayonnée, U , énergie envoyée dans le milieu extérieur par unité de temps. Usuellement, le spectre émis est réparti sur toutes les longueurs d'onde ; une information plus fine est contenue dans la donnée de la puissance rayonnée dans une bande $[\lambda, \lambda + d\lambda]$, soit dU_λ ; on pose :

$$dU = U_\lambda d\lambda , \quad (4.3)$$

ce qui définit une densité de puissance en longueur d'onde, $U_\lambda(\lambda)$. La puissance rayonnée sur tout le spectre est évidemment reliée à la densité par :

$$U = \int_0^{+\infty} U_\lambda(\lambda) d\lambda . \quad (4.4)$$

De façon équivalente, on introduit une densité en fréquence :

$$dU_\nu = U_\nu d\nu \quad U = \int_0^{+\infty} U_\nu(\nu) d\nu . \quad (4.5)$$

De ces définitions, il résulte :

$$U_\nu(\nu) = \frac{c}{\nu^2} U_\lambda(c/\nu) \quad (c = \text{vitesse de la lumière}) . \quad (4.6)$$

U_ν et U_λ sont les densités spectrales de puissance ; l'indice ν ou λ permet de distinguer les deux fonctions, qui sont évidemment différentes.

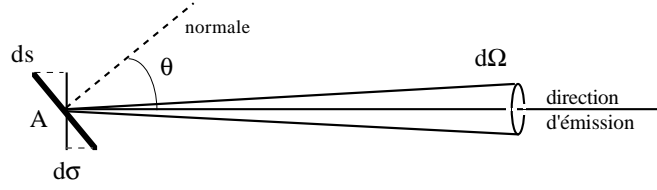


Figure 4.3: Luminance d'une petite surface (voir eq. (4.7)).

Ceci étant posé, il convient par ailleurs de décrire quantitativement la capacité d'émission d'une (petite) surface ds . On écrit que la puissance rayonnée dans une direction faisant l'angle θ avec la normale à la surface est proportionnelle à cette surface et à l'angle solide¹⁷ $d\Omega$. La constante de proportionnalité, L , s'appelle¹⁸ *luminance*¹⁹ :

$$dU = L \cos \theta ds d\Omega \equiv L d\sigma d\Omega \quad (4.7)$$

où $d\sigma = \cos \theta ds$ est la projection de ds parallèlement à la direction d'émission. À nouveau, la même définition peut se poser relativement à un petit intervalle spectral (en longueur d'onde ou en fréquence). Par exemple :

$$dU_\nu = L_\nu(\nu) \cos \theta ds d\Omega d\nu \equiv L_\nu(\nu) d\sigma d\Omega d\nu . \quad (4.8)$$

La quantité L_ν est naturellement appelée *luminance spectrale* et est reliée à L par :

$$L = \int_0^{+\infty} L_\nu(\nu) d\nu . \quad (4.9)$$

Ces définitions étant posées, que peut-on en dire quand il s'agit du rayonnement thermique ? Dans les arguments qui suivent, ds est une petite surface immatérielle isolée mentalement dans l'enceinte contenant le rayonnement à l'équilibre et traversée par le rayonnement qui s'y trouve. Le Second Principe permet d'affirmer que, dans ce cas, L_ν n'a aucune dépendance angulaire (isotropie), ni aucune dépendance spatiale (uniformité²⁰) ; en effet, s'il existait une telle dépendance (inhomogénéité), on pourrait concevoir un moteur fonctionnant avec une seule source de température. Le rayonnement thermique est donc isotrope et homogène ; pour rappeler le rôle de la température, on note désormais $L_\nu(\nu; T)$ la luminance spectrale à l'équilibre à T et $L(T)$ son intégrale conformément à (4.9) :

$$L(T) = \int_0^{+\infty} L_\nu(\nu; T) d\nu . \quad (4.10)$$

D'un autre côté, on sait bien de l'Électromagnétisme qu'il est possible de définir une densité d'énergie u , et la quantité spectrale associée u_ν , avec la relation :

$$u = \int_0^{+\infty} d\nu u_\nu . \quad (4.11)$$

$u dV$ est l'énergie contenue dans un volume dV , $u_\nu dV d\nu$ est l'énergie contenue dans dV et dans la bande $[\nu, \nu + d\nu]$. Il existe une relation simple entre la grandeur plutôt théorique u_ν et la grandeur facilement mesurable

¹⁴C'est pourquoi le corps noir est aussi appelé *radiateur idéal*.

¹⁵Ils interagissent *via* la matière (absorption ou émission de photons lors des transitions entre états quantifiés).

¹⁶Par exemple, il n'est pas question de trouver la distribution de vitesse des photons : tous ont exactement la même (celle de la lumière). L'enjeu est notamment de trouver la distribution des couleurs (soit des fréquences, mais par $E = h\nu$, c'est aussi la distribution en énergie), fonction notée u_ν ou $u(\nu, T)$ par la suite.

¹⁷Rappel : l'angle solide $d\Omega$ est la surface de la sphère de rayon unité délimité par un cône d'ouverture infiniment petite et d'axe la direction de l'espace choisie.

¹⁸On dit aussi *émissivité*.

¹⁹Voir [13].

²⁰D'ailleurs, on serait bien en peine de définir une origine des angles – ou une origine des coordonnées – plutôt qu'une autre.

L_ν . En effet, pour une petite surface droite $d\sigma$ et une direction donnée, l'énergie émise entre deux instants t et $t + dt$ est le produit de la puissance par dt :

$$(L_\nu d\sigma d\Omega d\nu) dt . \quad (4.12)$$

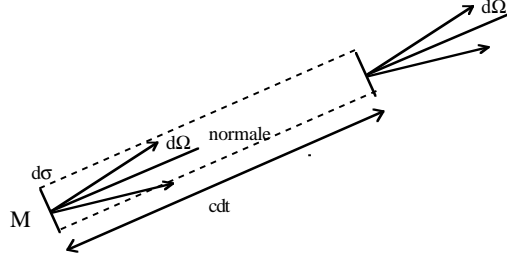


Figure 4.4: Relation entre luminance L et densité d'énergie u (voir eq. (4.16)).

Cette énergie est contenue dans le petit cylindre de base $d\sigma$ et de génératrice $c dt$; la densité (volumique) d'énergie, pour cette direction est donc :

$$\frac{(L_\nu d\sigma d\Omega d\nu) dt}{c dt d\sigma} \equiv \frac{1}{c} L_\nu d\Omega d\nu . \quad (4.13)$$

Compte tenu de l'isotropie, la densité intégrée pour toutes les directions de l'espace est :

$$4\pi \frac{1}{c} L_\nu d\nu . \quad (4.14)$$

Ceci est la densité volumique pour la bande $[\nu, \nu + d\nu]$; d'où l'égalité pour les grandeurs spectrales :

$$4\pi \frac{1}{c} L_\nu = u_\nu \iff L_\nu = \frac{c}{4\pi} u_\nu . \quad (4.15)$$

Par intégration en fréquence, on en déduit la relation analogue entre luminance et densité volumique d'énergie :

$$L = \frac{c}{4\pi} u . \quad (4.16)$$

Enfin, il est utile de considérer la puissance totale émise par unité de surface, U_S ; compte tenu de (4.7), on a :

$$dU_S = L \cos \theta d\Omega . \quad (4.17)$$

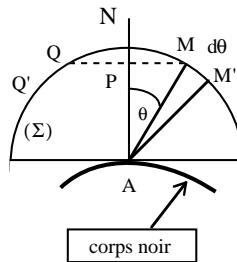


Figure 4.5: Relation entre pouvoir émissif U_S et luminance L (voir eq. (4.19)).

Pour le corps noir, il existe une relation simple entre U_S et L . En effet, la portion de surface de la sphère de rayon unité interceptée entre deux cônes coaxiaux d'ouvertures θ et $\theta + d\theta$ est $2\pi \sin \theta d\theta$. La puissance rayonnée vers l'extérieur²¹ dans toutes les directions par unité de surface et pour toutes les fréquences (longueurs d'onde) est donc :

$$U_S = \int_{(1/2)(4\pi)} L \cos \theta d\Omega = \int_0^{\pi/2} L \cos \theta (2\pi \sin \theta d\theta) . \quad (4.18)$$

²¹Pour cette raison, on intègre l'angle solide sur 2π stéradians au lieu de 4π .

U_S s'appelle pouvoir émissif²². Comme L est indépendant de θ (isotropie du rayonnement du corps noir), l'intégration est élémentaire et on trouve :

$$U_S = \pi L = \frac{c}{4} u . \quad (4.19)$$

4.1.3 Loi de Stefan (1879)

La loi de Stefan, établie expérimentalement, énonce que le pouvoir émissif du corps noir est proportionnel à la quatrième puissance de la température absolue :

$$U_S = \sigma T^4 . \quad (4.20)$$

σ est une constante empirique (dite de Stefan) dont la valeur est :

$$\sigma \simeq 5.7 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4} . \quad (4.21)$$

Boltzmann a donné en 1884 une démonstration de ce résultat par des arguments purement thermodynamiques (voir ci-dessous). Pour le rayonnement à l'équilibre à la température T , l'énergie \mathcal{E} est égale au produit uV où V est le volume de l'enceinte contenant le rayonnement. Il est également possible de définir la pression de rayonnement²³, P . D'une façon ou d'une autre, on trouve que l'équation d'état²⁴ pour le rayonnement est :

$$PV = \frac{1}{3} \mathcal{E} \iff P = \frac{1}{3} u . \quad (4.23)$$

À partir de ces considérations, Boltzmann a montré que l'application des deux principes permet d'établir l'équation différentielle :

$$\frac{du}{dT} = 4 \frac{u}{T} , \quad (4.24)$$

qui s'intègre immédiatement en :

$$u = a T^4 , \quad (4.25)$$

où a est une constante. En utilisant (4.19) et (4.16), il vient :

$$U_S = \pi L = \frac{c}{4} u = \frac{ac}{4} T^4 ; \quad (4.26)$$

C'est la relation entre la constante empirique σ définie par (4.20) et la constante d'intégration a résultant du calcul thermodynamique de Boltzmann.

Démonstration de Boltzmann (1884)

En essence, la démonstration par Boltzmann de la loi de Stefan procède comme suit. Le premier résultat utile est l'équation d'état (4.23), qui peut se trouver soit à partir des équations de Maxwell (et la considération du flux du vecteur de Poynting), soit en reprenant la vision de Newton du rayonnement (pluie de corpuscules). Dans cette dernière optique (!), on raisonne exactement comme pour calculer la pression d'un

²²On dit aussi *émissance*.

²³C'est elle qui est responsable de l'incurvation de la queue des comètes lorsqu'elles pénètrent dans le système solaire.

Sur Terre, la pression de radiation due au Soleil est très petite devant la pression atmosphérique. En effet, le flux d'énergie solaire à la surface de la Terre est environ $1,4 \times 10^3 \text{ W m}^{-2}$; en divisant par c , on trouve le u correspondant, soit $u \simeq 4,7 \times 10^{-6} \text{ J m}^{-3}$, soit en utilisant (4.23) $P \simeq 1,6 \times 10^{-6} \text{ Nm}^{-2} \sim 10^{-11} P_{\text{atm}}$.

²⁴Pour un gaz parfait classique, l'équation $PV = Nk_B T$ peut se mettre sous la forme :

$$PV = \frac{2}{3} \mathcal{E} . \quad (4.22)$$

Le facteur 2 de différence entre (4.22) et (4.23) tient uniquement à la loi de dispersion (énergie en fonction de l'impulsion). Pour le gaz classique, on a $\varepsilon = p^2/(2m)$, pour le gaz de photons, $\varepsilon = pc$; dans un cas la loi est quadratique, dans l'autre elle est linéaire en p .

gaz parfait : le petit élément de surface dS d'une paroi bombardée sous l'incidence θ par des corpuscules de quantité de mouvement p se déplaçant à la vitesse c (la vitesse de la lumière !) reçoit entre t et $t + dt$ la quantité de mouvement :

$$(2p \cos \theta) \times (ndS \cos \theta c dt) ; \quad (4.27)$$

n désigne la densité de particules (nombre de corpuscules par unité de volume) ; le facteur 2 provient du rebond²⁵. En divisant par dt on obtient la force pour l'élément dS et en divisant par dS , c'est la force de pression pour la direction θ . Il faut maintenant moyenner sur les directions de la "moitié" de \mathbb{R} pour obtenir la pression P :

$$P = 2npc \langle \cos^2 \theta \rangle ; \quad (4.28)$$

La moyenne est :

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_{(1/2)(4\pi)} \frac{d\Omega}{4\pi} \cos^2 \theta = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi/2} 2\pi \sin \theta d\theta \cos^2 \theta = \frac{1}{6} ; \quad (4.29)$$

d'où $P = npc/3$. Comme pc est l'énergie d'un grain de lumière, npc est l'énergie par unité de volume du rayonnement, u , d'où finalement l'équation d'état :

$$P = \frac{1}{3} u . \quad (4.30)$$

Maintenant, soit une transformation infinitésimale où l'énergie du rayonnement varie de $d\mathcal{E}$; par le Premier principe, on a :

$$d\mathcal{E} = \tilde{d}W + \tilde{d}Q . \quad (4.31)$$

Supposons la transformation réversible et isotherme²⁶ : alors, le travail vaut $-PdV$, où P est la pression du rayonnement, égale à la pression exercée de l'extérieur (réversibilité) ; par ailleurs $\tilde{d}Q = TdS$, d'où :

$$d\mathcal{E} = -PdV + TdS \iff dS = \frac{1}{T}d\mathcal{E} + \frac{P}{T}dV . \quad (4.32)$$

Comme S est une fonction d'état :

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{E}} \right)_V = \frac{1}{T} , \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_\mathcal{E} = \frac{P}{T} . \quad (4.33)$$

D'un autre côté, la variation d'énergie libre de Helmholtz ($F = \mathcal{E} - TS$) s'écrit généralement :

$$dF = -SdT - PdV . \quad (4.34)$$

F , tout comme \mathcal{E} , est une fonction d'état, d'où :

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V . \quad (4.35)$$

S est une fonction de \mathcal{E} et V , mais $\mathcal{E} = u(T)V$:

$$S(\mathcal{E}, V) \equiv S(\mathcal{E} = u(T)V, V) ; \quad (4.36)$$

le premier membre de (4.35) est donc :

$$u(T) \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{E}} \right)_V + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_\mathcal{E} , \quad (4.37)$$

²⁵La paroi est prise parfaitement réfléchissante au sens où tous les corpuscules rebondissent ; ce rebond n'est pas spéculaire. En réalité, tout comme pour un gaz parfait, il faut bien que les petits bolides sondent la paroi (ne serait-ce que pour prendre sa température) : il y a en fait une sorte d'adsorption éphémère, mais au total tout ce qui arrive repart. Si la paroi est parfaitement absorbante, le facteur 2 est absent.

²⁶Par exemple : le rayonnement occupe le volume V dans un cylindre maintenu à T et dont le piston mobile sans frottement est déplacé infiniment peu, produisant la variation de volume dV .

soit $u(T) (1/T) + P/T$ d'après (4.33), c'est-à-dire $u/T + u/(3T)$ en vertu de (4.30) ; au total :

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \frac{4}{3} \frac{u}{T} . \quad (4.38)$$

Toujours d'après (4.30), on a aussi :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{3} \frac{du}{dT} . \quad (4.39)$$

Finalement, l'équation (4.35) est équivalente à :

$$4 \frac{u}{T} = \frac{du}{dT} , \quad (4.40)$$

qui est une équation différentielle pour la densité d'énergie $u(T)$; une intégration immédiate donne la relation (4.25). ■

4.2 Loi de Planck (1900)

4.2.1 Retour sur la loi du déplacement de Wien

Dans la suite, on note²⁷ $u(\nu, T)$ la densité volumique d'énergie du rayonnement en équilibre thermodynamique à T . Par une analyse expérimentale approfondie, Wien a été en mesure de montrer que la densité $u(\nu, T)$ est de la forme :

$$u(\nu, T) = T^3 f(\nu/T) , \quad (4.41)$$

où f est une certaine fonction universelle (dimensionnée), d'une certaine variable ayant elle aussi une dimension. Dit autrement, si on pose $y = T^{-3}u(\nu, T)$ et $x = \nu/T$, tous les isothermes du corps noir se fondent dans une et une seule fonction $f(x)$. Cette observation redonne bien la loi du déplacement (4.2) exprimée en fréquence :

$$\frac{\nu_{\max}}{T} = C^{\text{ste}} \quad (4.42)$$

et reproduit aussi la loi de Stefan. En effet, en reportant (4.41) dans (4.11), on a :

$$u(T) = \int_0^{+\infty} u(\nu, T) d\nu = \int_0^{+\infty} T^3 f(\nu/T) d\nu ; \quad (4.43)$$

un simple changement de variable d'intégration donne d'une part la dépendance escomptée en température et d'autre part identifie la constante a introduite en (4.25) :

$$u(T) = a T^4 , \quad a = \int_0^{+\infty} f(x) dx . \quad (4.44)$$

Enfin, selon les observations de Wien, la fonction f est quadratique à petit x , donc $u(\nu, T) \propto \nu^2$ aux basses fréquences. Au contraire, à haute fréquence Wien a trouvé empiriquement une loi du genre $u(\nu, T) \propto \nu^3 e^{-A\nu/T}$. Un tel comportement assure que l'intégrale de u sur \mathbb{R}^+ est une quantité finie, donc que la constante a dans (4.44) existe et est finie.

L'enjeu majeur est maintenant de trouver la fonction f . La première tentative est due à Rayleigh et Jeans ; elle débouche sur la catastrophe ultraviolette – qui donne $a = \infty$. C'est Planck qui obtiendra finalement, en 1900, la bonne expression au prix de l'introduction d'une *quantification* des échanges d'énergie entre matière et rayonnement.

²⁷ Antérieurement notée u_ν .

4.2.2 Formule de Rayleigh - Jeans

Les difficultés de la théorie classique ont surgi lors de la confrontation entre les faits expérimentaux résumés ci-dessus et les résultats du calcul dû à Rayleigh et Jeans. Ce calcul, mené dans le cadre de l'Électromagnétisme agrémenté de Mécanique statistique est un peu long et se développe suivant deux étapes :

- Dans un premier temps, on va montrer que le champ électromagnétique dans une cavité est équivalent à un ensemble (collection) d'oscillateurs harmoniques immatériels indépendants les uns des autres
- À chacun de ces oscillateurs, on va appliquer la statistique de Maxwell - Boltzmann .

En partant des équations de Maxwell – qui sont des équations linéaires –, on sait définir l'énergie et l'impulsion du rayonnement. Ainsi, l'énergie \mathcal{E} du champ contenue dans un volume V s'exprime comme suit²⁸ à l'aide des champs électrique \vec{E} et magnétique \vec{B} :

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int_V d^3r (\varepsilon_0 \vec{E}^2 + \mu_0^{-1} \vec{B}^2) = \frac{\varepsilon_0}{2} \int_V d^3r (\vec{E}^2 + c^2 \vec{B}^2) . \quad (4.45)$$

Par ailleurs, les équations de Maxwell sont des équations aux dérivées partielles (linéaires) qui supposent données des conditions aux limites²⁹. En vertu de la linéarité, tout état dynamique peut s'obtenir en combinaison linéaire de solutions particulières, usuellement appelées modes propres, ou modes stationnaires³⁰. De plus, il s'agit de faire l'étude thermodynamique, ce qui suppose que le système d'étude (ici le champ électromagnétique) est macroscopique et ne présente aucune pathologie vis-à-vis de la thermodynamique. Dès lors, le détail de ce qui se passe sur la frontière du domaine de confinement est sans importance ; dans ces conditions, on peut choisir les conditions aux limites qui conduisent aux calculs les plus simples.

Plus précisément, on enferme le rayonnement dans une boîte cubique de côté L , où L est une longueur aussi grande que l'on veut et qui, en fin de course, pourra être prise infinie. Cette longueur arbitraire ne doit jouer aucun rôle physique ; l'instant de vérité est celui où on constate par exemple que l'énergie a le bon comportement extensif, c'est-à-dire est proportionnelle au volume $V = L^3$ dans la limite thermodynamique. Les parois de la boîte sont supposées parfaitement réfléchissantes : alors, le champ électrique \vec{E} au niveau des parois est normal à ces dernières³¹.

L'application des conditions aux limites impose une sélection (quantification) des valeurs possibles des grandeurs physiques caractérisant le rayonnement, tout comme pour une corde vibrante. Dans ce cas très simple, si l'on fixe les deux extrémités de la corde en deux points séparés de la distance L , les modes propres sont caractérisés par le fait qu'il existe un nombre entier de demi-longueurs d'onde entre ces extrémités :

$$L = n \frac{\lambda}{2} \quad (n \in \mathbb{N}) . \quad (4.46)$$

De façon équivalente, le nombre d'onde $k = 2\pi/\lambda$ ne peut prendre que les valeurs discrètes³² :

$$k = n \frac{\pi}{L} \quad (n \in \mathbb{N}) . \quad (4.47)$$

Dans le cas du champ électromagnétique, les choses se présentent de la même façon, en un peu plus compliqué. L'immobilité des extrémités de la corde devient l'annulation des composantes tangentielles du champ \vec{E} sur les parois, traduisant le fait que la vibration transverse est nulle.

²⁸ $\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$.

²⁹Tout comme la résolution complète d'une équation différentielle en temps suppose connues des conditions initiales.

³⁰Cette affirmation repose sur le fait que les états stationnaires sont supposés complets pour tous les problèmes rencontrés en Physique.

³¹Le champ électrique ne peut donc pas mettre en mouvement les éventuelles charges confinées dans la paroi. Par ailleurs, la force magnétique ne travaille pas. Au total, la paroi rigide (pas de travail de la force de pression de radiation) et totalement réfléchissante assure que le champ est mécaniquement isolé.

³²De la même façon, ce sont les conditions aux limites requises en Mécanique quantique qui produisent spontanément la quantification, de l'énergie pour les états liés par exemple.

Comme souvent, pour les calculs, il est commode d'introduire un potentiel-vecteur $\vec{A}(\vec{r}, t)$, que l'on peut choisir avec une liberté relative (invariance de jauge). Choissant la jauge de Coulomb, on a par définition :

$$\text{div} \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 , \quad (4.48)$$

ce qui produit d'emblée un rayonnement transverse (\vec{E} et \vec{B} perpendiculaires à \vec{k}). Dans une telle jauge, en-dehors des sources, les champs se déduisent de \vec{A} par :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} , \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A} . \quad (4.49)$$

On peut alors montrer ([23], ch. 6) que le potentiel-vecteur satisfait l'équation de propagation :

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \Delta \vec{A} = 0 . \quad (4.50)$$

En choisissant le repère cartésien aligné sur la boîte, celle-ci étant dans l'octant positif, les conditions aux limites doivent être écrites dans les plans d'équation $u = 0$ et $u = L$ ($u = x, y, z$). Dire que le champ électrique est normal aux parois, c'est poser une équation sur les composantes cartésiennes appropriées de \vec{A} . Par exemple, en $x = 0$ et $x = L$, \vec{E} doit être parallèle à l'axe Ox . Il en résulte :

$$A_y = A_z = 0 \quad \text{si } x = 0 \text{ ou } L . \quad (4.51)$$

De façon analogue, on doit avoir :

$$A_z = A_x = 0 \quad \text{si } y = 0 \text{ ou } L , \quad A_x = A_y = 0 \quad \text{si } z = 0 \text{ ou } L . \quad (4.52)$$

L'équation de propagation (4.50) est fondamentalement une équation représentant une vibration : ses solutions contiendront des lignes trigonométriques sin et/ou cos. Par ailleurs, les variables y sont séparées (notamment, Δ est une *somme* d'opérateurs de dérivation, chacun de ces derniers n'agissant que sur une variable spatiale). Il en résulte que la solution contient des *produits* de facteurs, dont chacun ne dépend que d'une coordonnée à la fois. Au total, schématiquement, l'ingrédient de base de la solution est un produit de trois facteurs, chaque facteur étant une combinaison linéaire de sin et de cos. Comme l'équation (4.50) est linéaire, cet ingrédient apparaît comme le terme générique d'une série (de Fourier).

Un peu de réflexion montre que, par exemple, compte tenu des conditions $A_z = 0$ si $x = 0, L$ et si $y = 0, L$, A_z doit contenir des facteurs du genre $\sin(p\pi x/L)$ et $\sin(q\pi y/L)$ où p et q sont des entiers ; les mêmes arguments valent pour A_x et A_y . En systématisant les notations, et en utilisant la linéarité de l'équation (4.50), on écrit sa solution générale sous la forme suivante ($\vec{r} = (x, y, z)$) :

$$A_x(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n},x}(t) \cos n_x \frac{\pi x}{L} \sin n_y \frac{\pi y}{L} \sin n_z \frac{\pi z}{L} , \quad (4.53)$$

$$A_y(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n},y}(t) \sin n_x \frac{\pi x}{L} \cos n_y \frac{\pi y}{L} \sin n_z \frac{\pi z}{L} , \quad (4.54)$$

$$A_z(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{n}} a_{\vec{n},z}(t) \sin n_x \frac{\pi x}{L} \sin n_y \frac{\pi y}{L} \cos n_z \frac{\pi z}{L} , \quad (4.55)$$

où $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ est un vecteur (non-nul) dont les composantes sont des entiers naturels. On se convainc facilement que ces développements assurent bien la satisfaction automatique des conditions aux limites (4.51) et (4.52), quelles que soient les amplitudes $a_{\vec{n},u}(t)$.

La condition (4.48) exprimant le choix de la jauge de Coulomb prend alors la forme très simple :

$$-\sum_{\vec{n}} \left(a_{\vec{n},x} \frac{n_x \pi}{L} + a_{\vec{n},y} \frac{n_y \pi}{L} + a_{\vec{n},z} \frac{n_z \pi}{L} \right) \sin n_x \frac{\pi x}{L} \sin n_y \frac{\pi y}{L} \sin n_z \frac{\pi z}{L} = 0 \quad \forall \vec{r} . \quad (4.56)$$

Une telle somme ne peut être nulle que si chacun des termes est identiquement nul, d'où :

$$a_{\vec{n},x} \frac{n_x \pi}{L} + a_{\vec{n},y} \frac{n_y \pi}{L} + a_{\vec{n},z} \frac{n_z \pi}{L} = 0 \quad \forall n_x, n_y, n_z . \quad (4.57)$$

Ceci signifie que le vecteur $\vec{a}_{\vec{n}}$ (potentiel vecteur associé au mode \vec{n}) est perpendiculaire au vecteur $\vec{k}_{\vec{n}}$ de composantes :

$$\vec{k}_{\vec{n}} = \left(n_x \frac{\pi}{L}, n_y \frac{\pi}{L}, n_z \frac{\pi}{L} \right) . \quad (4.58)$$

Ce résultat généralise à trois dimensions la relation (4.47) obtenue pour la corde vibrante. Le vecteur $\vec{k}_{\vec{n}}$ donne la direction de propagation ; dans le plan perpendiculaire, on peut définir la polarisation du champ à l'aide de deux vecteurs unitaires perpendiculaires entre eux³³ et à $\vec{k}_{\vec{n}}$, $\vec{e}_{\vec{n}\alpha}$ ($\alpha = 1, 2$). Dès lors, chaque vecteur $\vec{a}_{\vec{n}}$ se décompose comme suit :

$$\vec{a}_{\vec{n}} = q_{\vec{n}1} \vec{e}_{\vec{n}1} + q_{\vec{n}2} \vec{e}_{\vec{n}2} . \quad (4.59)$$

Avec ces définitions, le report des développements (4.53) à (4.54) dans l'équation de propagation (4.50) donne, pour chaque triplet (n_x, n_y, n_z) :

$$\frac{1}{c^2} \frac{d^2 q_{\vec{n}\alpha}}{dt^2} + \left[\sum_{u=x,y,z} \left(n_u \frac{\pi}{L} \right)^2 \right] q_{\vec{n}\alpha} = 0 \quad (\alpha = 1, 2, \vec{n} \in \mathbb{N}^3) . \quad (4.60)$$

En condensant les écritures $q_m \equiv q_{\vec{n}\alpha}$, *etc*, il vient :

$$\frac{d^2 q_m}{dt^2} + c^2 \vec{k}_m^2 q_m = 0 . \quad (4.61)$$

Pour chaque mode m , on trouve ainsi une équation d'oscillateur harmonique, où apparaît une pulsation propre ω_m , indépendante en fait de la polarisation α et fonction du seul module n du vecteur \vec{n} :

$$\omega_n^2 = \vec{k}_{\vec{n}}^2 c^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) . \quad (4.62)$$

Ainsi, le champ dans sa boîte apparaît comme une collection d'oscillateurs harmoniques *indépendants* (dans chaque équation dynamique (4.61), un seul mode apparaît à la fois). L'identification du champ avec une collection d'oscillateurs se confirme évidemment en écrivant l'expression de l'énergie déduite de (4.45). Compte tenu de (4.53) à (4.54), on a :

$$E_x(\vec{r}, t) = - \sum_{\vec{n}} \frac{\partial a_{n,x}}{\partial t} \cos n_x \frac{\pi x}{L} \sin n_y \frac{\pi y}{L} \sin n_z \frac{\pi z}{L} , \quad \text{etc} , \quad (4.63)$$

$$B_x(\vec{r}, t) = \pi \sum_{\vec{n}} (a_{n,z} \frac{n_y}{L} - a_{n,y} \frac{n_z}{L}) \sin n_x \frac{\pi x}{L} \cos n_y \frac{\pi y}{L} \cos n_z \frac{\pi z}{L} , \quad \text{etc} . \quad (4.64)$$

Pour expliciter commodément l'expression (4.45), on remarque que les sin et les cos sont orthogonaux³⁴ sur $[0, L]$. Seules subsistent les intégrales sur les termes carrés ; chacune d'entre elles vaut $(L/2)^3$. On trouve ainsi :

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 r \vec{E}^2 = \frac{L^3}{8} \sum_{\vec{n}} \dot{\vec{a}}_{\vec{n}}^2 = \frac{L^3}{8} \sum_{\vec{n}} (\dot{q}_{\vec{n}1}^2 + \dot{q}_{\vec{n}2}^2) \equiv \frac{L^3}{8} \sum_{\vec{n}, \alpha} \dot{q}_{\vec{n}\alpha}^2 \quad (4.66)$$

et :

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 r \vec{B}^2 = \frac{L^3}{8} \sum_{\vec{n}} (\vec{a}_{\vec{n}} \times \vec{k}_{\vec{n}})^2 = \frac{L^3}{8} \sum_{\vec{n}} (q_{\vec{n}1}^2 + q_{\vec{n}2}^2) \vec{k}_{\vec{n}}^2 \equiv \frac{L^3}{8} \sum_{\vec{n}, \alpha} q_{\vec{n}\alpha}^2 \vec{k}_{\vec{n}}^2 . \quad (4.67)$$

³³pour la commodité des calculs

³⁴En effet :

$$\int_0^L dx \sin n \frac{x}{L} \sin n' \frac{x}{L} = 0 \text{ si } n \neq n' , \quad \text{etc} . \quad (4.65)$$

Au total, l'énergie du champ est ($m \equiv (\vec{n}, \alpha)$) :

$$\mathcal{E} = \frac{V}{16} \varepsilon_0 \sum_m (\dot{q}_m^2 + \omega_m^2 q_m^2) \quad (V = L^3) . \quad (4.68)$$

L'énergie du champ apparaît sous la forme d'une *somme* d'énergies, chacune de ces dernières étant caractéristique d'un oscillateur harmonique. Le champ dans la cavité est bien un ensemble d'oscillateurs harmoniques sans interaction mutuelle, totalement indépendants les uns des autres. Par ailleurs, chacune des énergies élémentaires est la somme des carrés d'une "vitesse", \dot{q}_m , et d'une "coordonnée", q_m . À ce stade, la première étape du calcul est achevée et la description dynamique du système est complète.

La deuxième étape consiste maintenant à appliquer les résultats connus de Mécanique statistique élémentaire. En fait un seul résultat est ici nécessaire et suffisant : à la température T , l'énergie (moyenne) d'un oscillateur harmonique linéaire est égale à $k_B T$. Ce résultat (qui contient le théorème d'équipartition de l'énergie entre les variables dynamiques quadratiques de l'énergie) s'obtient immédiatement en partant de la probabilité $P_T(\varepsilon)$ pour le système d'être dans l'état d'énergie ε ; selon Boltzmann, on a :

$$P_T(\varepsilon) = C e^{-\beta \varepsilon} , \quad (\beta = (k_B T)^{-1}) . \quad (4.69)$$

C est une constante de normalisation assurant que la somme des probabilités vaut 1 (voir (4.72)). Ceci étant, l'expression de valeur moyenne de l'énergie d'un oscillateur matériel de masse m et de fréquence propre ω est :

$$\langle E_{\text{osc}} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp P_T(\varepsilon) \varepsilon , \quad (4.70)$$

où ε est la fonction³⁵ :

$$\varepsilon(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 . \quad (4.71)$$

(4.70) contient des intégrales gaussiennes que l'on calcule facilement³⁶ et on trouve³⁷ :

$$\langle E_{\text{osc}} \rangle_{\text{class}} = k_B T . \quad (4.74)$$

Remarque

Pour la référence ultérieure, on peut noter que le résultat exprimé par (4.74) peut s'obtenir autrement, en faisant notamment apparaître une intégrale sur l'énergie ε . La fonction Z définie en (4.72) – c'est la fonction de partition canonique – s'écrit aussi :

$$Z = 2 \int_0^{+\infty} d\varepsilon e^{-\beta \varepsilon} \int_{-x_0}^{+x_0} \frac{\sqrt{2m} dx}{2\sqrt{\varepsilon - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2}} = \frac{2\pi}{\omega} \int_0^{+\infty} d\varepsilon e^{-\beta \varepsilon} = \frac{2\pi}{\beta \omega} , \quad x_0 = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m\omega^2}} . \quad (4.75)$$

Alors :

$$\langle E_{\text{osc}} \rangle_{\text{class}} = \frac{1}{Z} \int_0^{+\infty} d\varepsilon \varepsilon e^{-\beta \varepsilon} \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = k_B T . \quad (4.76)$$

³⁵ ε n'est autre que le *Hamiltonien* de l'oscillateur harmonique (voir ch. 8).

³⁶ Sachant que la constante de normalisation dans (4.69) est telle que :

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\beta \varepsilon} = 1 \iff C = \frac{1}{Z} , \quad Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\beta \varepsilon} . \quad (4.72)$$

Toutes les intégrales gaussiennes rencontrées se déduisent de :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \forall a, -\pi < \arg a < +\pi . \quad (4.73)$$

³⁷ Ce résultat s'appelle *Théorème d'équipartition de l'énergie* : chaque degré de liberté quadratique dans l'expression de l'énergie – p et x sont quadratiques dans (4.71) – contribue exactement pour $k_B T/2$ à la moyenne thermique de l'énergie totale.

Le résultat (4.74) ne repose que sur la dépendance quadratique de l'énergie par rapport aux variables dynamiques et vaut tout autant pour un oscillateur mécanique ordinaire (m, ω) que pour les oscillateurs associés au champ électromagnétique. Ainsi, pour le champ on a (voir (4.68)) :

$$\left\langle \frac{\varepsilon_0}{16} (\dot{q}_m^2 + \omega_m^2 q_m^2) \right\rangle_{\text{class}} = k_B T . \quad (4.77)$$

Ce que l'on cherche la densité (volumique) d'énergie du champ en fonction de la fréquence, à la température T , soit $u(\nu, T)$. Il suffit donc maintenant de compter combien il y a d'oscillateurs de fréquence ν donnée par unité de volume et de dire que chacun d'entre eux a l'énergie $k_B T$.

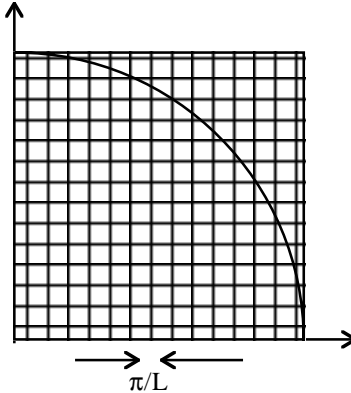


Figure 4.6: Illustration à deux dimensions de la recette pour compter les modes.

Le dénombrement des oscillateurs du champ s'opère de la façon suivante. Un oscillateur (mode) est caractérisé complètement par son vecteur $\vec{k}_{\vec{n}}$ et sa polarisation α , mais sa fréquence ν ne dépend que du module de \vec{k} . Le vecteur $\vec{k}_{\vec{n}}$ est défini par (4.58) ; c'est un vecteur dont l'extrémité est forcément en l'un des points d'une grille cubique très serrée (puisque la longueur L est aussi grande que l'on veut). Il est très facile de trouver le nombre d'oscillateurs différents de fréquence inférieure à une valeur donnée, ν : c'est essentiellement le nombre de points de la grille contenus dans la sphère de rayon $k = 2\pi/\lambda = 2\pi\nu/c$ (voir fig. 4.6). Plus précisément, ce nombre est :

$$N = 2 \frac{1}{8} \frac{(4\pi/3)k^3}{(\pi/L)^3} = \frac{(kL)^3}{3\pi^2} . \quad (4.78)$$

En effet, le facteur 2 tient compte du fait que chaque petit cube représente deux modes distincts par leur polarisation ($\alpha = 1, 2$). Le facteur³⁸ $1/8$ traduit le fait que seul l'octant positif de la sphère doit être retenu (ν est une quantité positive). Le numérateur est le volume de la sphère de rayon k , le dénominateur est celui d'un petit cube de côté L . Ainsi, l'expression (4.78) donne pour une enceinte de volume $V = L^3$, le nombre total de modes de fréquence inférieure à ν , soit $N(\nu)$; avec $k = 2\pi\nu/c$, ce nombre vaut :

$$N(\nu) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{L\nu}{c} \right)^3 . \quad (4.79)$$

Maintenant, pour trouver le nombre $dN(\nu)$ d'oscillateurs de fréquence comprise dans l'intervalle $[\nu, \nu + d\nu]$, il suffit de différentier cette expression :

$$dN(\nu) = 8\pi L^3 \frac{\nu^2}{c^3} d\nu \equiv g(\nu) d\nu . \quad (4.80)$$

$g(\nu)$ est par définition la densité de modes en fréquence pour le volume V . La densité de modes en fréquence par unité de volume est $g_V(\nu) = g(\nu)/V$, soit :

$$g_V(\nu) = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} \quad (4.81)$$

et donne le nombre d'oscillateurs par unité de volume de fréquence ν à $d\nu$ près.

³⁸Rayleigh (1900) a oublié ce facteur ; c'est Jeans qui a fait la correction (1905).

Le calcul de Rayleigh - Jeans s'achève maintenant, en disant que chacun de ces oscillateurs (indépendants) ayant à T l'énergie moyenne $k_B T$, l'énergie moyenne du champ par unité de volume à la température T est la somme des énergies de chacun de ces oscillateurs, c'est-à-dire est égale au produit $g_V k_B T$. Suivant Rayleigh - Jeans, le résultat final pour $u(\nu, T)$ est donc :

$$u_{RJ}(\nu, T) = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} k_B T \quad (4.82)$$

Cette expression représente bien les observations expérimentales à basse fréquence, et notamment le comportement en ν^2 , mais s'en écarte rapidement quand la fréquence augmente. Elle possède manifestement un défaut rédhibitoire : étant parabolique à *toute fréquence*, son intégrale est ... infinie, c'est précisément la catastrophe ultraviolette :

$$\int_0^{+\infty} u_{RJ}(\nu, T) d\nu \propto \int_0^{+\infty} \nu^2 d\nu = +\infty \quad (\text{catastrophe ultraviolette}) \quad (4.83)$$

4.2.3 Loi de Planck

Le calcul de Rayleigh - Jeans contient deux types d'ingrédients : ceux fournis par l'Électromagnétisme et ceux de la Mécanique statistique. Planck suspecta que l'erreur venait de cette dernière, qui donne, pour un oscillateur, une énergie moyenne $k_B T$, *indépendante de la fréquence* ν de l'oscillateur. Ce fait résulte notamment de la sommation *continue* sur les variables dynamiques, représentée par les deux *intégrales* gaussiennes contenues dans (4.70), reposant crucialement sur l'idée que l'énergie mécanique d'un oscillateur, E_{osc} , peut prendre n'importe quelle valeur réelle positive et, de ce fait, peut varier *continûment*. L'astuce³⁹ révolutionnaire de Planck fut d'admettre *a priori* au contraire que E_{osc} ne peut être qu'un multiple entier de quelque chose ; ce "quelque chose" est forcément une énergie spécifique de l'oscillateur considéré, lequel est caractérisé par une et une seule grandeur physique : sa fréquence ν . Pour ces raisons, Planck pose :

$$E_{osc} \propto \text{entier} \times \nu \quad (4.84)$$

Pour des raisons dimensionnelles, la constante de proportionnalité est homogène à une action ; historiquement notée h , c'est la célébrisime constante de Planck. Au total, Planck reprend le calcul en posant au départ :

$$E_{osc} = n h \nu \equiv \varepsilon_n \quad (n \in \mathbb{N}) \quad (4.85)$$

Cette relation *quantifie* de fait l'énergie de l'oscillateur ; *ipso facto*, ceci induit la quantification des échanges d'énergie⁴⁰. La suite du calcul est alors de routine. L'énergie moyenne d'un oscillateur à la température T résulte des probabilités de Boltzmann (4.69), mais maintenant ε est de la forme $n h \nu$ (au lieu de (4.71)) et l'intégration est remplacée par une somme *discrète* sur les entiers naturels. Au lieu de (4.76), on a maintenant :

$$\langle E_{osc} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{+\infty} \varepsilon_n e^{-\beta \varepsilon_n} \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (4.86)$$

où Z est la somme *discrète* :

$$Z = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta \varepsilon_n} \quad (4.87)$$

et où ε_n est donné par (4.85). À nouveau, le facteur $1/Z$ assure que la somme des probabilités est égale à 1. Un calcul élémentaire partant de (4.85) - (4.87) donne alors :

$$\langle E_{osc} \rangle = \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (4.88)$$

Le point capital est que l'énergie moyenne dépend maintenant de la fréquence, à la différence du résultat classique. C'est l'expression (4.88) qui va se substituer à $k_B T$ et, combinée à $g_V(\nu)$, donne :

$$u(\nu, T) = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \quad (4.89)$$

³⁹Le mot astuce n'est pas péjoratif. Planck lui-même resta longtemps réticent sur sa solution du problème, persuadé qu'il ne s'agissait que d'un *truc* sans vraie contrepartie physique.

⁴⁰Dans l'hypothèse de Planck, $h\nu$ apparaît comme un "atome" d'énergie, ce que l'on appelle communément un *quantum* d'énergie.

Ceci constitue la formule de Planck pour le rayonnement thermique. Cette expression reproduit magnifiquement tous les résultats expérimentaux⁴¹ :

1. La loi de Planck donne bien le comportement en ν^2 à basse fréquence, plus précisément lorsque $h\nu \ll k_B T$; le développement limité au plus bas ordre reproduit exactement le résultat classique (4.82). D'ailleurs, à haute température (ou basse fréquence)⁴², l'expression de l'énergie (4.88), au plus bas ordre, coïncide avec l'expression classique (4.74).
2. La loi de Planck élimine la catastrophe ultraviolette, car l'expression (4.89) se comporte comme $\nu^3 e^{-\beta h\nu}$ à haute fréquence – exactement comme l'avait remarqué Wien – et est manifestement intégrable. Le calcul permet d'ailleurs de retrouver la loi de Stefan et d'élucider la constante σ , qui n'est pas une nouvelle constante de la physique, mais s'exprime à l'aide d'autres constantes fondamentales ; on trouve (franchement, on ne l'aurait pas deviné) :

$$\sigma = \frac{2\pi^5}{15} \frac{k_B^4}{h^3 c^2} . \quad (4.90)$$

3. Toutes les observations de Wien sont reproduites. En particulier, on voit que (4.89) s'écrit aussi :

$$u(\nu, T) = T^3 \frac{8\pi h}{c^3} \frac{(\nu/T)^3}{e^{h\nu/(k_B T)} - 1} . \quad (4.91)$$

Ceci élucide la fonction universelle f , dont l'existence avait été mise en évidence expérimentalement par Wien :

$$f(x) = A \frac{x^3}{e^{(h/k_B)x} - 1} \quad (x = \nu/T, \quad A = 8\pi h/c^3) . \quad (4.92)$$

4. En utilisant :

$$u_\nu d\nu = u_\lambda |d\lambda| , \quad (4.93)$$

on trouve la loi de Planck exprimée en longueur d'onde :

$$u_\lambda(\lambda, T) = 8\pi \frac{hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{(hc/\lambda k_B T)} - 1} . \quad (4.94)$$

Les formes (4.94) et (4.89) contiennent bien sûr la loi du déplacement de Wien, exprimée en longueur d'onde ou en fréquence :

$$\lambda_{\max} T = C , \quad \frac{\nu_{\max}}{T} = C' . \quad (4.95)$$

Les valeurs numériques de C et C' sont connues⁴³ :

$$C \simeq 0.201 \frac{hc}{k_B} , \quad C' \simeq 2.820 \frac{k_B}{h} . \quad (4.97)$$

Remarques

1. Tout ce qui a été dit sur l'origine physique du rayonnement thermique (accélération de charges sous l'effet des fluctuations thermiques) en constitue l'image classique. Cette image ne tient plus en Mécanique Quantique, ne serait-ce que parce que la notion de trajectoire (et donc d'accélération) disparaît. Einstein

⁴¹La confrontation précise permet d'ailleurs de *mesurer* la constante de Planck, qu'il faut bien tôt ou tard déterminer.

⁴²où le *quantum* $h\nu$ est très petit devant $k_B T$, auquel cas la somme discrète est plutôt le précurseur d'une intégrale (\sim somme de Darboux), d'où la fusion en pratique de sommation et intégration.

D'une façon générale, les effets quantiques s'évanouissent à haute température : les fluctuations thermiques augmentent avec T et masquent peu à peu les fluctuations quantiques, ces dernières restant singulières, malgré leur petitesse (du genre $e^{-A/h}$).

⁴³Noter que le produit CC' , égal à $\lambda_{\max}\nu_{\max}$, ne coïncide pas avec c :

$$\lambda_{\max} \nu_{\max} \simeq 0.57 c \neq c . \quad (4.96)$$

(toujours lui) a proposé une autre description en introduisant explicitement la matière qui interagit avec le rayonnement et en la représentant de la façon la plus simple possible (la seule nécessité est d'avoir de la matière en interaction avec le rayonnement pour assurer que celui-ci peut relaxer vers l'équilibre). Ce faisant, Einstein fut conduit à considérer d'une part des processus d'absorption, d'autre part des processus d'émission, en introduisant des grandeurs usuellement notées A_{mn} et B_{mn} (coefficients d'Einstein) ; deux formes d'émission sont requises : l'émission induite (décrite par B_{mn} , symétrique de l'absorption (forcément induite), $B_{mn} = B_{nm}$) et l'émission *spontanée* (représentée par les A_{mn} , qui survient même en l'absence de rayonnement). Cette dissymétrie a une origine physique simple : comme les probabilités de Boltzmann décroissent quand l'énergie augmente, il faut bien que le courant (atomes à l'état excité \rightarrow atomes à l'état fondamental) soit supérieur au courant en sens inverse⁴⁴. Enfin, une dernière façon – expéditive – de concevoir le rayonnement thermique consiste simplement à le considérer comme un gaz de particules (photons) et à appliquer à ce système la statistique (quantique) appropriée (celle de Bose-Einstein).

2. L'hypothèse de Planck a connu un autre succès remarquable. En posant à nouveau $E = nh\nu$, Einstein a trouvé une explication simple du comportement de la chaleur spécifique des solides à basse température, incompréhensible dans le cadre classique.

⁴⁴Techniquement, la dissymétrie s'introduit par la non-commutation des opérateurs associés aux modes du champ électromagnétique une fois quantifié.

Chapitre 5

Quantification de l'énergie : le photon

5.1 L'effet photoélectrique

L'étude systématique de l'effet photoélectrique est venue à point nommé pour conforter l'hypothèse de Planck. L'interprétation d'Einstein repose en effet sur l'idée que la lumière n'est pas divisible à l'infini et est, elle aussi, "atomisée" en petits morceaux irréductibles, assimilables à des particules au vu de certaines de leurs propriétés, notamment l'existence d'une relation de dispersion.

5.1.1 Découverte et faits expérimentaux

L'irradiation par de la lumière ultra-violette du plateau métallique¹ d'un électroscope initialement non chargé provoque l'écartement des deux lames (Hertz, 1887). En vertu de la conservation de la charge électrique totale, la seule explication possible est l'extraction par la lumière de charges électriques hors du métal ; les charges ainsi émises sont des électrons.

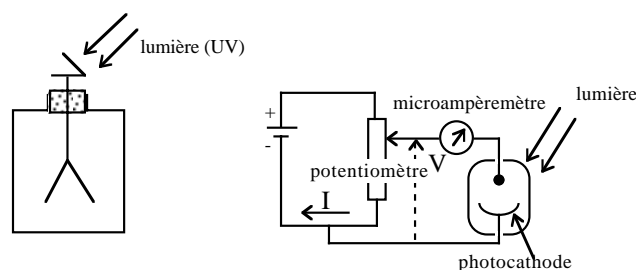


Figure 5.1: Effet photoélectrique : observation et montage pour l'étude de la caractéristique.

L'étude quantitative de cet effet utilise un petit circuit électrique simple, contenant une ampoule dont l'une des électrodes (photocathode) constitue la source d'électrons. Ceux-ci sont collectés par une anode à l'aide d'une ddp V et produisent un courant I que l'on mesure à l'aide d'un microampèremètre. Les observations suivantes peuvent être faites [18] :

1. pour un métal donné, il existe une fréquence-seuil ν_S . Si la lumière a une fréquence ν inférieure à ce seuil, l'effet ne se produit pas. Si la fréquence est supérieure à ν_S (S pour *seuil*), l'effet se produit ; alors, il n'existe aucun délai mesurable entre le début de l'irradiation et la déviation de l'aiguille

¹Zinc, césium, ...

- la caractéristique courant - tension $I(V)$ démarre linéairement pour une tension V_0 *négative*. L'intensité sature à une valeur I_{sat} pour les grandes valeurs de la ddp appliquée. La valeur du courant de saturation est proportionnelle à l'intensité lumineuse. En revanche, la contre-tension V_0 ne dépend pas de cette dernière (fig. 5.2)
- la contre-tension V_0 varie linéairement avec la fréquence (fig. 5.3). Plus précisément, $-V_0$ est une fonction linéaire croissante de $(\nu - \nu_S)$, qui s'annule en $\nu = \nu_S$:

$$|V_0| = K(\nu - \nu_S) \quad (\nu \geq \nu_S) . \quad (5.1)$$

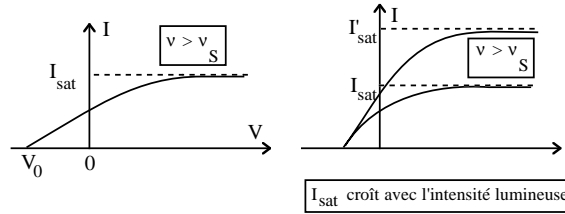


Figure 5.2: Variations de la caractéristique $I(V)$.

Ni l'existence de ν_S , ni l'instantanéité de l'effet, ni le démarrage à $V_0 < 0$ ne peuvent être expliqués dans une vision classique de la lumière et, notamment, sont incompatibles avec l'idée d'apport *continu* d'énergie par la lumière à la plaque métallique. En particulier, si tel était le cas, il suffirait d'attendre assez longtemps pour qu'un électron engrange assez d'énergie pour finalement pouvoir être extrait du métal. Il n'en est rien : l'effet se produit instantanément ou ne se produit pas et cette alternative ne repose que sur la position de ν par rapport à ν_S .

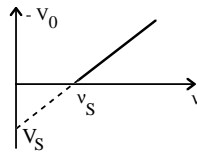


Figure 5.3: Variations de contre tension $-V_0$ en fonction de la fréquence ν .

Au contraire, si l'on admet comme Einstein l'a proposé que l'énergie transportée par la lumière est formée de quantités élémentaires *finies* insécables, alors il est possible de rendre compte de l'ensemble des faits expérimentaux.

5.1.2 L'interprétation d'Einstein (1905)

Avant d'exposer l'interprétation d'Einstein², il convient de préciser la situation d'un électron dans un métal. Les métaux sont conducteurs, il est donc licite d'imaginer qu'ils contiennent des électrons qui sont, sinon libres, du moins assez mobiles pour donner lieu au passage d'un courant lorsqu'une ddp est appliquée. Très nombreux, ces électrons (dits de conduction) forment une sorte de fluide appelé gaz de Fermi et, pour des raisons subtiles³, sont tenus, grossièrement parlant, d'avoir des énergies différentes ; contruire le métal avec ses électrons, c'est donc "empiler" ces derniers dans différents états, constituant ce que l'on appelle la mer de Fermi. L'image que l'on peut se faire est celle d'un récipient partiellement rempli, l'axe vertical mesurant l'énergie à partir d'une origine donnée (voir fig. 5.4). La surface de la mer de Fermi est située à une énergie appelée niveau de Fermi, noté ε_F .

²1905 est une année proprement fabuleuse (souvent désignée par *Annus mirabilis*) : Einstein publia en quelques mois trois articles qui marquent l'histoire de la Physique ; le plus célèbre est sans doute celui consacré à l'exposé de la relativité restreinte ; mais, outre un second article proposant la notion de photon, Einstein publia un mémoire sur le mouvement Brownien qui est à la base de tous les développements ultérieurs sur ce sujet.

³Les électrons appartiennent à la classe des particules appelées fermions. De façon délibérément un peu vague : la cohabitation de plusieurs fermions dans le même état d'énergie est interdite.

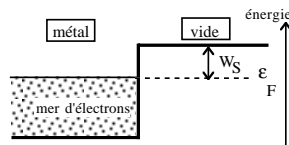


Figure 5.4: Représentation schématique d'un métal.

Ceci étant, ces électrons ne peuvent pas sortir spontanément du métal⁴ : pour les extraire, il faut leur fournir d'une façon ou d'une autre une certaine énergie. Évidemment, ce sont les électrons situés à la surface de la mer de Fermi qui peuvent sortir le plus facilement. On appelle travail de sortie, noté W_S (S pour *sortie*), l'énergie minimale à fournir pour extraire un électron du métal ; en énergie, c'est donc la distance entre le niveau de Fermi et l'énergie d'un électron extrait du métal sans vitesse initiale (dite énergie du vide). Cette énergie vaut typiquement quelques eV⁵.

Une propriété cruciale de l'effet photo-électrique est l'existence de la fréquence-seuil ν_S , qui donne un fonctionnement par tout ou rien. Ce fait peut être rapproché de l'hypothèse de Planck proposant que les échanges d'énergie entre lumière et matière se font par multiples entiers d'une quantité indivisible, et c'est ce que fit Einstein en admettant l'hypothèse suivant laquelle la lumière est en fait constituée de petits grains⁶ indivisibles appelés *photons*. Einstein reprend la formule de Planck posée pour le corps noir et admet que l'énergie de chaque petit grain associé à une lumière de fréquence ν est donnée par⁷ :

$$E = h\nu . \quad (5.2)$$

Compte tenu des contextes très différents qui virent cette relation proposée, il est juste d'appeler (5.2) relation de Planck - Einstein.

Ainsi, selon Einstein, l'énergie apportée par la lumière monochromatique au métal est constituée de petits "atomes" de lumière indivisibles. Maintenant, de deux choses l'une : ou bien chacun de ces petits grains a une énergie supérieure à W_S – et alors, *a priori*⁸, un photon va pouvoir faire sauter l'électron hors du métal –, ou bien l'énergie de chaque photon est inférieure à W_S et aucun électron ne peut être extrait⁹. Il est facile d'écrire l'équation de conservation de l'énergie pour chaque événement élémentaire. Avant, il y a un photon d'énergie $h\nu$ et un électron lié au métal, avec une énergie de liaison¹⁰ ($-W_S$) ; après, le photon n'existe plus – on dit qu'il a été absorbé – et on se retrouve avec un électron libre (dans le vide) de vitesse v ; la conservation de l'énergie (Avant = Après) s'écrit :

$$h\nu + (-W_S) = \frac{1}{2}mv^2 , \quad (5.3)$$

où m est la masse d'un électron. De ceci on déduit la forme historique :

$$h\nu = W_S + \frac{1}{2}mv^2 , \quad (5.4)$$

qui constitue l'équation d'Einstein pour l'effet photoélectrique. Dans ces écritures, c'est l'énergie cinétique "initiale" de l'électron qui apparaît, celle qu'il a juste au sortir du métal et sans préjuger de ce qui lui arrive par la suite. D'ailleurs, rien n'interdit *a priori* l'éjection d'électrons situés en profondeur dans la mer de Fermi – bien sûr, alors, leur vitesse initiale sera inférieure à v donné par (5.4). En tout état de cause, les photoélectrons sont distribués en énergie.

⁴Si on laisse de côté l'émission thermoelectronique, voir plus loin.

⁵ $W_{S, Cs} = 2.1$ eV, $W_{S, Pt} = 5.4$ eV.

⁶Cette idée était très ancienne, puisqu'elle fut avancée par Newton, qui imaginait la lumière comme une pluie de petits corpuscules. La découverte ultérieure de phénomènes explicables en termes d'ondes (interférences, diffraction, ...) ruina la proposition de Newton jusqu'à ce que ...

⁷C'est pour son interprétation de l'effet photoélectrique que Einstein obtint le Prix Nobel en 1922.

⁸voir la note 13.

⁹Einstein admet que les photons ne savent pas se faire la courte-échelle. Depuis, on a réalisé qu'il existe des transitions (rares) dites à deux *photons*, qui ne jouent aucun rôle ici, mais qui sont nécessaires pour expliquer par exemple l'existence d'états atomiques métastables, dont la durée de vie est extraordinairement longue à l'échelle atomique (la milliseconde, voire la seconde).

¹⁰On prend l'énergie du vide comme origine des énergies ; seules comptent les différences d'énergie.

Alors, tout s'explique. En particulier, si $\nu < W_S/h$, (5.4) n'a pas de solution puisque l'énergie cinétique est forcément positive. On peut ainsi identifier la fréquence-seuil observée :

$$\nu_S = \frac{W_S}{h} ; \quad (5.5)$$

comme constaté expérimentalement, la fréquence-seuil dépend bien de la nature du métal.

Einstein donne aussi l'explication de la contre-tension négative V_0 . En effet, pour une fréquence ν donnée supérieure au seuil, l'énergie cinétique des électrons est effectivement non-nulle ; ceux qui viennent de la surface de la mer de Fermi ont précisément une vitesse telle que :

$$\frac{1}{2} m v^2 = h(\nu - \nu_S) . \quad (5.6)$$

Avec cette vitesse de départ, ils peuvent donc remonter une ddp antagoniste telle que $|e| \times \text{ddp} = (1/2) m v^2$; il en résulte¹¹ :

$$eV_0 = \frac{1}{2} m v^2 \iff |V_0| = \frac{h}{|e|} (\nu - \nu_S) . \quad (5.7)$$

Ceci identifie la constante K apparaissant dans la loi expérimentale (5.1) en termes des constantes fondamentales. Par ailleurs, la contre-tension V_0 ne dépend pas en effet de l'intensité lumineuse tombant sur la plaque métallique.

L'instantanéité de l'effet – quand il se produit – fait penser à une collision, au sens large. L'idée de particules de lumière (photons) et de matière (électrons) entrant en collision sera reprise avec succès peu après par Compton, à nouveau pour rendre compte d'un effet observé à première vue inexplicable, et de nature très différente de l'effet photoélectrique¹². Enfin, l'augmentation du courant de saturation avec le flux lumineux se comprend aisément : augmenter l'intensité lumineuse, c'est augmenter le nombre de photons frappant la cathode par unité de temps ; c'est donc augmenter d'autant le nombre d'électrons émis¹³.

Remarques

1. Une caractéristique surprenante de l'effet photoélectrique ordinairement observé est son instantanéité. L'absence de délai mesurable se rapporte aux conditions usuelles de l'expérience, où le courant de photons est gigantesque (pour fixer les idées : si on se place à $d = 1$ mètre de distance d'une ampoule de puissance $\mathcal{P} = 100$ W émettant dans le jaune (lampe à sodium par exemple), on reçoit¹⁴ $N \simeq 2 \times 10^{14}$ photons par seconde et par cm^2 – c'est évidemment l'extrême petitesse de h qui produit un tel nombre). Schématiquement, avec un rendement de 10^{-3} , et s'il faut attendre le 1000^{ème} photon, il s'écoule en gros 10^{-13} seconde. Évidemment, si l'on opère avec une source de lumière très faible¹⁵, rien *a priori* ne s'oppose à l'observation d'un délai ... hormis la difficulté de mise en œuvre d'une telle expérience.
2. Le travail de sortie W_S n'est pas en pratique défini avec une grande précision. En effet, le gaz d'électrons du métal, à la température T , est soumis à l'agitation thermique (à l'ambiante, $k_B T \simeq 25$ meV). De ce fait, la surface de la mer de Fermi ressemble davantage à une mer un peu agitée qu'à celle d'un lac de montagne. Il en résulte que l'énergie cinétique initiale du photoélectron est dispersée d'une quantité

¹¹La relation (5.7) n'est vraie que si les deux électrodes sont faites du même métal ; dans le cas contraire, le potentiel d'arrêt V_0 contient la différence des travaux de sortie des deux métaux (voir J. Rudnick *et al*, Amer. J. Phys. **44**, 796 (1976))

¹²Dans l'effet Compton, le photon est non pas absorbé mais diffusé : présent avant la collision, on le retrouve après.

¹³ Il ne faut pas croire que tout photon de fréquence supérieure à ν_S donne un photoélectron. Le processus élémentaire – tout comme la désintégration radioactive – est un phénomène aléatoire descriptible en termes de probabilités. Comme la probabilité est loin d'être égale à 1, il y a finalement peu de chances d'éjection. Tout ceci se traduit phénoménologiquement par l'existence d'un rendement photoélectrique η (10^{-3} est une valeur courante), fonction de la fréquence pour un métal donné, et variable d'un métal à l'autre. En jouant avec les très grands nombres, le rendement est finalement le rapport entre le courant d'électrons émis par seconde et le courant de photons incidents.

¹⁴Ce nombre N résulte de :

$$Nh\nu = \frac{10^{-4}}{4\pi d^2} \mathcal{P} . \quad (5.8)$$

¹⁵Pour une étoile de rayon 10^6 km (un peu plus grosse que le soleil) émettant dans le rouge comme un corps noir et située à 20 années-lumière de la terre, la pupille (quelques mm^2) reçoit environ 5000 photons par seconde : l'œil humain est un extraordinaire récepteur, capable de fonctionner sur une plage d'intensité phénoménale !

reflétant cette agitation¹⁶. La valeur de W_S trouvée dans une table correspond à la valeur *moyenne*, à la température considérée.

3. On doit à Millikan [20] l'une des premières déterminations précises de la fameuse constante de Planck, grâce à une étude expérimentale précise de la contre-tension V_0 . La mesure de cette quantité en fonction de la fréquence met en évidence une droite dont la pente (voir (5.7)) donne h (voir fig. 5.5). Millikan a trouvé $h \simeq 6,6 \times 10^{-34}$ J.s. La valeur actuellement connue est [21] :

$$h = 6,626\,068\,76 \dots \times 10^{-34} \text{ J s} . \quad (5.9)$$

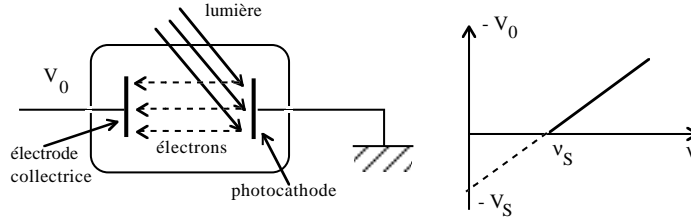


Figure 5.5: Principe de la mesure de la constante de Planck h par Millikan.

5.2 Le photon

Les acquis fondamentaux de Planck et d'Einstein peuvent se résumer ainsi : les échanges d'énergie entre matière et rayonnement se font par *quanta* discrets dont l'énergie et la fréquence sont reliées par (5.2). Ceci admis, il reste à caractériser la "particule" appelée photon, remettant à plus tard la nécessité de réconcilier les deux visions de la lumière : son aspect ondulatoire expliquant interférences, diffraction, ... et son aspect corpusculaire imaginé par Newton et repris finalement par Planck et Einstein¹⁷.

5.2.1 Relation de dispersion du photon

Classiquement, une façon de caractériser une particule consiste à se donner sa relation de dispersion – où figure la masse m de la particule –, c'est-à-dire de préciser la relation entre énergie et vitesse. La définition de l'énergie cinétique classique d'un point matériel de masse m :

$$E_{\text{class}} = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (\vec{p} = m\vec{v}) \quad (5.10)$$

est certainement la relation de dispersion la plus élémentaire. Les photons sont les grains de lumière, supposés donc se déplacer à la vitesse de celle-ci, c ; en tant que tels, ils ne peuvent être que d'essence relativiste. Il faut donc considérer non pas (5.10), mais la relation écrite par Einstein¹⁸, valide pour toute particule de masse m (masse propre, "au repos")¹⁹ :

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} , \quad (5.11)$$

¹⁶Ce sont d'ailleurs les fluctuations thermiques qui sont responsables de l'émission thermoélectronique : un morceau de métal porté à haute température (~ 1000 K) émet des électrons produisant un courant mesurable. En pareil cas, les crêtes des plus hautes vagues de la mer de Fermi ne parviennent pas pour autant à la hauteur du vide, mais comme les probabilités dépendent exponentiellement de la différence d'énergie, une petite variation de cette dernière peut avoir des effets spectaculaires.

¹⁷Seule la Mécanique Quantique est capable de proposer un cadre permettant de réunir ces deux aspects à première vue antagonistes.

¹⁸toujours en 1905 ! Le débat récent sur l'importance du rôle de sa (première) femme Mileva (également physicienne) ne semble pas devoir modifier sérieusement le bilan de l'*annus mirabilis*...

¹⁹Il est facile de vérifier que $E - mc^2$ développé à l'ordre le plus bas en v/c redonne l'énergie cinétique classique E_{class} .

où $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$ est l'impulsion²⁰. Si tout ceci est vrai, on peut rapprocher (5.2) et (5.11) pour obtenir :

$$h\nu = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} . \quad (5.12)$$

Rien n'interdit de considérer un rayonnement de fréquence arbitrairement petite ; à la limite de la fréquence nulle, (5.12) donne :

$$0 = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} . \quad (5.13)$$

Ceci n'est possible que si chacun des termes sous le radical est nul et produit la conclusion inédite : la masse du photon est nulle, un résultat qui est en fait être vrai à toute fréquence : la masse (propre) est un attribut intrinsèque indépendant de l'énergie (cinétique par exemple) de la particule. La masse du photon étant nulle²¹, il résulte de (5.11) que la loi de dispersion de ce dernier est simplement :

$$E = pc . \quad (5.14)$$

Cette relation est linéaire pour tout p , ce qui la démarque nettement de la relation classique²². (5.14) peut s'écrire de bien des façons :

$$h\nu = pc \iff \frac{hc}{\lambda} = pc \iff \lambda = \frac{h}{p} . \quad (5.15)$$

La dernière forme anticipe la relation de de Broglie, valide pour toute particule, quelle que soit sa masse. En termes de pulsation et de vecteur d'onde, on a :

$$E = \hbar\omega , \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} , \quad (5.16)$$

où \hbar est la constante de Planck divisée par 2π , dont l'usage s'imposera rapidement :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,571\,60 \dots \times 10^{-34} \text{ J s} . \quad (5.17)$$

Une confirmation éclatante de ces relations sera obtenue par l'interprétation de l'effet Compton (section 5.3). D'un autre côté, il est éclairant (et rassurant) de confronter ces résultats nouveaux à des observations anciennes, interprétées dans le strict cadre de l'Électromagnétisme classique. Un bon exemple est fourni par la pression de radiation.

5.2.2 Comparaison avec la description corpusculaire classique de la pression de radiation

On part donc de l'hypothèse que le rayonnement est un pluie de particules d'énergie $E = h\nu$ et d'impulsion p . Soit un faisceau de lumière monochromatique éclairant un miroir rigide immobile de masse arbitrairement grande²³ ; le miroir est supposé avoir une masse aussi grande que l'on veut. La lumière est caractérisée par sa fréquence ν et par le nombre de photons par unité de volume, N_ν , relié à la densité (volumique) d'énergie u_ν – que l'on sait aussi définir en Électromagnétisme (pour un rayonnement à l'équilibre thermique, c'est le $u(\nu, T)$ trouvé par Planck) :

$$u_\nu = N_\nu h\nu = N_\nu pc . \quad (5.18)$$

p est l'impulsion des photons, qui rebondissent sur le miroir un peu à la manière des atomes²⁴ d'un gaz sur la paroi du conteneur. La variation d'impulsion des photons (par unité de temps) produit une force normale de recul sur le miroir ; ramenée à l'unité de surface, c'est une pression : c'est la pression de radiation²⁵.

²⁰ $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$, $\beta = v/c$.

²¹Selon des travaux récents [22], la borne supérieure expérimentale de la masse du photon est 7×10^{-17} eV, soit environ 10^{-52} kg.

²²et a des conséquences sur l'équation d'état du rayonnement à l'équilibre, comme on l'a vu au ch. 4 ($PV = E/3$ pour le rayonnement au lieu de $PV = 2E/3$ dans le cas du gaz parfait classique).

²³Le miroir ne recule donc pas sous l'effet des impacts ; dans le cas contraire, il y aurait une correction Doppler.

²⁴L'image vaut ce qu'elle vaut : le photon relève évidemment de la Mécanique Quantique (et relativiste ? ...). De surcroît, au contraire de ce qui se passe pour les particules "ordinaires" (électron par exemple), on ne peut pas définir, pour le photon, une

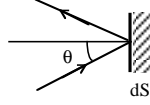


Figure 5.6: Représentation schématique du rebond d'un photon sur un miroir.

Le calcul précis de la pression de radiation dans l'image d'Einstein est facile ; l'argument est le même que pour trouver la pression en Théorie cinétique des gaz. Le calcul ci-dessous donne la pression pour une incidence fixée θ par rapport à la normale au miroir, supposé parfait (réflexion spéculaire). Entre deux instants t et $t + dt$, le nombre de photons frappant la surface dS du miroir est :

$$N_\nu (cdt dS \cos \theta) . \quad (5.19)$$

Chaque photon incident transfère une impulsion $p \cos \theta$ le long de la normale au miroir ; le transfert normal entre t et $t + dt$ est donc :

$$[N_\nu (cdt dS \cos \theta)] p \cos \theta . \quad (5.20)$$

En repartant, chaque photon redonne à nouveau $p \cos \theta$ au miroir. Au total, l'impulsion normale donnée par le rayonnement à l'élément de surface ds entre t et $t + dt$ est :

$$2 N_\nu p c \cos^2 \theta dt dS . \quad (5.21)$$

En divisant par dt , on obtient la variation d'impulsion de la surface dS par unité de temps (c'est donc une force) ; en divisant alors par dS , on obtient l'expression de la pression de radiation (voir aussi (5.18)) :

$$P_{\text{rad}} = 2 N_\nu p c \cos^2 \theta = 2 u_\nu \cos^2 \theta = 2 N_\nu p c \cos^2 \theta . \quad (5.22)$$

Le courant de photons est égal à $N_\nu c$ (densité \times vitesse), de sorte que le courant d'énergie Φ au sens d'Einstein est $\Phi = h\nu N_\nu c = N_\nu p c^2$; exprimée à l'aide de Φ , la pression selon Einstein est :

$$P_{\text{rad}} = 2 \frac{\Phi}{c} \cos^2 \theta . \quad (5.23)$$

Cette expression est en parfait accord avec le calcul de la pression de radiation effectué dans le strict cadre de l'Électromagnétisme. En effet, si Φ est le courant d'énergie lumineuse défini en Électromagnétisme, la pression sur un miroir parfait est donnée [23] par :

$$P_{\text{rad, classique}} = 2 \frac{\Phi}{c} \cos^2 \theta . \quad (5.24)$$

Ainsi, les deux expressions de la pression de radiation, (5.23) obtenue en raisonnant avec les photons, et (5.24) obtenue avec les équations de Maxwell, sont identiques²⁶.

5.3 L'effet Compton

La découverte de l'effet Compton est un sous-produit de l'étude systématique de la diffusion de la lumière de courte longueur d'onde par les atomes.

fonction d'onde associée à une densité de probabilité de présence dans l'espace physique ordinaire (en revanche, ceci est possible dans l'espace des impulsions).

²⁵La pression de radiation est un phénomène très minoritaire dans les conditions usuelles : le rayonnement solaire à la surface de la Terre donne lieu à une pression qui vaut à peu près 2×10^{-6} Pa, environ 10^{11} fois plus petite que la pression atmosphérique ! De même, dans le radiomètre de Crookes, la pression (d'origine thermique) exercée par le gaz résiduel est plus grande sur les ailettes noires que sur les ailettes argentées, et est toujours très supérieure à la pression de radiation (laquelle est plus forte sur les ailettes argentées que sur les ailettes noires) ; au total, le petit manège tourne dans le "bon" sens. Quoique très faible, la pression de radiation peut donner lieu à des effets spectaculaires quand il n'y a rien d'autre pour la contrecarrer (exemple déjà donné : incurvation de la queue des comètes quand elles arrivent près du Soleil).

²⁶Au passage, on comprend facilement pourquoi la pression de radiation sur une surface rugueuse et/ou absorbante est plus faible (alors, pour une incidence donnée θ , la réflexion se fait à un angle θ' quelconque, qu'il faut moyenner) ; pour une incidence normale, on trouve $P_{\text{rad}} = (3/2)\Phi/c$ pour la surface rugueuse, au lieu de $2\Phi/c$ pour le miroir parfait ($1 + \langle 1 \rangle_{\text{angles}} = 1 + 1/2 = 3/2$).

5.3.1 Diffusion des rayons X par les atomes

Les expériences de Barkla (1909) ont permis d'obtenir une bonne estimation du nombre d'électrons au sein de l'atome. Le principe est le suivant. On envoie sur une cible des rayons X (courte longueur d'onde, $\lambda_0 \sim 1 \text{ \AA}$) et on regarde le rayonnement diffusé par cette dernière. L'interaction matière - rayonnement se fait principalement par le champ électrique de l'onde, qui met en vibration forcée les électrons intraatomiques ; l'onde diffusée a donc la *même* fréquence que l'onde incidente et on parle alors naturellement de diffusion *élastique*²⁷. La section efficace atomique de diffusion est, pour les rayons X, pratiquement indépendante de la fréquence, cette dernière étant très supérieure aux fréquences de résonance de l'atome (qui se situent dans le domaine optique) ; c'est la section dite Thomson et elle vaut :

$$\sigma_T = Z \frac{8\pi}{3} r_e^2, \quad (5.25)$$

où r_e est le rayon classique de l'électron²⁸. À un facteur numérique près, σ_T ne peut être que le carré la seule longueur disponible avec la charge de l'électron (qui couple ce dernier au champ électromagnétique), sa masse (son inertie, qui s'oppose à la mise en vibration forcée) et, bien sûr, la vitesse de la lumière. Par ailleurs, l'intensité diffusée est évidemment proportionnelle²⁹ au nombre Z d'électrons présents dans l'atome, de sorte que l'étude quantitative de la lumière diffusée permet de fait de remonter jusqu'au numéro atomique Z .

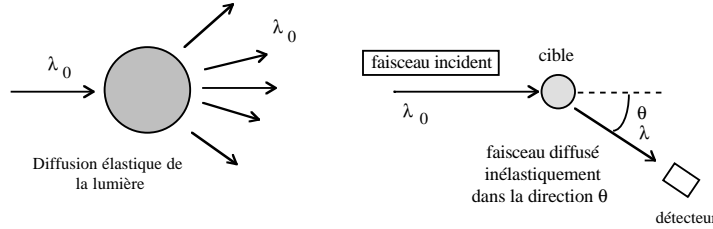


Figure 5.7: Diffusion élastique (à gauche) et inélastique (à droite) des rayons X durs par un élément léger.

Pour l'essentiel, les observations de Barkla pouvaient être comprises dans le cadre théorique ci-dessus ; cependant, au fur et à mesure que l'on employait des X de plus en plus durs, il apparaissait nettement dans le rayonnement diffusé, outre la diffusion élastique à λ_0 , une autre composante déplacée du côté des *grandes* longueurs d'onde, que Compton se mit à étudier systématiquement (fig 5.7). Par la relation de Planck - Einstein, ceci veut dire que le rayonnement "s'use" à la traversée de la matière et perd un peu de son énergie (mais le photon ne ralentit pas). Ce phénomène n'a pas d'interprétation en théorie classique.

5.3.2 Les expériences de Compton et leur interprétation (1921-1923)

Compton reprit les expériences de Barkla avec la raie K_α du Molybdène ($\lambda_0 \simeq 0.7 \text{ \AA}$), envoyée sur une cible de graphite³⁰. Les observations de Compton peuvent [25] se résumer comme suit :

1. À condition d'utiliser des rayons X assez durs, une composante diffusée à la longueur d'onde $\lambda > \lambda_0$ est nettement visible.

²⁷Dans l'effet Compton, on parle de diffusion *inélastique*. Cette qualification se réfère à ce qui se passe pour le photon : élastique quand il ne change pas de fréquence, inélastique dans le cas contraire.

²⁸ $r_e = e'^2/(mc^2) \simeq 3 \times 10^{-15} \text{ m}$.

²⁹Pour un seul électron, l'intensité diffusée est proportionnelle [12] à e^4 , qui est bien inclus dans r_e^2 . Bien évidemment, la fréquence propre de l'atome dépend aussi de Z , mais cet aspect est ici non-pertinent puisque l'on se place dans la limite de Thomson (hautes fréquences).

³⁰Le graphite est une forme de carbone cristallisé, caractérisée par une structure lamellaire dont les plans contiennent une disposition hexagonale régulière d'atomes de carbone. Il s'agit donc d'une cible formée d'un élément léger ($A = 12$, essentiellement).

2. L'écart $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ dépend de l'angle de diffusion θ par rapport à la direction incidente. La variation observée expérimentalement est :

$$\Delta\lambda \propto \sin^2(\theta/2) . \quad (5.26)$$

3. Faits majeurs, pour un angle de diffusion donné, le décalage $\Delta\lambda$ ne dépend pas de λ_0 et est *indépendant* de l'élément chimique constituant la cible³¹. Ceci fait irrésistiblement penser au fait que la constante de proportionnalité dans (5.26) est seulement fonction de constantes fondamentales. Si ceci est vrai, le processus implique d'une part le rayonnement et une particule fondamentale à l'état brut, indépendamment de la nature de son engagement au sein de la matière.
4. Pour un angle de diffusion donné, le rapport des intensités des deux raies (élastique à λ_0 et inélastique à λ) dépend au contraire fortement du numéro atomique des éléments de la cible ; le rapport $I_{\text{inélastique}}/I_{\text{élastique}}$ diminue quand Z augmente [19] (pour les grands Z , l'observation du pic Compton inélastique est plus difficile).

Compton proposa de décrire ces phénomènes comme résultant d'une collision, élastique au sens strict³², entre deux particules constituant un système isolé : un photon et un électron *libre*³³. Son calcul (voir ci-dessous) rend compte parfaitement des expériences. En hommage, l'effet en question s'appelle l'effet Compton et valut à A. H. Compton l'attribution du Nobel en 1927.

Avant de démarrer le calcul il est utile de préciser les ordres de grandeur d'énergie et de donner l'idée principale. Par la relation de Planck - Einstein, l'énergie d'un photon de 0.7 \AA est de l'ordre de 20 keV, ce qui est gigantesque³⁴ par rapport à toutes les énergies pertinentes pour les électrons d'un élément léger (quelques eV). Il en résulte que quand un tel photon voit un tel électron, tout se passe à peu près comme si ce dernier était *libre*.

Ceci étant admis, on voit qu'il ne peut y avoir que *diffusion* du photon, (l'absorption est impossible, un électron libre ne peut ni absorber ni émettre un photon). Le photon est présent avant *et* après la collision, et d'ailleurs il y a bien de la lumière diffusée. Alors, forcément, le photon va céder un peu d'énergie à l'électron mis en jeu³⁵ : le photon diffusé a une énergie plus petite, donc une longueur d'onde plus grande ($\lambda > \lambda_0$), ce qui est qualitativement conforme à ce que l'on observe. En définitive, la réaction Compton élémentaire est, schématiquement :

$$\text{photon } (\vec{k}_0, \nu_0) + \text{électron immobile} \rightarrow \text{photon } (\vec{k}, \nu) + \text{électron de vitesse } \vec{v} , \quad (5.27)$$

avec $\nu < \nu_0$.

Compte tenu des énergies mises en jeu, il est préférable de faire d'emblée un calcul relativiste – qui est d'ailleurs plus élégant que le calcul faiblement relativiste. Pour l'électron, m désignant toujours sa masse propre, l'énergie et l'impulsion sont :

$$E_e = \gamma mc^2 , \quad \vec{p}_e = \gamma m\vec{v} \quad \left(\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} , \quad \beta = v/c \right) . \quad (5.28)$$

Pour le photon, c'est la relation (5.14) qu'il faut prendre :

$$E_{\text{ph}} = h\nu = \hbar\omega = pc , \quad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k . \quad (5.29)$$

³¹Selon Compton, cité par Jammer [4], p. 160 :

“... in addition to scattered radiation there appeared in the secondary rays a type of fluorescent radiation, whose wavelength was nearly independent of the substance used as radiator, depending only upon [...] the angle at which the secondary rays are examined.”

³²La collision est élastique au sens défini dans le ch. 3 : l'énergie cinétique des deux particules est conservée puisque c'est, ici, la seule forme d'énergie disponible (la conservation de l'énergie, vraie en toutes circonstances, s'exprime ici comme la conservation de l'énergie cinétique totale).

³³Au contraire de l'effet photoélectrique, où le fait que l'électron soit lié est essentiel. Un électron non-lié ne peut ni émettre, ni absorber de photon.

³⁴Pour un élément lourd, les transitions atomiques impliquant des couches profondes (c'est-à-dire des électrons enfouis dans l'atome et donc près du noyau) sont très énergétiques, de l'ordre de la dizaine de keV ou plus : ce sont précisément ces transitions qui constituent le spectre X de l'élément en question. Les énergies de Bohr sont proportionnelles à Z^2 et croissent donc vite (en valeur absolue) quand Z augmente.

³⁵Le photon “rougit” un peu.

Il est maintenant possible d'écrire les équations de conservation spécifiques d'une collision élastique entre deux particules dûment caractérisées. En supposant l'électron initialement immobile³⁶, la conservation de l'énergie (Avant = Après) s'écrit :

$$h\nu_0 + mc^2 = h\nu + \gamma mc^2 . \quad (5.30)$$

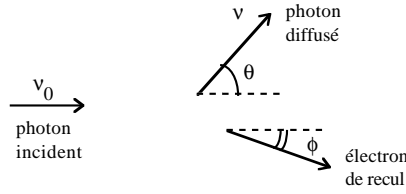


Figure 5.8: Événement Compton élémentaire.

Pour écrire explicitement la conservation de l'impulsion – qui est un vecteur – il convient de définir des axes, la direction du rayonnement incident étant la référence naturelle pour les angles. Le photon est dévié d'un angle θ , cependant que, nécessairement, l'électron part suivant une direction faisant un angle fini ϕ avec la direction d'incidence. Avec ces notations, la conservation de l'impulsion suivant cette dernière direction est :

$$\frac{h\nu_0}{c} + 0 = \frac{h\nu}{c} \cos \theta + \gamma m v \cos \phi , \quad (5.31)$$

où v désigne le module de la vitesse de l'électron après collision. Si tous les angles sont comptés positivement, la conservation de l'impulsion suivant l'axe perpendiculaire est :

$$0 + 0 = \frac{h\nu}{c} \sin \theta - \gamma m v \sin \phi . \quad (5.32)$$

Il suffit maintenant de trouver la relation entre $\nu - \nu_0$ et θ pour retrouver la loi empirique de Compton (5.26) ; le calcul procède comme suit.

En isolant ϕ dans (5.31) et (5.32) et en élevant membre à membre au carré, on obtient :

$$\left(\frac{h}{c}\right)^2 [(\nu_0 - \nu \cos \theta)^2 + \nu^2 \sin^2 \theta] = (\gamma m v)^2 = (\gamma^2 - 1)m^2 c^2 . \quad (5.33)$$

Cette équation permet d'exprimer γ en fonction de θ ; en posant :

$$\varepsilon = \frac{h\nu_0}{mc^2} , \quad x = \frac{\nu}{\nu_0} , \quad (5.34)$$

les équations (5.30) et (5.33) se récrivent :

$$\gamma = \varepsilon(1 - x) + 1 , \quad \gamma^2 - 1 = \varepsilon^2(1 - 2x \cos \theta + x^2) . \quad (5.35)$$

Après élimination de γ , la résolution en x donne finalement $x = [1 + 2\varepsilon \sin^2(\theta/2)]^{-1}$, soit :

$$\nu = \frac{\nu_0}{1 + 2\varepsilon \sin^2(\theta/2)} < \nu_0 . \quad (5.36)$$

On trouve bien que le photon diffusé a une fréquence (donc une énergie) plus petite. Pour que l'effet soit bien visible, il faut que ε ne soit pas trop petit devant 1 ; comme $mc^2 \simeq 511$ keV, il faut bien employer des rayons X assez durs. En termes de longueur d'onde, (5.36) donne immédiatement :

$$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0 = 2 \frac{h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} . \quad (5.37)$$

³⁶Il s'agit clairement d'une approximation, mais elle est cohérente avec l'hypothèse d'un électron libre, énergie de liaison et énergie cinétique étant du même ordre de grandeur.

Cette expression du décalage rend compte de tous les faits expérimentaux, à commencer par (5.26). Par ailleurs, on comprend bien que le décalage est d'autant plus grand que l'angle de diffusion est élevé : un grand angle correspond à un grand transfert d'énergie et d'impulsion du photon vers l'électron. En outre le préfacteur dans (5.37) est bien une combinaison de constantes fondamentales, et de rien d'autre : c'est la longueur la plus simple que l'on peut former avec la constante de Planck, la masse de l'électron et la vitesse de la lumière ; on appelle longueur d'onde Compton de l'électron³⁷ la quantité suivante :

$$\lambda_{\text{Ce}} = \frac{h}{mc} = 2.426\,310\,215 \times 10^{-12} \text{ m} \simeq 0.024 \text{ \AA} . \quad (5.38)$$

Par ailleurs, $\Delta\lambda$ ne dépend pas de λ_0 et, globalement, la diffusion Compton implique bien un mécanisme universel où intervient un constituant élémentaire de la matière, l'électron, indépendamment de son engagement chimique³⁸. Selon (5.37), $\Delta\lambda$ est toujours petit, borné³⁹ par $\simeq 0.05 \text{ \AA}$. Enfin, on comprend qualitativement pourquoi le rapport $I_{\text{inélastique}}/I_{\text{élastique}}$ diminue quand Z augmente : ce sont les électrons "libres" qui donnent l'effet Compton – plus précisément ceux qui, à l'aune de quelques dizaines d'eV, peuvent être considérés comme tels – schématiquement, ce sont essentiellement les électrons périphériques (ceux qui participent aux liaisons chimiques). Relativement au nombre total d'électrons, la fraction de ces électrons est d'autant plus faible que l'élément est lourd, de sorte que la décroissance avec Z du rapport des intensités provient du fait que les électrons susceptibles de produire l'effet Compton au sens strict défini ici sont en proportion de plus en plus petite quand Z croît.

Ces résultats théoriques, en parfaite conformité avec l'expérience, valident l'interprétation de Compton. Ils permettent d'aller plus loin et d'achever la description de la collision, notamment en examinant de plus près ce que fait l'électron mis en mouvement (appelé électron de recul Compton). Notamment, l'angle de départ de celui-ci s'obtient facilement à partir de (5.31), (5.32) et compte tenu de (5.36) ; on trouve :

$$\tan \phi = \frac{1}{1 + \varepsilon} \cot \frac{\theta}{2} . \quad (5.39)$$

Pour la diffusion maximale ($\theta = \pi$, le photon fait demi-tour), ϕ est nul, ce qui est évident. Pour $\theta = 0$, (5.39) donne $\phi = \pi/2$, ce qui semble violer la conservation de l'impulsion perpendiculairement à la direction d'incidence. En fait, il n'en est rien : (5.37) montre que dans ce cas $\Delta\lambda = 0$, donc il n'y a pas de transfert d'énergie et, finalement, pas d'événement Compton : le photon passe tout droit, l'électron reste en place, chacun ignorant l'autre. Enfin, l'énergie cinétique de l'électron après collision est égale à $h(\nu_0 - \nu)$, soit :

$$E_{\text{cin, e}} = h\nu_0 \frac{2\varepsilon \sin^2(\theta/2)}{1 + 2\varepsilon \sin^2(\theta/2)} \leq h\nu_0 \frac{2\varepsilon}{1 + 2\varepsilon} \equiv E_{\text{cin, max}} . \quad (5.40)$$

Remarques

1. La description précise des deux effets présentés, effet photoélectrique et effet Compton, relève bien évidemment de la Mécanique Quantique qui permet de calculer notamment les sections efficaces correspondantes, lesquelles reflètent la *probabilité* que ces effets se produisent. Au total, quand on envoie une lumière très dure ($h\nu_0 \sim 100 \text{ keV}$) sur un élément léger, on observe les deux phénomènes *à la fois* ; l'analyse en énergie des électrons émis par la cible irradiée produit un spectre ayant l'allure schématisée sur la figure 5.9. Le pic étroit à droite provient des électrons émis par effet photoélectrique ; en négligeant l'énergie de liaison de ces derniers, la position en énergie de ce pic est à peu près égale à $h\nu_0$. La bande continue, à gauche, représente les électrons de recul Compton, dont l'énergie cinétique varie continûment de 0 à $E_{\text{cin, max}}$ (voir (5.40)).
2. Dans un tout autre domaine, l'hypothèse de Planck a également connu un succès spectaculaire. En effet, en 1906, Einstein a montré que la décroissance rapide de la capacité calorifique des solides, observée à basse température et incompréhensible classiquement, pouvait s'expliquer à l'aide d'un modèle simple où les seuls

³⁷ On peut aussi définir une longueur d'onde Compton pour d'autres particules, le proton par exemple. Elle est encore plus petite.

³⁸ Ceci n'est pas vrai en toute rigueur, mais correspond à la situation usuelle où l'énergie du photon X est si grande que celle de l'électron peut être oubliée. Lorsque tel n'est pas le cas, la vitesse initiale de l'électron intervient dans des corrections. De fait, l'analyse fine des spectres Compton permet d'obtenir des informations sur la (distribution de) vitesse électronique, laquelle dépend de l'engagement chimique de tel ou tel atome ou molécule. En définitive, l'analyse très détaillée de la diffusion Compton permet ainsi d'obtenir des informations sur la liaison chimique.

³⁹ Comme $\Delta\lambda_0 \lesssim 0.05/\lambda_0 \text{ \AA}$, il faut bien utiliser un rayonnement assez dur pour pouvoir séparer le pic Compton du pic élastique.

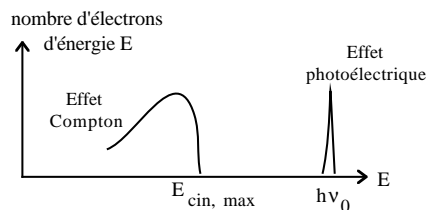


Figure 5.9: Spectre des électrons émis par une cible d'élément léger irradiée par un faisceau X très dur.

degrés de liberté susceptibles de contribuer à la capacité calorifique sont les vibrations du réseau solide⁴⁰, représentées par des oscillateurs harmoniques de fréquence ν déterminée (solide harmonique d'Einstein). Un calcul simple, utilisant à nouveau l'hypothèse de Planck $E_{\text{osc}} = nh\nu$ donne alors pour l'énergie de vibration (pour un solide contenant N atomes en vibration) :

$$E_{\text{vibr}} = \frac{3N h \nu}{e^{\beta h \nu} - 1} . \quad (5.41)$$

Par dérivation en température, on en déduit :

$$C_V = 3N \frac{(h\nu/k_B T)^2 e^{h\nu/k_B T}}{[e^{h\nu/k_B T} - 1]^2} . \quad (5.42)$$

À très basse température ($k_B T \ll h\nu$), on a à peu près :

$$C_V \simeq 3N (h\nu/k_B T)^2 e^{-h\nu/k_B T} \quad (k_B T \ll h\nu) . \quad (5.43)$$

La capacité calorifique tend donc vers zéro exponentiellement⁴¹ vite, au lieu de tendre vers la constante $3N k_B$ prévue par la loi classique de Dulong et Petit. Cette propriété se comprend facilement : à partir du moment où il faut un *quantum* $h\nu$ fini pour exciter les oscillateurs d'Einstein, seules les fluctuations thermiques $k_B T \geq h\nu$ sont susceptibles de le faire, et leur probabilité tend exponentiellement vite vers zéro à basse température ; il en résulte que la chaleur spécifique s'effondre. À l'inverse, comme toujours, on retrouve le comportement classique à haute température, en la circonstance la loi de Dulong - Petit :

$$C_V \simeq 3N k_B \quad (k_B T \gg h\nu) . \quad (5.44)$$

⁴⁰En réalité, la situation est plus compliquée : dans un métal, par exemple, le gaz de Fermi (évoqué ci-dessus à propos de l'effet photoélectrique) contribue lui aussi à C_V et donne un terme proportionnel à T .

⁴¹Même pour un isolant, le comportement de C_V ne suit pas la loi (5.43). En fait, le modèle d'Einstein vaut pour un certain type de vibrations (*phonons optiques*) et ignore les vibrations dont l'énergie s'annule quand le vecteur d'onde s'annule (*phonons acoustiques*). Ces vibrations donnent $C_V \propto T^3$.

Divertissement [24]

Mass of photons

Q: Do photons have mass? If not, why does the gravitational field of a star bend passing light?

A: No, photons do not have mass according the present definition of mass. The modern definition assigns every object just one mass, an invariant quantity that does not depend on velocity, says Dr. Matt Austern a computer scientist at AT&T Labs Research. Under this definition, mass is proportional to the total energy, E_0 , of the object at rest.

“A particle like a photon is never at rest and always moves at the speed of light; thus it is massless,” says Dr. Michael S. Turner, chair of the Department of Astrophysics at the University of Chicago.

What about experimental evidence? Experiments don't determine exact quantities because of small errors inherent in making measurements. We have, however, put an upper limit on the photon rest mass. In 1994, the Charge Composition Explorer spacecraft measured the Earth's magnetic field and physicists used this data to define an upper limit of 0.000 000 000 000 000 6 eV for the mass of photons, with a high certainty in the results.

This number is close to zero; it is equivalent to 0.000 000 000 000 000 000 000 39 times the mass of an electron (the lightest particle), says Turner.

*You ask how a star's gravitational field can bend the path of a massless photon. This takes us into the realm of Einstein's general theory of relativity. The mass of the photon isn't attracted to the star's mass under Einstein's theory. Rather, the star's mass distorts space and the photon's path changes because the space is curved, says Paul Hewitt in his book *Conceptual Physics*.*

General relativity uses a geometry that is extremely difficult for we humans who live in three-dimensional space to visualize. This geometry describes not only a curved space but also a curved time. It's a geometry of curved four-dimensional space-time. Gravity is nothing but the bumps, depressions, and warpings of geometrical space-time.

Chapitre 6

Structure atomique, raies spectrales, théorie de Bohr

6.1 Spectre de raies

L'expérience montre que les atomes émettent un spectre de *raies* (par exemple, Balmer, 1885) : l'intensité émise n'est pas continûment répartie en fréquence (ou en longueur d'onde), mais n'apparaît que pour des fréquences déterminées, bien séparées les unes des autres, à la manière d'un peigne de Dirac – aux dents non-équidistantes (voir figure 6.1). En réalité, l'analyse avec une bonne résolution montre que chaque raie n'est pas infiniment fine, possède une certaine largeur et de ce fait évoque plutôt une *résonance*. Un atome donné possède un ensemble de raies caractéristiques (spectre), qui constitue son empreinte digitale ; cette spécificité permet de détecter à distance la présence d'un atome¹ par des méthodes purement spectroscopiques et non destructrices.

L'interprétation classique d'une résonance atomique peut être donnée par le modèle de Thomson : l'électron, mis en oscillation forcée par une excitation extérieure, acquiert un mouvement de très grande amplitude lorsque la fréquence ν de la perturbation externe devient très voisine de la fréquence propre ν_0 d'oscillation harmonique prévue par ce modèle. Dans le modèle de Perrin, on attend plutôt un spectre *continu*, puisque l'électron peut se trouver à n'importe quelle distance r_0 du noyau et que la fréquence propre de rotation varie comme $r_0^{-3/2}$ (3^{ème} loi de Kepler transposée au modèle planétaire). Aucun de ces modèles ne rend donc compte de l'observation élémentaire. C'est Bohr (1913) qui jettera les bases de la première explication théorique quantitative des spectres atomiques.

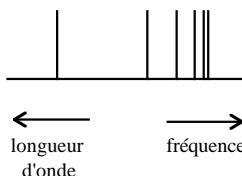


Figure 6.1: Représentation schématique d'une série spectroscopique.

6.1.1 Élargissement des raies spectrales

Soit une raie donnée, centrée sur la fréquence ν_0 , dont l'examen attentif avec un appareil à bonne résolution montre qu'elle possède en réalité une largeur $\delta\nu$, toutefois très petite devant ν_0 – sans quoi cela n'aurait pas grand sens de privilégier la fréquence ν_0 .

¹Dans un tube scellé contenant une source α apparaît la lumière caractéristique de l'hélium, dans les atmosphères d'étoiles on "voit" l'hydrogène, etc.

Cette largeur peut avoir plusieurs origines. La première peut être comprise par analogie avec un oscillateur mécanique freiné, un pendule simple oscillant dans l'air par exemple, de fréquence propre $\omega_0 = \sqrt{g/l}$. Le mouvement du pendule finit par s'arrêter, en raison de la dissipation graduelle d'énergie par frottement dans le milieu ambiant. Dans le cas le plus simple (faibles oscillations, frottement fluide proportionnel à la "vitesse" $\dot{\theta}$), l'équation dynamique est :

$$\ddot{\theta} + \gamma \dot{\theta} + \omega_0^2 \theta = 0 . \quad (6.1)$$

Il en résulte que l'angle du pendule suit un régime sous-amorti², du genre :

$$\theta(t) = \theta(0) e^{-\gamma t} \cos \omega_0 t \quad (t > 0) , \quad (6.2)$$

avec $\gamma \ll \omega_0$ quand le frottement est faible (régime dit sous-amorti). γ^{-1} a la dimension d'un temps et mesure l'intervalle de temps au bout duquel le mouvement s'est notablement atténué. L'énergie mécanique moyennée sur la quasi-période $2\pi/\omega_0 \ll \gamma^{-1}$ varie comme :

$$\bar{E}(t) = E_0 e^{-2\gamma t} , \quad (6.3)$$

On peut dire que γ^{-1} est la *durée de vie* du mouvement pendulaire : au bout de ce temps, l'amplitude des oscillations est devenue très petite, et l'énergie mécanique initiale a pratiquement totalement disparu, dissipée dans le milieu source du frottement. La transformée de Fourier a l'allure d'une courbe en cloche très pointue (résonance à la fréquence propre ω_0), dont la largeur typique en fréquence $\delta\nu$ est justement γ :

$$\delta\nu \sim \gamma . \quad (6.4)$$

Notant plus naturellement τ la durée de vie, il vient :

$$\delta\nu \sim \tau^{-1} \iff \tau \delta\nu \sim 1 . \quad (6.5)$$

La deuxième écriture exprime la relation tout à fait générale entre largeur spectrale et durée de vie³.

De la même façon, un électron lié mais amorti, donnera lieu à une résonance dont la largeur sera simplement l'inverse de la durée de vie du mouvement de l'électron dans l'atome. Dans la vision classique, cette largeur est celle de la résonance observée dans la section efficace de diffusion de la lumière, et c'est aussi la durée de vie de l'atome classique ($\sim 10^{-8}$ s). Pour des raisons qui seront plus claires par la suite⁴, la largeur liée à cet amortissement (perte d'énergie) est appelée *largeur naturelle* ; c'est une donnée de la dynamique interne de l'atome et constitue une largeur intrinsèque irréductible. Quand on ne prend pas de précautions particulières, cette largeur est le plus souvent largement masquée par d'autres effets responsables d'élargissements bien supérieurs ; pour réduire ces derniers, il faut recourir à des techniques élaborées (ultravide, très basses températures). L'accès expérimental à la largeur naturelle est un enjeu important : sa mesure permet de vérifier notamment que l'Électrodynamique quantique est une théorie d'une fabuleuse précision. Une durée de vie⁵ de 10^{-8} seconde produit, d'après (6.5), une largeur naturelle égale à 100 MHz.

Une autre cause d'élargissement est l'effet Doppler, qui produit une largeur spectrale notée $\Delta\nu_D$ pour la distinguer. Au plus bas ordre en $v/c \ll 1$, pour une seule source monochromatique de fréquence ν_0 , l'écart Doppler est donné par⁶ :

$$\delta\nu_D \equiv \nu - \nu_0 = \nu_0 \frac{v}{c} \cos \theta , \quad (6.6)$$

²En l'absence de frottement, $\gamma = 0$ et le mouvement, une fois lancé, ne cesse jamais. L'atome de Thomson (électron élastiquement lié) nanti de l'interaction de freinage de rayonnement est un exemple de mouvement très sous-amorti : $\omega_0 \sim 10^{16}$ rad.s⁻¹ et $\tau \sim r_0/c \sim 10^{-23}$ s, de sorte que $\omega_0 \tau \ll 1$.

³C'est la relation caractéristique reliant les largeurs d'un couple de Fourier.

⁴L'énergie de l'atome est quantifiée. Dans le scénario le plus simple, l'atome émet de la lumière (photons) en passant d'un niveau excité instable au niveau le plus bas en énergie (fondamental) ; la largeur naturelle $\delta\nu$ de la raie correspondante donne la durée de vie τ de l'état excité, suivant la relation (6.5).

⁵La durée de vie d'un état excité atomique varie dans de grandes proportions : pour une fluorescence rapide, elle peut être de l'ordre de 10^{-12} seconde ; à l'opposé, il existe des états métastables de durée extraordinairement longue, la seconde par exemple. La retombée de l'atome est d'autant plus rapide que la transition correspondante a une probabilité élevée.

⁶ $\delta\nu_D$ est positif (resp. négatif) si la source s'approche (resp. s'éloigne) de l'observateur. L'habitude historique – datant de l'époque où les observations se faisaient dans le domaine optique – est de parler de décalage vers le bleu (resp. vers le rouge) ; dans tout autre domaine spectral, l'expression n'a *stricto sensu* aucun sens et signifie simplement décalage vers les hautes (resp. basses) fréquences.

quand le vecteur vitesse \vec{v} de la source fait l'angle θ avec la direction d'observation.

Considérons une vapeur atomique confinée dans un ballon et observons la lumière émise suivant une direction donnée, Ox pour fixer les idées. La vapeur est à une certaine température T , de sorte que les atomes en proie à l'agitation thermique ont une vitesse distribuée suivant la loi de Maxwell, réplique du facteur de Boltzmann habituel $e^{-\beta E}$. Il en résulte que la fréquence *observée* ne coïncide pas avec la fréquence *propre* ν_0 de l'atome, mais sera légèrement décalée selon la vitesse de ce dernier. La composante v_x de la vitesse, le long de la direction d'observation, est répartie suivant $C \exp[-\beta \times (Mv_x^2/2)]$, M étant la masse d'un atome. En éliminant $v_x (= v \cos \theta)$ entre la répartition de Maxwell et (6.6), on en déduit que l'intensité I observée est distribuée en fréquence suivant :

$$I(\nu) = I(\nu_0) e^{-\beta M c^2 \frac{(\nu - \nu_0)^2}{2\nu_0^2}} \equiv I(\nu_0) e^{-\frac{(\nu - \nu_0)^2}{2\Delta\nu_D^2}}. \quad (6.7)$$

L'intensité a donc un profil gaussien⁷ en fréquence, dont la largeur $\Delta\nu_D$ est donnée par :

$$\Delta\nu_D = \nu_0 \sqrt{\frac{k_B T}{M c^2}}. \quad (6.8)$$

Bien sûr, le rapport $k_B T / M c^2$ est toujours très petit : à la température ordinaire, $k_B T \simeq 25$ meV, cependant que $M c^2$, ne serait-ce que pour l'hydrogène, est déjà de l'ordre du GeV. Cependant, d'une part ce rapport intervient par sa racine carrée, d'autre part les mesures spectroscopiques sont d'une extraordinaire précision. Au total, l'effet est facilement observable. Un exemple : le sodium possède une raie jaune caractéristique⁸ à environ 6000 Å (5893 précisément⁹) soit $\nu_0 \simeq 5 \times 10^{14}$ Hz. À l'ambiante, le rapport $\sqrt{k_B T / (M c^2)}$ vaut à peu près 10^{-6} ; d'après (6.8), la largeur Doppler est donc $\Delta\nu_D \simeq 500$ MHz. Elle est supérieure à une largeur naturelle typique : si l'on veut observer cette dernière, il faut donc refroidir le ballon afin d'opérer à basse température. Toutefois, compte tenu de la dépendance en $T^{1/2}$, il faut refroidir beaucoup¹⁰ pour un gain modéré (un facteur 100 sur la température ne donne qu'un facteur 10 sur $\Delta\nu_D$). L'existence de l'effet Doppler n'est pas forcément un inconvénient : la mesure de la largeur Doppler donne accès à la vitesse (thermique) des atomes – donc à la température de la vapeur – et aussi à la vitesse de récession des galaxies !

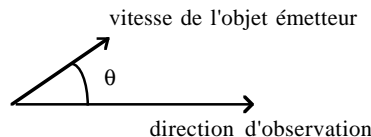


Figure 6.2: Effet Doppler.

Il existe bien d'autres causes d'élargissement d'une raie spectrale. Par exemple, une impureté dissoute en phase condensée interagit faiblement avec son environnement. Dans un solide non parfait, d'une impureté à l'autre, le champ cristallin varie légèrement, de sorte que les différentes impuretés émettront à des fréquences voisines. En pareil cas, on parle alors d'ailleurs d'élargissement *inhomogène*.

6.1.2 Formule de Balmer et généralisation de Ritz

L'étude de la luminescence des atomes peut se faire en enfermant la vapeur dans un tube à décharge¹¹. La lumière émise constitue un spectre de raies. Lors d'une étude quantitative du spectre de l'hydrogène atomique,

⁷À l'œil, on distingue facilement une gaussienne d'une lorentzienne ; la gaussienne est très "ronde" (elle a les épaules larges et n'a pas de queues) ; la lorentzienne est plutôt "triangulaire" et décroît lentement.

⁸On utilise couramment des lampes au sodium pour l'éclairage urbain, autoroutier, etc.

⁹Encore plus précisément : il s'agit d'un doublet de deux raies très voisines.

¹⁰D'où l'attrait des jets atomiques ultra-froids. On peut aussi utiliser des jets atomiques polarisés de vitesse moyenne élevée, telle que l'élargissement Doppler thermique soit très petit par rapport à la vitesse du jet. Ceci peut se faire de diverses façons (four à température élevée suivi d'un *chopper*) mais il faut se souvenir qu'accélérer des atomes n'est pas en général très facile (l'atome est neutre !).

¹¹Schématiquement : le champ électrique imposé à la vapeur provoque des ionisations d'atomes. Les électrons ainsi libérés sont accélérés et bombardent violemment d'autres atomes, portant ces derniers dans un état d'énergie élevé (état excité). Le retour, tôt ou tard, dans un état d'énergie inférieure suppose une évacuation d'énergie vers l'extérieur, qui se fait ici sous forme de lumière.

Balmer montra (1885) que les positions des raies – constituant ce que l’on appelle la série de Balmer, tout entière située dans le visible – obéissait à une formule un peu magique où intervenaient des nombres *entiers*. Plus précisément, les longueurs d’onde λ des raies caractéristiques de l’hydrogène sont données par :

$$\frac{1}{\lambda} = \text{Ry} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{p^2} \right) \quad (p = 3, 4, \dots) \quad (\text{Formule de Balmer}) . \quad (6.9)$$

Dans cette loi empirique, Ry désigne une constante (constante de Rydberg) ; lorsque λ est exprimée en cm, on a $10^{12} \text{ Ry} \simeq 109677 \text{ cm}^{-1}$.

L’accumulation d’observations sur d’autres atomes (l’hydrogène est le plus simple de tous) permit à Ritz (1908) de généraliser la formule de Balmer en *posant* que les longueurs d’onde de luminescence de tout atome sont forcément données par la différence de deux quantités T_n appelées termes spectraux. Ainsi, suivant Ritz, la longueur d’onde de toute raie est telle que :

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = T_n - T_p \quad (\text{Règle de Ritz}) . \quad (6.10)$$

Revenant à l’hydrogène, ceci veut dire que le terme spectral général est dans ce cas :

$$T_n = \text{Ry} \frac{1}{n^2} . \quad (6.11)$$

Si on accepte ceci, en prenant (6.10) et (6.11) avec $n = 2$ on retombe sur la formule de Balmer (6.9). En prenant $n = 1$, on obtient une autre série, qui est tout entière dans l’UV (série de Lyman), qui est effectivement observée quand on regarde dans ce domaine spectral. En prenant successivement $n = 3, 4, 5 \dots$ on obtient respectivement les séries de Paschen, Brackett, Pfund, ... du nom de leur découvreur.

6.2 Le modèle de Bohr (1913)

6.2.1 Difficultés du modèle planétaire et proposition de Bohr

Le modèle planétaire contient deux types de difficultés :

- L’électron “gravite” autour du noyau de charge $Z|e|$ grâce au champ de force électrostatique en $1/r^2$. Compte tenu de $mv^2/R = e'^2/R^2$ et de¹³ $T = 2\pi R/v$, on trouve la “3^{ème} loi de Kepler¹⁴” reliant le rayon de l’orbite à la fréquence de rotation ν :

$$R^3 \nu^2 = C^{\text{ste}} \quad (= \frac{Ze'^2}{4\pi^2 m}) . \quad (6.12)$$

R peut être quelconque, donc ν aussi : ainsi, *toutes* les fréquences sont possibles – ceci ne saurait rendre compte du spectre de raies et de ses fréquences remarquables bien définies¹⁵.

- L’atome n’est pas stable, électrodynamiquement parlant, comme mentionné à plusieurs reprises.

Bohr¹⁶ (1913) proposa de lever ces difficultés en effectuant une synthèse entre la règle empirique de Ritz et le photon d’Einstein. L’atome émet de la lumière, donc l’atome émet des photons, objets essentiellement

¹²pour l’hydrogène. Cette valeur mesurée tient incorpore évidemment la masse *réduite* de l’électron.

¹³dans le cas simple du mouvement circulaire supposé ici, le moment cinétique J vaut simplement mvR . J est constant, donc si v est constant, R l’est tout autant, et réciproquement. Le mouvement circulaire est donc forcément uniforme.

¹⁴Johannes Kepler (1571-1630), astronome allemand. Grâce à une étude systématique de Mars, il parvint à énoncer les trois lois fondamentales donnant la première description quantitative du mouvement des planètes du système solaire. Les deux premières lois datent de 1609 ; la 3^{ème} loi de Kepler, plus tardive (1619), établit plus précisément une relation entre la période de révolution autour du Soleil d’une planète et la longueur du grand axe de la trajectoire (elliptique) de celle-ci. Dans la réalité, les excentricités des ellipses restent petites.

¹⁵Classiquement, c’est la fréquence de révolution de l’électron qui donne la fréquence d’émission.

¹⁶Niels Bohr (1855-1962) reçut le prix Nobel en 1922, juste un an avant la première construction de la Mécanique Quantique (Mécanique des Matrices) par Heisenberg.

indivisibles, donc les différences des énergies des états atomiques ne peuvent pas être n'importe quoi. La retombée de l'atome d'un état d'énergie E_i à un état d'énergie inférieure E_f peut se faire grâce à un mécanisme d'émission de lumière. Si ν est la fréquence de la lumière émise, alors le photon émis possède le *quantum* $h\nu$:

$$\text{Atome dans l'état d'énergie } E_i \rightarrow \text{Atome dans l'état d'énergie } E_f + \text{photon d'énergie } h\nu . \quad (6.13)$$

La conservation de l'énergie s'écrit¹⁷ (Avant émission = Après émission) :

$$E_i = E_f + h\nu \iff E_i - E_f = h\nu \quad (E_i > E_f : \text{émission}) . \quad (6.14)$$

Autrement dit, les énergies de l'atome étant données, les seuls photons récupérables en émission sont ceux dont la fréquence correspond très précisément à une certaine différence d'énergie ΔE entre deux niveaux atomiques :

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} . \quad (6.15)$$

En introduisant la longueur d'onde $\nu = c/\lambda$, (6.14) se récrit :

$$E_i - E_f = hc \frac{1}{\lambda} \quad (6.16)$$

et, en reprenant la règle de Ritz (6.10) pour l'émission :

$$E_i - E_f = hc(T_n - T_p) , \quad p > n, \quad T_n > T_p . \quad (6.17)$$

Ceci permet alors d'identifier énergie et terme spectral, à une constante additive près :

$$E = -hcT + C^{\text{ste}} ; \quad (6.18)$$

les T_p impliquent des nombres entiers : accepter (6.18), c'est donc admettre la *quantification* de l'énergie de l'atome. Avec des notations naturelles, on écrit désormais :

$$E_n = -hcT_n + C^{\text{ste}} ; \quad (6.19)$$

De toute évidence, la règle de Bohr explique d'un coup d'un seul l'existence des spectres de *raies* atomiques. Par ailleurs, sa proposition contient aussi l'affirmation de principe que l'atome ne rayonne que lorsque l'électron saute d'un état à l'autre. *A contrario*, si l'électron est dans un état d'énergie donné, il ne rayonne pas. Il s'agit là d'une affirmation qui, dans un modèle mécanique au sens usuel, reste en contradiction avec l'Électromagnétisme. En définitive, la théorie de Bohr – si elle fait faire un grand pas en avant – ne répond toujours pas aux interrogations fondamentales¹⁸.

6.2.2 Orbites stationnaires de Bohr

Il est facile de voir que si l'énergie est quantifiée, alors le moment cinétique l'est aussi, ainsi que le rayon R de la trajectoire circulaire de l'électron autour du noyau. En effet, l'électron est en équilibre sur sa trajectoire (compensation entre force centrifuge et force de Coulomb) dans l'approximation du noyau infiniment massif :

$$m \frac{v^2}{R} = \frac{e'^2}{R^2} \iff mv^2 = \frac{e'^2}{R} . \quad (6.20)$$

Avec $E_{\text{cin}} = (1/2)mv^2$ et $E_{\text{pot}} = -e'^2/R$, la deuxième relation s'écrit aussi :

$$2E_{\text{cin}} = -E_{\text{pot}} . \quad (6.21)$$

¹⁷À ce stade, on délaisse la petite correction venant du recul de l'atome (le photon a aussi une impulsion). En fait, comme la masse de l'atome n'est pas infiniment grande, la conservation de l'impulsion – qui tient toujours ! – impose à l'atome de reculer. Ceci entraîne que l'énergie du photon émis (par exemple) est légèrement *inférieure* à celle prévue dans l'approximation du noyau infiniment massif.

¹⁸La démarche de Bohr procède en deux temps : résolution des équations mécaniques, puis passage au peigne fin pour n'en retenir qu'un sous-ensemble. Ces deux étapes se retrouveront en Mécanique Quantique, déguisées par le nouveau formalisme. On verra en effet que le point de départ, est le Hamiltonien classique H_{cl} (éventuellement complété “à la main” par des effets spécifiquement quantiques) ; ceci correspond la première étape de Bohr (analyse classique des trajectoires). La seconde réapparaît dans l'usage que l'on fait de ce Hamiltonien, qui devient un opérateur H agissant sur la fonction d'onde. Les prescriptions requises pour cette dernière, elles-mêmes conséquences des postulats physiques de la Mécanique Quantique, conduisent alors spontanément à la quantification (pour les états liés) ; ceci est l'image quantique de la deuxième étape de Bohr (tri).

C'est le théorème du Viriel pour le champ Coulombien dans le cas du mouvement circulaire uniforme¹⁹ ; comme l'énergie totale E est par définition $E = E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}}$, il vient :

$$E = -E_{\text{cin}} = +\frac{1}{2}E_{\text{pot}} . \quad (6.22)$$

Par ailleurs, le moment cinétique est une constante du mouvement :

$$mvR = J . \quad (6.23)$$

D'après (6.20), $mv^2 R = e'^2$, soit $Jv = e'^2$; d'où :

$$E = -E_{\text{cin}} = -\frac{1}{2}m \left(\frac{e'^2}{J} \right)^2 = -\frac{me'^4}{2J^2} . \quad (6.24)$$

Compte tenu de (6.19) et la règle de Ritz (6.10), il résulte de (6.24) que le moment cinétique J est lui aussi quantifié, n'prenant que des valeurs discrètes J_n . Très précisément :

$$E_n - E_p = \frac{hc}{\lambda_{np}} = \text{Ry}hc \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right) \iff \frac{me'^4}{2} \left(\frac{1}{J_p^2} - \frac{1}{J_n^2} \right) = \text{Ry}hc \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right) , \quad (6.25)$$

soit :

$$J_n = n e'^2 \sqrt{\frac{m}{2\text{Ry}hc}} , \quad (6.26)$$

J est homogène à une action, tout comme h . Si on insère dans le second membre de (6.26) la valeur mesurée pour la constante de Rydberg, on trouve que ce second membre vaut à peu près $\simeq 0.16 h$. Le facteur n'est pas loin de $(2\pi)^{-1}$ – s'agissant d'un mouvement circulaire, π traîne forcément quelque part – ce qui suggère finalement d'admettre :

$$J_n = n \frac{h}{2\pi} \equiv n \hbar , \quad (6.27)$$

L'équation (6.27) exprime la quantification du moment cinétique qui, une fois admise, donne l'expression (voir (6.24)) de l'énergie E_n de l'état de Bohr associé à l'entier n :

$$E_n = -\frac{me'^4}{2n^2\hbar^2} . \quad (6.28)$$

Dans l'autre sens, les relations (6.26) et (6.27) permettent d'obtenir l'expression théorique de la constante de Rydberg, pour le noyau infiniment massif :

$$\text{Ry}_\infty = \frac{me'^4}{4\pi\hbar^3c} \equiv \frac{\alpha^2}{2} \frac{mc^2}{\hbar c} , \quad (6.29)$$

où a été introduite la constante de structure fine α [21] :

$$\alpha = \frac{e'^2}{\hbar c} = 7.297\,352\,533\dots \times 10^{-3} = \frac{1}{137.035\,999\,76\dots} \simeq \frac{1}{137} . \quad (6.30)$$

α est sans dimension (c'est un nombre pur) et est la constante fondamentale de la physique atomique (et de l'Électrodynamique quantique). Elle permet de récrire l'expression (6.28) de l'énergie E_n sous la forme souvent utile :

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2 . \quad (6.31)$$

La quantification de E et J entraîne celle de R et v , que l'on affecte de l'indice n . Avec (6.27) et (6.23), il vient :

$$mv_n R_n = n\hbar \iff 2\pi R_n = n \frac{h}{mv_n} . \quad (6.32)$$

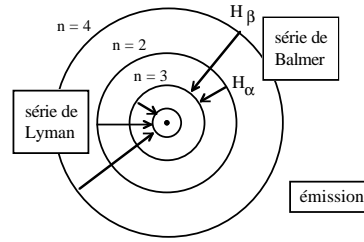


Figure 6.3: Représentation schématique des transitions atomiques selon Bohr.

Le premier membre est le périmètre du cercle, le second membre est un multiple entier d'une certaine longueur ; (6.32) exprime finalement la stabilité affirmée des orbites de Bohr. Au total, ceci évoque une condition de stationarité, un peu comme pour une corde vibrante²⁰.

La valeur du rayon de la $n^{\text{ème}}$ orbite, R_n , s'obtient en utilisant $E = (1/2)E_{\text{pot}}$:

$$-\frac{me'^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{R_n} \iff R_n = n^2 \frac{\hbar^2}{me'^2} . \quad (6.33)$$

Ceci met en évidence une longueur fondamentale a_0 :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me'^2} \simeq 0.53 \text{ \AA} , \quad (6.34)$$

appelée *rayon de la 1^{ère} orbite de Bohr* – alors $R_n = n^2 a_0$.

Le modèle de Bohr rend compte par construction de toutes les séries spectroscopiques de l'hydrogène. La série de Lyman est constituée de toutes les transitions²¹ partant de l'orbite $n \geq 2$ et arrivant sur l'orbite $n = 1$. La série de Balmer correspond de même aux transitions $n \geq 3 \rightarrow n = 2$. Les points de départ des séries de Paschen, Brackett, Pfund, ... sont respectivement $n = 3, 4, 5 \dots$. Il est facile de trouver les longueurs d'onde extrêmes de chacune des séries :

- Lyman : 912 \AA \leftrightarrow 1216 \AA
- Balmer : 3650 \AA \leftrightarrow 6565 \AA
- Paschen : 0.82 \mu m \leftrightarrow 1.88 \mu m
- Brackett : 1.46 \mu m \leftrightarrow 4.05 \mu m
- Pfund : 2.28 \mu m \leftrightarrow 7.46 \mu m

Ce modèle peut d'ailleurs être raffiné. Par exemple, la valeur assez précise de la constante Ry déduite de (6.29) (avec la masse de l'électron, soit dans l'approximation du noyau infiniment massif) est²² $\text{Ry} = 109\,737.3 \text{ cm}^{-1}$ alors que Balmer trouva $\text{Ry}_{\text{exp}} = 109\,677.6 \text{ cm}^{-1}$. Cet écart n'était pas propre à l'hydrogène : le même modèle appliqué à un ion hydrogénoïde²³ (on remplace partout e'^2 par Ze'^2) produit la même anomalie qualitative, d'autant plus faible que l'atome considéré est plus lourd. Elle provient en fait de l'approximation supposant le noyau infiniment massif, dont on peut s'affranchir en substituant la masse réduite μ à la masse

¹⁹où il n'est pas nécessaire de prendre les moyennes temporelles sur une période puisque l'orbite est circulaire. Pour une orbite elliptique, le théorème du Viriel pour le champ Coulombien est $2\overline{E}_{\text{cin}} = -\overline{E}_{\text{pot}}$ où $\overline{E}_a = (1/T) \int_0^T dt E_a(t)$, T étant la période du mouvement lié.

²⁰De fait, la longueur $h/(mv)$ n'est autre que la longueur d'onde associée de de Broglie pour un électron de vitesse v .

²¹Ces transitions sont bien les plus énergétiques.

²²La valeur connue actuellement [21] pour la constante de Rydberg pour l'atome infiniment massif, notée Ry_∞ pour rappeler ce fait, est $\text{Ry}_\infty = 109\,737.315\,685\,49 \text{ cm}^{-1}$.

²³Atome de numéro atomique Z qui a perdu $Z - 1$ électrons.

de l'électron m . Pour un atome de masse M , la bonne constante de Rydberg est, d'après la définition de μ et d'après (6.29) :

$$Ry_M = \frac{1}{1 + (m/M)} Ry_\infty < Ry_\infty \quad (6.35)$$

ce qui produit un léger “décalage vers le rouge” (décalage vers les basses fréquences) par rapport à la fréquence calculée avec (6.25) et (6.29), d'autant plus visible que l'élément est léger. Cette correction de masse permet de distinguer le spectre de l'hydrogène de celui du deutérium, par exemple.

La généralisation à un atome hydrogénoïde de charge nucléaire $Z|e|$ donne l'énergie :

$$E_n = -\frac{m(Ze')^2}{2n^2\hbar^2}, \quad (6.36)$$

ce qui fournit les nombres d'onde des raies :

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 Ry \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right). \quad (6.37)$$

Cette observation a permis à Rydberg de résoudre l'énigme de la série de Pickering. Pickering avait observé dans l'atmosphère de l'étoile ζ -Puppis²⁴ une série spectroscopique dont les nombres d'onde étaient donnés par :

$$\frac{1}{\lambda} = Ry \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{p^2} \right) \quad (6.38)$$

mais où les nombres p étaient non seulement tous les entiers mais aussi les *demi-entiers*. L'interprétation donnée immédiatement fut l'existence, près de cette étoile, d'une forme d'hydrogène inconnue sur la Terre et où, pour une raison énigmatique, il fallait prendre aussi en considération non seulement les entiers mais aussi les demi-entiers dans une formule à la Balmer. Par la suite, Rydberg lui-même proposa une autre explication : la série de Pickering est en fait une série de He^+ . En effet, en prenant $Z = 2$ et $n = 4$ dans (6.37), on obtient ($p \in \mathbb{N}^*$) :

$$\frac{1}{\lambda} = 4Ry \left(\frac{1}{16} - \frac{1}{p^2} \right) = Ry \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{(p/2)^2} \right) \quad (6.39)$$

qui est bien la formule de Balmer (6.9) avec les entiers *et* les demi-entiers ! La série de Pickering de He^+ possède bien deux fois plus de raies que la série de Balmer pour l'hydrogène, avec coïncidence d'une raie sur deux – pour un noyau infiniment massif. L'interprétation de Rydberg fut pleinement confirmée par l'observation fine mettant en évidence la correction de masse (6.35), plus importante pour l'hydrogène que pour l'hélium. De fait, les raies de Balmer ne coïncident pas tout à fait avec “la moitié” de celles de Pickering et présentent un léger décalage vers le rouge (voir figure 6.4).

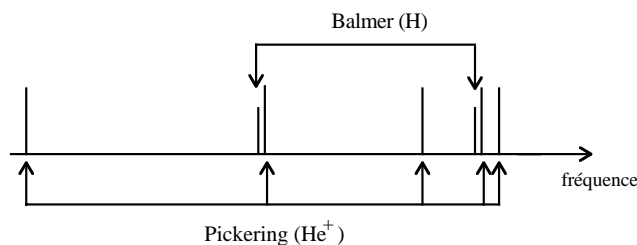


Figure 6.4: Comparaison des séries de Pickering (He^+) et de Balmer (H).

Le modèle de Bohr décrit les états liés de l'électron, au sens où ce dernier est confiné et reste à une distance finie du noyau. Le rayon de l'orbite augmente rapidement avec l'entier n ($R_n = n^2 a_0$, voir (6.33)), cependant que l'énergie correspondante se rapproche de zéro²⁵. Il existe aussi des états d'énergie positive, où l'électron “échappe” à l'attraction nucléaire et représentent les états ionisés de l'atome. L'énergie d'ionisation, E_I , se définit usuellement à partir du fondamental : c'est donc l'énergie minimum à fournir à un électron situé

²⁴ ζ -La Poulpe, en français.

²⁵Ceci reflète la convention adoptée implicitement depuis le début : énergie potentielle nulle à l'infini.

sur la 1^{ère} orbite ($n = 1$) pour le faire sortir de l'atome avec une vitesse nulle. Formellement, c'est la transition $n = 1 \rightarrow n = +\infty$:

$$E_I = \frac{me'^4}{2\hbar^2} = 13.605\,691\,72 \text{ eV} \simeq 13.61 \text{ eV} . \quad (6.40)$$

Un photon d'énergie E_γ supérieure à E_I est donc capable d'ioniser l'atome – lequel absorbe le photon – et de produire un électron non-lié de vitesse finie. Lorsque l'électron final est infiniment loin du proton, la conservation de l'énergie s'écrit²⁶ :

$$E_\gamma + E_{n=1} = \frac{1}{2}mv^2 \iff \frac{1}{2}mv^2 = E_I - E_\gamma \quad (6.41)$$

Comme l'énergie finale de l'électron est maintenant distribuée continûment, le mouvement non-lié n'est pas quantifié. La figure (6.5) schématise et rassemble les propriétés énergétiques de tous les états de l'atome. La partie correspondant aux états non-liés forme le *spectre continu*, les états liés constituant le *spectre discret*.

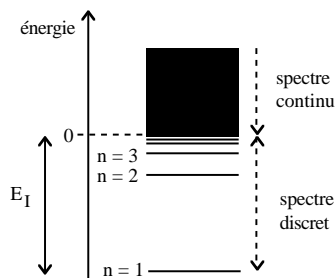


Figure 6.5: Représentation schématisée des niveaux d'énergie d'un atome.

D'autres raffinements du modèle de Bohr sont possibles : prise en considération des orbites elliptiques prévues pour un champ en $1/r^2$, corrections relativistes (dûes à Sommerfeld, voir ch. 8), *etc.* Ces extensions ne changent pas essentiellement la nature de ce modèle. Pour satisfaisante qu'elle soit, sur un plan pragmatique, la théorie de Bohr-Sommerfeld ne fit que déplacer le problème tout en soulevant d'autres questions. Il restait notamment à comprendre le pourquoi de la quantification, et à résoudre la difficulté coriace de l'instabilité électrodynamique. Bohr ne remet pas en question l'Électromagnétisme, de sorte que son affirmation de la stabilité de ses trajectoires particulières constitue une incohérence logique. Au total, si l'idée de quantification des variables dynamiques (énergie et moment cinétique) a gagné du terrain, la raison profonde de cette nécessité fondamentale reste à lucider ou du moins à expliquer au sein d'une théorie cohérente. C'est ce que fera la Mécanique Quantique, au prix d'une révision révolutionnaire des concepts premiers : dans cette théorie, la notion même de trajectoire disparaît complètement²⁷ – tant pis pour le bon sens, le langage commun et les orbites de Bohr !

²⁶Toujours en négligeant le recul de l'atome.

²⁷Dans sa reformulation de la Mécanique Quantique (à la fin des années '40), Feynman a montré que la trajectoire au sens classique peut être vue comme la limite d'une sorte de tube spatio-temporel dont la dimension transverse tend vers zéro quand la constante de Planck en fait autant. En quelque sorte, la "trajectoire" quantique d'une particule est ce que le lit de la Seine est à un bouchon de liège à la dérive.

Chapitre 7

Quantification de l'énergie : confirmations

Ce chapitre rassemble la description de quelques expériences confirmant la justesse de l'idée de quantification de l'énergie de l'atome. Une première interprétation qualitative de ces expériences sera fournie dans le cadre de la théorie pragmatique de Bohr.

7.1 Le phénomène de résonance optique

L'expérience (Wood, 1905) consiste à éclairer une vapeur atomique avec une lampe dont l'ampoule contient le même atome que la vapeur (par exemple, on éclaire une vapeur de sodium avec une lampe à sodium). On peut faire les deux observations suivantes :

1. la vapeur elle-même devient une source de lumière à la même fréquence que la source, et émet dans toutes les directions. Pour une diffusion ordinaire, l'intensité serait nulle dans la direction de polarisation du champ (électrique) excitateur¹
2. l'intensité totale émise par la vapeur est plus faible que l'intensité incidente – au contraire de ce qui se passe pour la diffusion ordinaire (élastique). L'énergie “perdue” est en fait reconvertie dans des degrés de liberté denses en énergie (très serrés), puis redistribuée par collisions au sein du gaz. Au total, la température de la vapeur s'élève.

Ce phénomène est appelé résonance optique. Optique parce qu'il se produit (au moins ici) dans le domaine optique. Résonance car il ne survient que dans la mesure où l'excitation a précisément la(es) *même(s)* fréquence(s) propre(s) que la vapeur : si on remplace le sodium du ballon par un autre gaz, le phénomène disparaît. Au contraire de la diffusion élastique ordinaire de la lumière, la résonance se caractérise par une hypersélectivité en fréquence : elle se produit pour des fréquences bien particulières, qui sont celles appartenant au spectre de raies des atomes mis en jeu. Par ailleurs, dans les conditions usuelles de température, toutes les fréquences possibles du spectre de raies ne donne pas lieu à la résonance : pour une lampe à hydrogène éclairant une vapeur d'hydrogène, on n'observe la résonance que pour les raies de la série de Lyman – celles dont l'état inférieur d'énergie est de fait notablement peuplé à l'ambiante.

En définitive, diffusion élastique et résonance se démarquent nettement l'une de l'autre :

- diffusion : intensité faible dans (presque) toutes les directions, l'essentiel étant diffusé vers l'avant. Il n'y a pas d'absorption d'énergie par la vapeur
- lumière intense dans toutes les directions et absorption (partielle) d'énergie par la vapeur.

¹Une antenne longiligne ne rayonne pas le long de son axe.

La résonance optique peut être considérée comme un cas particulier de ce que l'on appelle en général la luminescence, qui est la lumière émise par un gaz, un solide, ... irradiés par une source primaire. En général, la lumière émise a une fréquence différente de celle du champ excitateur et, le plus souvent, la fréquence de luminescence est plus petite^{2,3}. Parmi les phénomènes de luminescence, on distingue ceux qui sont rapides (durée de vie de 10^{-8} s à 10^{-10} s – ou encore moins) – on parle alors de fluorescence, de ceux qui sont lents (typiquement la milliseconde ou plus) auquel cas on parle de phosphorescence.

Les faits expérimentaux caractérisant la résonance optique s'expliquent qualitativement dans la théorie de Bohr :

1. puisque les échanges entre rayonnement et matière ne peuvent se faire que par petits grains indivisibles (les photons) *et* puisque l'atome a une suite discrète d'états d'énergie possibles (les états de Bohr), c'est seulement lorsque le photon a une énergie correspondant précisément⁴ à la différence des énergies de deux états atomiques que celui-ci peut être annihilé (absorbé), l'atome montant dans un état d'énergie supérieure (état excité) : si l'on veut aligner les barreaux de deux échelles, il faut que leurs espacements coïncident. *Via* la relation de Bohr $E_f - E_i = h\nu$, ainsi se trouve expliquée l'hypersélectivité en fréquence
2. une fois à l'état excité, l'atome y reste un certain temps (aléatoire, de moyenne égale à la durée de vie de l'état excité), avant de redescendre dans l'état de plus basse énergie (état fondamental)⁵. Ce retour s'accompagne de la création (émission) d'un photon, dont la direction de propagation (et la polarisation) est *quelconque*⁶ par rapport à la direction de la lumière incidente : la vapeur émet bien dans toutes les directions
3. toutes les transitions possibles ne donnent pas lieu à la résonance dans les conditions normales. En effet, aux températures ordinaires ($k_B T$ de l'ordre de quelques dizaines de meV), la population de Boltzmann de tout état autre que le fondamental est infime ; pour que la séquence $i \rightarrow f \rightarrow i$ se produise, il faut que i soit peuplé. C'est pourquoi, pour l'hydrogène, seule la série de Lyman est visible en résonance – sauf précautions particulières.

Remarque : la réflexion spéculaire

Le dispositif utilisé pour mettre en évidence la résonance optique permet également d'observer des phénomènes spectaculaires, comme la réflexion spéculaire. Il est bien évident que l'absorption de lumière par la vapeur atomique est d'autant plus forte que la densité des atomes est plus élevée et il peut même arriver que le rayonnement soit totalement absorbé avant d'avoir pu traverser tout le ballon. Dans ces conditions, seule la partie "avant" de la vapeur se trouve en situation d'émettre dans toutes les directions, mais comme la lumière émise vers l'arrière (vers l'intérieur de la vapeur) est également absorbée (exponentiellement en fonction de la distance parcourue dans la vapeur), seule la face du ballon exposée vers la source est lumineuse ; quand la densité est élevée au point que le faisceau incident est absorbé sur une distance de l'ordre de l'épaisseur des parois du ballon (typiquement 1 mm), on a l'impression que c'est la paroi elle-même qui est source de lumière et semble être un miroir réfléchissant (au fond, rien n'a changé dans le phénomène lui-même). Cette réflexion est dite spéculaire car elle présente les mêmes caractéristiques que la réflexion métallique ; seuls les acteurs en présence diffèrent : les atomes dans un cas, les électrons quasi-libres du métal dans l'autre.

7.2 Les expériences de Lenard

Les premières expériences quantitatives d'excitation d'une vapeur atomique par bombardement électronique ont été effectuées par Lenard en 1902. Le principe de l'expérience consiste à exciter une vapeur atomique en la

²Dans le cas d'une irradiation intense, des effets non-linéaires peuvent se produire, notamment les processus dits à deux photons (les photons se font la courte échelle) et la luminescence peut apparaître à une fréquence *supérieure* à la fréquence d'excitation.

³Le phénomène de lumière noire est bien connu : on éclaire dans l'UV (que l'œil ne voit pas) une image qui émet dans le visible.

⁴En négligeant le recul de l'atome.

⁵Ceci est le scénario le plus simple. La descente peut aussi se faire en cascade, avec l'intervention de niveaux intermédiaires.

⁶Cette émission est dite *spontanée*, car elle se produit "naturellement", qu'il y ait ou non un champ électromagnétique, dès que l'atome est dans un état excité. On connaît aussi l'émission *induite*, provoquée par la présence du rayonnement. Dans le domaine optique, l'émission spontanée est beaucoup plus importante que l'émission induite.

soumettant à un faisceau électronique suffisamment énergétique pour provoquer une ionisation des atomes de la vapeur. Les ions ainsi formés peuvent être identifiés de diverses façons (par spectroscopie de masse, par exemple, mais aussi par étude de leur luminescence).

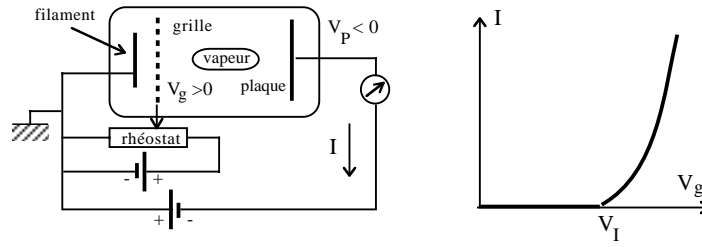


Figure 7.1: Montage et caractéristique $I(V)$ dans l'expérience de Lenard.

Le principe du dispositif expérimental est représenté sur la figure 7.1. On utilise une triode contenant une vapeur sous faible pression. Les électrons émis par effet thermoélectronique d'un filament chauffé⁷ sont accélérés par la grille, traversent celle-ci et "attaquent" la vapeur avec une énergie cinétique de quelques eV et une grande vitesse. La plaque est au contraire portée à un potentiel négatif V_P par rapport au filament, de sorte qu'aucun électron ne peut atteindre celle-ci⁸. La plaque étant à un potentiel négatif, un courant ne peut apparaître dans le circuit extérieur que si ce sont des charges *positives* qui sont créées au sein de la vapeur. L'apparition d'un courant est donc la signature de la formation d'ions positifs dans le gaz.

Si on admet que l'énergie cinétique des électrons au moment de leur émission est petite par rapport à celle qu'ils acquièrent grâce à la tension positive de la grille par rapport au filament⁹, leur énergie à l'entrée de la zone où se trouve principalement la vapeur est :

$$E_{\text{cin},i} \equiv \frac{1}{2}mv^2 = |e|V_g. \quad (7.1)$$

En faisant varier V_g , il est donc très facile modifier cette énergie de départ. La caractéristique donnant l'intensité du courant de plaque I (qui ne peut être qu'un courant d'ions positifs), en fonction du potentiel positif de la grille V_g , est alors déterminée expérimentalement (voir figure 7.1). L'intensité I est nulle tant que V_g est inférieur à une certaine valeur V_I ; au contraire, au-dessus de V_I , le courant de plaque augmente très vite. Tout ceci s'interprète simplement en termes de quantification de l'énergie de l'atome : pour créer des charges positives, il faut dépasser une certaine énergie caractéristique de l'atome, rendant alors possible l'éjection d'un électron et la formation conséquente d'un ion positif. La tension minimum pour cela est appelée potentiel d'ionisation V_I (usuellement exprimé en volts), et l'énergie correspondante, $|e|V_I$, n'est autre que l'énergie d'ionisation de l'atome E_I . L'énergie E_I , quelques eV, est nettement plus grande pour un gaz rare ($E_{I\text{Xe}} = 12.1$ eV) que pour un alcalin ($E_{I\text{Cs}} = 3.89$ eV). Ces énergies peuvent être plus élevées que les travaux de sortie W_S et ceci se comprend aisément : les électrons au sein de l'atome sont fortement liés au noyau, alors que les électrons dans un métal sont presque libres ; de ce point de vue, on peut se représenter un métal comme une sorte d'"atome"

⁷L'origine physique de l'effet thermoélectronique est la suivante. Les électrons sont confinés au sein du métal constituant le filament et doivent recevoir une énergie W_S pour en sortir ; W_S est de l'ordre de quelques eV, c'est-à-dire 50 à 100 fois $k_B T$ à l'ambiante. D'un autre côté, en raison de l'agitation thermique, la vitesse (l'énergie) d'un électron donné fluctue rapidement au cours du temps et est distribuée suivant une certaine loi statistique. Il existe à tout instant des électrons dont l'énergie est grande : ce sont ceux qui, brièvement et de façon transitoire, se situent dans la "queue" haute énergie de la distribution. C'est en profitant sans tarder d'une telle fluctuation spontanée qu'un électron peut sortir du métal (il s'agit, presque au sens propre, d'une "évaporation" de la mer de Fermi). Cette chance de sortie est bien sûr d'autant plus grande que la température est élevée ; comme les probabilités à haute énergie ont une dépendance à peu près exponentielle par rapport à la température ($\simeq A e^{-E/k_B T}$), une petite variation de température (d'un facteur 3 ou 4) donne des variations très importantes du taux d'émission thermoélectronique. À l'ambiante, le nombre d'électrons ainsi émis est ridiculement petit ; à 2000 K, une température typique pour un filament (tout comme le corps noir, c'est à une telle température que le filament apparaît à peu près blanc brillant), ce taux devient assez grand – même si seules les queues de distribution sont efficaces – pour donner un courant mesurable.

⁸Accélérés par la grille, les électrons (supposés émis à vitesse négligeable) peuvent remonter la ddp antagoniste au-delà de la grille jusqu'à la surface équipotentielle zéro, endroit où leur vitesse s'annule. En pratique, la valeur absolue de V_P doit être notablement supérieure à l'énergie cinétique typique des électrons au moment de leur émission par le filament par effet thermoélectronique.

⁹Un électron accéléré par une ddp de 1 V a une vitesse de 600 km/s, très supérieure à sa vitesse (quelques km/s) lors de son émission thermique par le filament, même porté à haute température.

gigantesque où circule assez librement un fluide d'électrons. Au contraire, un atome de gaz rare est, du point de vue de la physique atomique, un objet très robuste.

L'expérience de Lenard met ainsi clairement en évidence un seuil d'énergie minimale pour extraire un électron hors de l'atome ; un tel résultat n'a d'explication que si les états atomiques sont effectivement quantifiés en énergie. Dans le cas de l'effet photoélectrique, c'est le rayonnement qui apparaît quantifié en petits morceaux ; ici, c'est la matière, par la quantification des énergies de l'atome. Le mécanisme mis en évidence par Lenard est finalement un effet photoélectrique sur des atomes à l'état gazeux, alors que l'effet photoélectrique ordinaire implique un fluide d'électrons quasiment libres au sein d'un métal.

7.3 Les expériences de Franck et Hertz (1914)

Les expériences de Franck et Hertz furent conçues, à partir de celles de Lenard, dans le but d'examiner le sort d'électrons lors de leur interaction avec une vapeur atomique. Le montage ressemble à celui de Lenard, mais la plaque est maintenant portée à un potentiel positif (par rapport au filament, c'est donc une anode) et collecte par conséquent les électrons émis par le filament chauffé à l'issue de leur traversée du gaz ; il en résulte un courant d'intensité I dirigé en sens opposé de celui de l'expérience de Lenard. Ici, il n'y a pas d'ionisation des atomes : la ddp accélératrice est inférieure au potentiel d'ionisation V_I et les électrons collectés sont exclusivement ceux émis par le filament par effet thermoélectronique. Le potentiel de la plaque est légèrement inférieur à celui de la grille, d'une quantité voisine de quelques dixièmes de volt :

$$V_P = V_g - \Delta V \quad (\Delta V > 0) . \quad (7.2)$$

Les électrons pénètrent donc dans la vapeur avec une énergie cinétique $E_{\text{cin } i}$, égale à $|e|V_g$, puis rencontrent la ddp ΔV qui les ralentit ; leur énergie cinétique finale, $E_{\text{cin } f}$, s'ils parviennent à la plaque en subissant au plus des collisions élastiques, est maintenant :

$$E_{\text{cin } f} = E_{\text{cin } i} - |e|\Delta V \quad \Longleftrightarrow \quad E_{\text{cin } f} = |e|(V_g - \Delta V) . \quad (7.3)$$

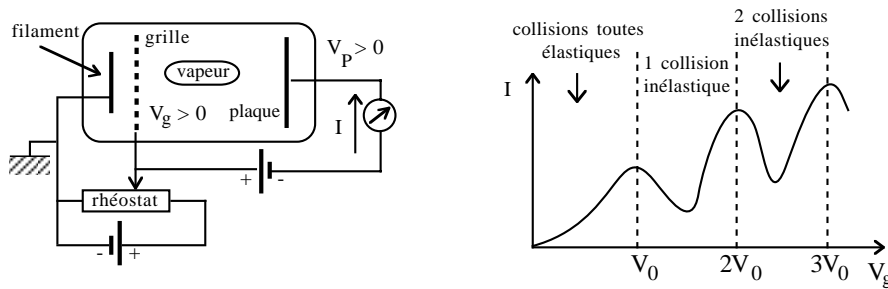


Figure 7.2: Montage et résultats de Franck et Hertz.

Pour que les électrons puissent parvenir à la plaque, leur énergie cinétique doit être assez grande. Par ailleurs, si un électron subit une collision inélastique avec un atome, son énergie cinétique à l'issue de cette collision est notablement réduite, d'une quantité égale à l'énergie d'excitation interne de l'atome. L'électron peut même être immobilisé s'il avait juste l'énergie cinétique nécessaire à une telle excitation ; en pareil cas, sa vitesse est nulle et il repart en arrière sous l'effet de la contre-tension ΔV ; alors l'intensité totale diminue.

Le tracé expérimental de la caractéristique $I(V_g)$ donne la courbe de la figure 7.2. La croissance régulière de la tension de grille (donc l'augmentation graduelle de l'énergie cinétique des électrons au moment de leur entrée dans la vapeur) fait apparaître les phénomènes suivants :

- tant que V_g est petit, l'intensité croît de façon monotone, exactement comme dans le cas d'une triode à vide ; la charge d'espace créée par les électrons au voisinage du filament chauffé diminue au fur et à mesure qu'ils peuvent atteindre plus rapidement la plaque

- lorsque V_g atteint une valeur-seuil V_0 , l'intensité se met à chuter brutalement, indiquant que la plupart des électrons, maintenant, ne peuvent plus rejoindre la plaque. Ceci s'explique en invoquant une collision *inélastique* qui fait perdre aux électrons leur vivacité, les rendant incapables de parvenir à l'anode collectrice. Le changement brutal de la caractéristique traduit le passage brutal d'un régime de collisions *élastiques* à un régime de collisions *inélastiques*
- quand V_g a très sensiblement dépassé V_0 , l'intensité recommence à croître : si les électrons continuent à voir baisser d'un coup leur énergie cinétique au moment d'une collision inélastique, leur énergie cinétique initiale était cependant suffisamment élevée pour qu'ils arrivent finalement sur l'anode, même après en avoir perdu une partie au profit d'un atome qu'ils laissent à l'état excité
- pour $V_g = 2V_0$, une nouvelle chute soudaine de l'intensité apparaît, que l'on interprète ainsi : un électron, après une première collision inélastique qui lui laissait quelque chance, en a subi une deuxième, à l'issue de laquelle il se trouve dans l'incapacité de rejoindre l'anode ; ceci se produit pour la plupart des électrons et l'intensité se réduit considérablement. Les mêmes observations sont faites à $V_g = 3V_0, 4V_0, \text{etc.}$ L'interprétation est confirmée par une étude en pression : lorsque la pression devient assez petite, la probabilité de deux collisions inélastiques consécutives devient extrêmement faible et on constate en effet que le second *minimum* est nettement moins accusé que le premier.

Globalement, l'interprétation est cohérente avec l'idée suivant laquelle l'atome ne peut prendre à l'électron incident qu'une quantité donnée, finie, d'énergie. Dans les expériences de Franck et Hertz, le gaz était une vapeur de mercure et on trouve $V_0 = 4.9 \text{ V}$, alors que le potentiel d'ionisation du mercure V_I est voisin de 10.5 V . Sous l'effet des collisions inélastiques, l'intégrité de l'atome est préservée, celui-ci ne se décompose pas et passe dans un état excité :

$$E_{\text{atome},f} = E_{\text{atome},i} + |e|V_0 . \quad (7.4)$$

En reprenant la théorie de Bohr, on voit que les choses n'en restent d'ailleurs pas là : si l'interprétation est correcte, alors, tôt ou tard, les atomes excités doivent retomber au fondamental en émettant de l'énergie sous forme lumineuse, à une longueur d'onde λ_0 donnée par :

$$\lambda_0 = \frac{hc}{E_{\text{atome},f} - E_{\text{atome},i}} = \frac{hc}{|e|V_0} . \quad (7.5)$$

C'est effectivement ce que l'on observe : lorsque V_g a dépassé la valeur V_0 , le tube contenant le mercure émet dans l'UV à $\lambda_0 = 2537 \text{ \AA}$, qui est précisément l'une des raies de résonance du mercure. Les expériences de Franck et Hertz confirment donc totalement la justesse des idées fondamentales de la théorie de Bohr sur la quantification de l'énergie des édifices atomiques.

Chapitre 8

L'Ancienne Théorie des Quanta

Le but de ce chapitre est d'exposer la théorie visant à généraliser les idées de Bohr et à leur fournir une substance conceptuelle. Historiquement, cette théorie eut de fait une existence éphémère et céda rapidement le pas à la nouvelle théorie, la Mécanique Quantique, construite en quelques années à partir des travaux de Heisenberg (Mécanique des Matrices, 1925) et Schrödinger (Mécanique Ondulatoire, 1926). Il reste d'une part que l'Ancienne Théorie des Quanta a joué un rôle crucial pour l'articulation des idées et que d'autre part, revisitée rétrospectivement, elle se révèle être une approximation (asymptotique) justifiable dans la limite dite des grands nombres quantiques. De ce fait, il s'agit d'une approche éminemment respectable, qui donne de surcroît l'occasion d'un exposé (ici élémentaire) de la Mécanique Analytique et des concepts universels que cette dernière manipule (par exemple la notion de principe variationnel¹).

8.1 Rudiments de Mécanique Analytique

8.1.1 Principe de moindre action (PMA) et équations de Lagrange

La Mécanique Analytique est une reformulation de la Mécanique élémentaire n'apportant pas à proprement parler de résultat nouveau. Elle est séduisante au sens où, fondée sur un principe variationnel, elle constitue un exemple de démarche universelle en Physique, permettant d'ailleurs d'établir des analogies entre des disciplines très différentes (l'Optique et la Mécanique, par exemple). Enfin, elle est à proprement parler indispensable à la formulation précise de la Mécanique Quantique (ce qui donne à cette dernière un statut épistémologique unique²).

La plus élémentaire question de Mécanique peut s'énoncer comme suit : un point matériel étant soumis à un champ de force $\vec{F}(\vec{r})$ définissant une énergie potentielle³ $V(\vec{r})$ ($\vec{F} = -\vec{\nabla}V$), quelle est la trajectoire suivie par le point entre deux instants t_i et t_f ? On sait que la réponse est unique si l'on connaît par exemple, pour chaque direction de l'espace, la coordonnée et sa dérivée à l'instant de départ t_i ; ceci résulte du fait que l'équation

¹La notion de principe variationnel est omniprésente en Physique : Mécanique Statistique, Théorie des Champs, Mécanique Quantique, Phénomènes critiques, ... , et bien sûr, Mécanique de Lagrange et Hamilton. C'est d'ailleurs l'analogue en Optique du principe de moindre action (le principe de Fermat ou de moindre durée) qui a guidé les premiers pas des pionniers de la Mécanique Quantique ; longtemps auparavant (vers 1848 !), Hamilton avait d'ailleurs, de façon visionnaire, mis en évidence ces analogies mais, faute de disposer d'expériences cruciales imposant la nécessité d'une révision fondamentale des concepts, n'y avait vu que des ressemblances purement formelles – à cette époque rien ne justifiait la construction d'une nouvelle théorie physique ; l'analogie fut reprise et exploitée par Schrödinger en 1926 pour construire son illustissime équation. L'histoire de la Physique en aurait certainement été changée si Planck était venu quelque soixante ans plus tôt ...

²Voir par exemple les remarques de Landau [26], § 1.

³La terminologie est parfois ambiguë. Strictement parlant, le potentiel, U , est relatif au *champ* créé par une source (par exemple, une charge Q crée le potentiel électrostatique $U = Q/(4\pi\epsilon_0 r)$, donnant le champ $\vec{E} = -\vec{\nabla}U$) ; entre le champ et la force intervient un facteur intrinsèque caractérisant physiquement le point matériel (sa masse, sa charge, ...). En Mécanique Quantique, l'usage courant est d'appeler *potentiel* ce qui est en fait *l'énergie potentielle*. En cas de doute, l'ambiguïté se lève d'elle-même par l'analyse dimensionnelle.

fondamentale de la Dynamique (EFD) est du second ordre par rapport au temps⁴ : cette connaissance initiale permet de fait de fixer toutes les constantes d'intégration.

La question précédente peut être formulée en d'autres termes, par exemple : quelle est la trajectoire suivie par la particule sachant que celle-ci est au point M_i à l'instant t_i et au point M_f à l'instant t_f ? Autrement dit, un champ de forces étant donné, deux points et deux instants étant choisis, comment est sélectionnée la seule et unique⁵ trajectoire réelle parmi toutes les lignes possibles reliant ces deux points à ces deux instants ? Dans cette formulation, les vitesses aux deux bouts sont donc “flottantes” – mais seront évidemment en bout de course reliées sans ambiguïté l'une à l'autre.

C'est maintenant qu'un principe de choix doit survenir, permettant précisément de fixer l'unique trajectoire réelle. Une façon de construire ce principe est d'associer un nombre à toute trajectoire et de décréter que ce nombre est *extrémal*⁶ vis-à-vis de toute petite variation de la trajectoire. Cette propriété entraîne que toute variation de la trajectoire ne produit qu'un effet d'ordre supérieur ; de ce fait, la réponse est *robuste*.

Une trajectoire (réelle ou fictive) est complètement définie par la donnée des deux fonctions vectorielles $\vec{r}(t)$ et $\dot{\vec{r}}(t)$ et ce sont les deux seuls ingrédients de base : ordinairement, une trajectoire est entièrement déterminée dès que l'on connaît un point et la tangente en ce point⁷. Maintenant, associer un nombre à la trajectoire peut se faire en définissant une certaine fonction de $\vec{r}(t)$ et $\dot{\vec{r}}(t)$, notée L dans la suite et appelée Lagrangien, et d'en prendre l'intégrale entre les deux instants t_i et t_f . On en vient ainsi à considérer une quantité notée S , appelée *action* et ayant la forme :

$$S_{i,f} = \int_{t_i}^{t_f} L(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t)) dt. \quad (8.1)$$

$S_{i,f}$ est une *fonctionnelle* $S[\vec{r}, \dot{\vec{r}}]$ de la trajectoire, puisque sa valeur dépend de toutes celles de la fonction $\vec{r}(t)$ et de sa dérivée $\dot{\vec{r}}(t)$ entre t_i et t_f . On va donc écrire que l'action S est extrémale, ce qui produira une ou plusieurs équations impliquant L et par conséquent les deux fonctions $\vec{r}(t)$ et $\dot{\vec{r}}(t)$ (équations de Lagrange⁸).

Ce qui précède constitue la trame de toute méthode fondée sur un principe variationnel, qu'il convient de compléter en disant ce qu'est le Lagrangien L . Il est bien clair que les équations pour $\vec{r}(t)$ et $\dot{\vec{r}}(t)$ doivent reproduire l'EFD sous une forme ou sous une autre : il ne s'agit pas d'élaborer une théorie de substitution, mais de construire une formulation alternative de la Mécanique élémentaire, en tout point équivalente à cette

⁴Le temps figure “au carré” dans l'EFD, et c'est d'ailleurs pourquoi cette équation possède la symétrie d'invariance par renversement du temps – tant qu'il n'existe pas de champ magnétique (dans ce cas, la force de Lorentz introduit un terme *linéaire* en vitesse).

⁵L'EFD étant du second ordre par rapport au temps, la solution est unique dès que l'on a précisé la position et la vitesse du point de départ.

À ce sujet, il vaut la peine de citer l'affirmation de Pierre-Simon de Laplace (1749-1827) disant (en substance) :

Donnez-moi les positions initiales et les vitesses initiales des particules de l'univers et je vous prédirai l'avenir du monde.

Des développements récents (la prise de conscience du chaos déterministe) montre que cette affirmation doit être relativisée dans la démarche pragmatique du physicien en contact avec le monde réel, même pour des systèmes simples. On a longtemps cru que l'aspect “aléatoire” de certains phénomènes – il y a beaucoup à dire sur la relation entre hasard et chaos, voir par exemple [27] – était tributaire de l'existence d'un grand nombre de degrés de liberté (par exemple, un gaz classique et ses $\sim 10^{23}$ degrés de liberté) ; on sait maintenant qu'il n'en est rien : des systèmes possédant un très petit nombre de degrés de liberté (par exemple : trois corps en interaction gravitationnelle, comme découvert par Poincaré) peuvent être le siège de processus très subtils interdisant toute prévision à long terme quand il existe la moindre incertitude – c'est toujours le cas – sur l'état initial. Ce qui est en cause n'est pas le déterminisme (il reste la règle absolue) mais sa non-pertinence en pratique. Il vaut la peine de noter que de tels systèmes posent un problème méthodologique : la notion de reproductibilité d'une expérience, essentielle en Physique, suppose qu'il est possible de “préparer” le système plusieurs fois dans le même état ; ce n'est jamais strictement le cas en pratique, précisément à cause d'erreurs incontrôlables. Pour certains systèmes, c'est sans importance, car ils n'ont pas de sensibilité par rapport aux conditions initiales ; en revanche, pour un système chaotique, le désir de reproductibilité est une utopie, s'agissant des prévisions à long terme.

En ce qui concerne le domaine quantique – où le chaos peut aussi se manifester –, on verra comment le déterminisme s'y exprime de façon spécifique : si les phénomènes sont, pris isolément, essentiellement aléatoires, en revanche les lois de probabilités qu'ils décrivent obéissent à des équations strictement déterministes. On peut dire que le déterminisme a seulement changé de registre

⁶On dit aussi *stationnaire*, mais gare aux confusions. Le mot stationnarité qualifie aussi la permanence dans le temps.

⁷Toutes les trajectoires sont supposées continues et (presque) partout différentiables – cette affirmation n'est qu'une conséquence de l'EFD, qui n'a de sens que si $\ddot{\vec{r}}$ existe – sauf en des points isolés (penser à la balle qui rebondit sur un mur). Dans d'autres contextes (e. g. mouvement Brownien d'une “grosse” particule), on connaît des trajectoires non dérivables et qui, de ce fait, ne peuvent relever d'une équation du type de l'EFD – d'ailleurs, dans le mouvement Brownien, la particule massive ne cesse, en un sens, de faire rebondir beaucoup de particules légères.

⁸Joseph Louis, comte de Lagrange (1736 - 1813), considéré comme le fondateur de la Mécanique analytique.

dernière. L'un des résultats majeurs de ce qui suit est que l'on peut toujours prendre L sous la forme :

$$L = \text{énergie cinétique} - \text{énergie potentielle} \equiv T - V . \quad (8.2)$$

Pour démontrer ce résultat, on se place dans le cas le plus simple d'un seul degré de liberté (un point matériel se déplaçant sur la droite réelle) ; la généralisation à N degrés de liberté est un simple jeu d'écriture. Traditionnellement, en Mécanique Analytique, on désigne par q la coordonnée et par \dot{q} sa dérivée par rapport au temps ; on va donc devoir écrire que l'intégrale :

$$S_{i,f} = \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t)) dt \quad (8.3)$$

est extrémale pour la trajectoire réelle reliant deux points de positions q_i et q_f correspondant aux deux instants t_i et t_f . La condition ainsi obtenue contient bien la réponse à la question posée : quelle est la trajectoire *réelle* suivie par le point matériel entre deux points fixés ? Pour écrire la condition d'*extremum*, on considère deux trajectoires $q(t)$ et $q'(t) = q(t) + \delta q(t)$, où δq est une petite variation. δq a une dérivée $\delta \dot{q} = (d/dt)\delta q$, mais il faut bien comprendre que les deux fonctions δq et $\delta \dot{q}$ sont *indépendantes* dans la variation de la trajectoire ; en effet, ayant fixé l'incrément δq à un certain instant, ceci ne définit pas pour autant la trajectoire variée : il faut *en plus* préciser sa tangente – ce qui fixe $\delta \dot{q}$ – et ceci peut se faire indépendamment du choix préalable de δq (voir figure 8.1). Ceci étant précisé, L est bien une fonction de deux variables indépendantes. La variation de $S_{i,f}$ est :

$$\delta S_{i,f} \equiv S_{i,f}[q', \dot{q}'] - S_{i,f}[q, \dot{q}] = \int_{t_i}^{t_f} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}) dt - \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}) dt \equiv \int_{t_i}^{t_f} \delta L dt . \quad (8.4)$$

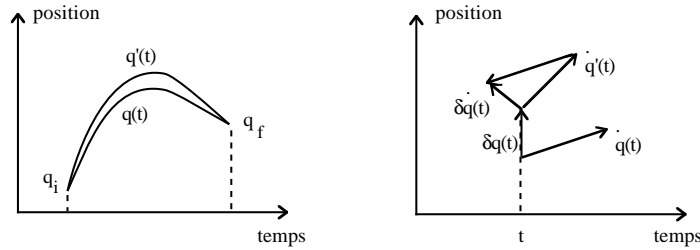


Figure 8.1: Illustration de la variation d'une trajectoire.

Quant à la variation de L , δL , elle est donnée comme d'habitude pour une fonction de plusieurs variables indépendantes, soit ici par :

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} . \quad (8.5)$$

En reportant l'expression (8.5) dans (8.4), en intégrant par parties le terme proportionnel à $\delta \dot{q}$ et en regroupant les termes, on trouve :

$$\delta S_{i,f} = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt . \quad (8.6)$$

Le terme tout intégré est nul, puisque la variation se fait à extrémités fixées ($\delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0$) ; il reste donc :

$$\delta S_{i,f} = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt . \quad (8.7)$$

On veut que $\delta S_{i,f}$ soit nul $\forall \delta q$ (c'est la condition d'*extremum*). L'intégrale ne peut être nulle quel que soit δq

que si l'intégrand est lui-même nul : on obtient ainsi l'équation de Lagrange⁹, écrite sous la forme habituelle :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 . \quad (8.8)$$

Par un choix convenable de L , cette équation doit coïncider avec l'EFD, ce qui incite à jouer à la devinette. Pour une particule libre de masse m , le choix $L = m\dot{q}^2/2$, (8.8) donne :

$$\frac{d}{dt} m\dot{q} = 0 \iff m\ddot{q} = 0 , \quad (8.9)$$

qui convient. Si la particule est soumise au potentiel $U(q)$ lui conférant l'énergie potentielle $V(q)$, l'EFD est :

$$m\ddot{q} = -\frac{dV}{dq} . \quad (8.10)$$

C'est bien ce que produit (8.8) si l'on pose :

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) . \quad (8.11)$$

En effet, on a alors :

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q} , \quad \frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial q} , \quad (8.12)$$

et (8.8) est bien identique à (8.10). Ainsi se trouve justifiée l'expression (8.2) de L pour une particule ayant une seule coordonnée¹⁰. L'expression $L = T - V$ reste vraie si V dépend explicitement du temps, ce qui est le cas lorsque la particule est soumise à un champ dépendant du temps. D'un autre côté, on a supposé que V ne dépend que de la coordonnée q , ce qui exclut le cas d'un point matériel de charge Q soumis à un champ électromagnétique (\vec{E}, \vec{B}) . Si (\vec{A}, ϕ) désigne le potentiel (vecteur et scalaire), on peut montrer que le Lagrangien :

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - Q\phi + Q\vec{A} \cdot \vec{v} \quad (8.13)$$

restitue bien l'EFD¹¹ avec la force de Lorentz :

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = Q\vec{E} + Q\vec{v} \times \vec{B} . \quad (8.15)$$

Si, en plus du champ électromagnétique il existe un champ de force "ordinaire" donnant l'énergie potentielle $V(\vec{r})$, le Lagrangien complet est :

$$L = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - V(\vec{r}) - Q\phi + Q\vec{A} \cdot \vec{v} \equiv \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 - \mathcal{V}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) , \quad (8.16)$$

où le potentiel généralisé \mathcal{V} dépend explicitement de la coordonnée \vec{r} et de la vitesse $\vec{v} = \dot{\vec{r}}$.

À titre d'illustration des idées précédentes, et notamment du fait que l'action est extrémale (le plus souvent minimale) le long de la trajectoire réellement suivie, considérons le cas le plus simple, celui d'une

⁹Dans le contexte plus général du Calcul des variations, une telle équation porte le nom d'équation d'Euler - Lagrange. Le calcul des variations est l'outil idéal pour obtenir les géodésiques de l'espace, ou les géodésiques (lignes de longueur minimale) d'une surface donnée (plan, sphère, etc). Il en va de même lorsqu'il s'agit de trouver la solution de problèmes célèbres comme celui du pendule synchrone de Huyghens (dont la période est indépendante de l'amplitude – on trouve une cycloïde) –, ou celui de la brachistochrone (ligne suivie par un point matériel soumis à la pesanteur et telle que le temps de parcours entre deux points donnés est le plus court possible (arc de cycloïde)).

¹⁰Pour un système physique dûment caractérisé, le Lagrangien n'est pas unique : on peut ajouter à L une fonction quelconque du temps seul, $F(t)$ (que l'on peut toujours considérer comme la dérivée d'une autre fonction f , $F = df/dt$), sans altérer l'équation (8.8) puisque ce changement produit la simple constante $f(t_f) - f(t_i)$ qui disparaît dans la variation. Très généralement, le passage de L à $L' = L + F(t)$ est un cas particulier de ce que l'on appelle une transformation de jauge. Le fait que les propriétés physiques sont indépendantes de la jauge (les forces ne changent pas quand on change de jauge) s'appelle l'*invariance de jauge*.

¹¹Avec les relations :

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi , \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} . \quad (8.14)$$

particule libre de masse m . Le Lagrangien est donné par (8.9) et l'intégrale d'action entre les deux instants t_i et t_f ($t_i < t_f$) est :

$$S_{i,f} = \int_{t_i}^{t_f} \frac{1}{2} m \dot{q}^2 dt . \quad (8.17)$$

La fonction $q(t)$ est l'inconnue et il s'agit de retrouver directement que l'intégrale d'action est stationnaire quand q est une fonction linéaire du temps – la particule est libre. Pour cela, supposons que la fonction $q(t)$ est un polynôme du second degré en t passant par les points (fixés) (t_i, q_i) et (t_f, q_f) ; avec cette hypothèse, on a simultanément :

$$q(t) = a(t - t_i)^2 + b(t - t_i) + q_i , \quad q_f = a(t_f - t_i)^2 + b(t_f - t_i) + q_i , \quad (8.18)$$

soit :

$$q(t) = a(t - t_i)^2 + \frac{q_f - q_i - a(t_f - t_i)^2}{t_f - t_i} (t - t_i) + q_i . \quad (8.19)$$

a variant, ceci définit une *famille* de trajectoires (fictives) – qui n'épuise évidemment pas l'ensemble de toutes les lignes reliant les deux extrémités fixes (t_i, q_i) et (t_f, q_f) . Le seul paramètre inconnu est ici a , qu'il faut choisir de façon que $S_{i,f}$ soit minimale. Le calcul explicite de l'intégrale (8.17) donne :

$$S_{i,f} = \left| \frac{a}{3} (t - t_i)^3 + \frac{q_f - q_i - a(t_f - t_i)^2}{2(t_f - t_i)} (t - t_i)^2 + q_i t \right|_{t_i}^{t_f} = \frac{a^2}{6} (t_f - t_i)^3 + \frac{m(q_f - q_i)^2}{2(t_f - t_i)} . \quad (8.20)$$

En tant que fonction de a (toutes les autres grandeurs sont fixées), et en supposant¹² $t_i < t_f$, l'expression (8.20) a un et un seul minimum pour $a = 0$. Alors, (8.19) donne ce que l'on attend (un mouvement uniforme !) :

$$q(t) = \frac{q_f - q_i}{t_f - t_i} (t - t_i) + q_i , \quad (8.21)$$

et l'on obtient de surcroît la valeur de l'action calculée sur la trajectoire réellement suivie entre les deux points fixés¹³ (t_i, q_i) , (t_f, q_f) :

$$S_{i,f} = \frac{m(q_f - q_i)^2}{2(t_f - t_i)} . \quad (8.22)$$

La généralisation des équations variationnelles à un nombre quelconque de coordonnées est immédiate. Pour un ensemble de N particules de masses m_j dans \mathbb{R}^3 , il faut $3N$ coordonnées $q_{u,j} \equiv q_l$, $j = 1, 2, \dots, N$ et $u = x, y, z$ (il y a donc aussi $3N$ composantes $\dot{q}_{u,j} \equiv \dot{q}_l$ pour l'ensemble des vitesses). Si les coordonnées sont rectangulaires¹⁴, l'énergie cinétique T est¹⁵ :

$$T = \sum_{l=1}^{3N} \frac{1}{2} m_j \dot{q}_l^2 \quad (8.24)$$

et l'énergie potentielle est une certaine fonction $V(q_1, \dots, q_{3N})$. Les $6N$ variables q_l et \dot{q}_l sont indépendantes dans la variation de la trajectoire du système à N particules ; dès lors, la généralisation de (8.6) est¹⁶ :

$$\delta S_{i,f} = \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{l=1}^{3N} \left(\frac{\partial L}{\partial q_l} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} \right) \delta q_l . \quad (8.25)$$

¹²Visiblement, l'échange de t_i et t_f inverse le signe de $S_{i,f}$.

¹³De façon inattendue, la fonction $S_{i,f}$ ressortira ... dans le propagateur quantique de la particule libre !

¹⁴Dans toute la suite, les coordonnées sont supposées rectangulaires, sauf mention contraire.

¹⁵L'énergie cinétique n'a l'allure (8.24) que pour des coordonnées rectangulaires (cartésiennes). Par exemple, pour une particule dans le plan avec les coordonnées polaires (r, θ) , on a :

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) . \quad (8.23)$$

¹⁶Les $3N$ termes tout intégrés sont nuls pour la même raison qu'avant.

Les $3N$ variations δq_l sont indépendantes ; la condition $(\delta S_{i,f} = 0 \forall \delta q_l \text{ et } \forall l)$ produit au total les $3N$ équations de Lagrange distinctes :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} - \frac{\partial L}{\partial q_l} = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, 3N) . \quad (8.26)$$

Ainsi par exemple, pour un point matériel dans le plan, il y a deux équations de Lagrange à écrire. Par ailleurs, les équations (8.26) montrent un résultat majeur : si L est indépendant¹⁷ d'une certaine coordonnée q_{l_0} , alors $\partial L / \partial \dot{q}_{l_0}$ est une *constante du mouvement* (voir aussi plus loin).

8.1.2 Équations de Hamilton

La section (8.1.1) pose les fondements de la formulation lagrangienne de la Mécanique. De celle-ci, on peut déduire une autre présentation qui permettra l'élaboration précise de la Mécanique Quantique, appelée formulation hamiltonienne.

Le point d'articulation entre les formulations lagrangienne et hamiltonienne est l'introduction du moment conjugué, p , associé à une coordonnée q . Par définition, pour un système à un seul degré de liberté :

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} . \quad (8.27)$$

Pour un nombre arbitraire de coordonnées, par exemple N points matériels dans \mathbb{R}^3 , $l \equiv (j, u)$, $l = 1, 2, \dots, N$, $u = x, y, z$, on définit un moment conjugué pour chaque coordonnée :

$$p_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} , \quad (l = 1, 2, \dots, 3N) . \quad (8.28)$$

En l'absence de champ magnétique, $L = \sum_l (1/2) m_j \dot{q}_l^2 - V(\{q_l\})$, de sorte que le moment conjugué p_l de q_l n'est autre que la quantité de mouvement usuelle :

$$p_l = m_j \dot{q}_l , \quad (l = 1, 2, \dots, 3N) ; \quad (8.29)$$

en revanche, en présence de $\vec{B} \neq 0$, moment conjugué et quantité de mouvement diffèrent ; pour une particule dans \mathbb{R}^3 on a (voir (8.13)) :

$$\vec{p} = m\vec{v} + Q\vec{A} \iff m\vec{v} = \vec{p} - Q\vec{A} . \quad (8.30)$$

Ceci étant, on définit une nouvelle fonction, appelée Hamiltonien et notée H :

$$H = \sum_{l=1}^{3N} p_l \dot{q}_l - L , \quad (8.31)$$

dont on va voir qu'elle représente l'énergie du système. En effet, compte tenu de (8.29), la somme dans (8.31) vaut $\sum_l (m_j \dot{q}_l) \dot{q}_l = 2T = \sum_l p_l^2 / m_j$; comme $L = T - V$, il vient :

$$H = T + V = \text{énergie mécanique} . \quad (8.32)$$

Ce résultat reste vrai en présence d'un champ magnétique. En effet, revenant à des notations vectorielles (une seule particule de charge Q dans \mathbb{R}^3), (8.31) s'écrit plus simplement :

$$H = \vec{p} \cdot \vec{v} - L . \quad (8.33)$$

Compte tenu de (8.16), et en éliminant la vitesse au profit de \vec{p} suivant (8.30), on a :

$$H = \frac{1}{m} \vec{p} \cdot (\vec{p} - Q\vec{A}) - \frac{1}{2m} (\vec{p} - Q\vec{A})^2 + V(\vec{r}) + Q\phi - \frac{Q}{m} \vec{A} \cdot (\vec{p} - Q\vec{A}) , \quad (8.34)$$

¹⁷i. e. si q_{l_0} ne figure pas dans L .

soit :

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - Q\vec{A})^2 + V(\vec{r}) + Q\phi . \quad (8.35)$$

Ici, le produit $\vec{p} \cdot \vec{v}$ n'est pas égal à $2T$, mais H reste toujours égal à l'énergie totale (le terme carré dans (8.35) est précisément, selon (8.30), l'énergie cinétique $(1/2)m\vec{v}^2$).

Le passage de L à H par la relation (8.31) est du même genre¹⁸ que celles qui, en Thermodynamique, permettent de passer d'une fonction d'état à une autre (par exemple de l'énergie E à l'énergie libre de Helmholtz $F = E - TS$). En particulier, alors que les variables naturelles de L sont les q_l et les \dot{q}_l , celles de H sont les q_l et leurs moments conjugués p_l . Cette substitution est évidente quand on calcule les différentielles. Selon (8.31), celle de H est :

$$dH = \sum_{l=1}^{3N} \left[\dot{q}_l dp_l + p_l d\dot{q}_l - \left(\frac{\partial L}{\partial q_l} dq_l + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} d\dot{q}_l \right) \right] . \quad (8.36)$$

Compte tenu de la définition (8.28) des moments conjugués, il reste :

$$dH = \sum_{l=1}^{3N} \left[\dot{q}_l dp_l - \frac{\partial L}{\partial q_l} dq_l \right] . \quad (8.37)$$

La différentielle de H est bien une forme linéaire des accroissements des q_l et des p_l . De plus, (8.37) montre que :

$$\frac{\partial H}{\partial q_l} = -\frac{\partial L}{\partial q_l} , \quad \frac{\partial H}{\partial p_l} = \dot{q}_l . \quad (8.38)$$

Le pendant des équations dynamiques de Lagrange en formulation de Hamilton est facile à obtenir. En introduisant les moments conjugués dans (8.26), on obtient :

$$\frac{d}{dt} p_l - \frac{\partial L}{\partial q_l} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \dot{p}_l = \frac{\partial L}{\partial q_l} \quad (l = 1, 2, \dots, 3N) . \quad (8.39)$$

Les équations (8.38) deviennent alors :

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l} , \quad \dot{p}_l = -\frac{\partial H}{\partial q_l} , \quad (l = 1, 2, \dots, 3N) . \quad (8.40)$$

Ces équations sont appelées équations canoniques de Hamilton et sont au nombre de $6N$. On a ainsi remplacé les $3N$ équations de Lagrange du second ordre par rapport au temps par $6N$ équations du premier ordre ; au total, la résolution complète suppose bien la connaissance préalable de $6N$ conditions initiales.

Le deuxième groupe d'équations (8.40) exhibe un résultat d'une extrême importance pratique : si H ne dépend pas d'une certaine coordonnée q_{l_0} , alors le moment conjugué correspondant p_{l_0} est une constante du mouvement. Une telle coordonnée est appelée cyclique¹⁹. L'indépendance de H vis-à-vis de q_{l_0} traduit une *symétrie* du système, d'où la relation fondamentale entre *symétrie* et *invariance* :

$$\frac{\partial H}{\partial q_{l_0}} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad p_{l_0} = \text{C}^{\text{ste}} \quad \longleftrightarrow \quad \text{symétrie} \quad \Longleftrightarrow \quad \text{invariance} . \quad (8.41)$$

À titre d'exemple, pour une particule de masse m avec l'énergie potentielle $V(\vec{r})$, le Hamiltonien est, dans les notations plus familières :

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) . \quad (8.42)$$

¹⁸Ces transformations s'appellent transformations de Legendre.

¹⁹car il s'agit souvent d'un angle, auquel cas le système possède une symétrie de rotation autour de l'axe perpendiculaire au plan de définition de l'angle.

Il y a 6 équations de Hamilton, qui s'écrivent vectoriellement comme suit :

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{m}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{r}}, \quad (8.43)$$

soit $\vec{p} = m\vec{v}$ d'une part, $m d\vec{v}/dt = \vec{F}$, d'autre part. Supposons maintenant que $V(\vec{r})$ ne dépend en fait que de z (par exemple : une particule de charge Q dans un champ électrostatique $\vec{\mathcal{E}}$ parallèle à Oz , donnant $V = -Q\mathcal{E}z$ à une constante additive près) ; alors p_x et p_y sont des constantes du mouvement : la force étant dirigée le long de Oz , les composantes transverses de l'impulsion ne changent pas au cours du mouvement.

À ce stade, il est facile de montrer comment s'exprime la conservation de l'énergie le long de la trajectoire effectivement suivie pour un système isolé. Formellement, entre deux instants t et $t + dt$, les coordonnées et les moments varient de dq_l et dp_l , cependant que H varie de dH . En prenant le cas le plus général où il existe un champ externe variable dans le temps (alors H contient une dépendance explicite du temps), la variation dH entre t et $t + dt$ est donnée par :

$$dH = \frac{\partial H}{\partial t} dt + \sum_{l=1}^{3N} \left[\frac{\partial H}{\partial q_l} dq_l + \frac{\partial H}{\partial p_l} dp_l \right]. \quad (8.44)$$

Puisque les accroissements des coordonnées et des moments sont ceux associés à l'accroissement dt du temps, on a $dq_l = \dot{q}_l dt$ et $dp_l = \dot{p}_l dt$. Si maintenant il s'agit de la trajectoire réelle, les équations canoniques de Hamilton (8.40) sont satisfaites et la sommation s'annule identiquement ; il reste alors :

$$dH = \frac{\partial H}{\partial t} dt. \quad (8.45)$$

Ce résultat est général, mais il ne vaut que *le long de la trajectoire réelle*, évidemment. Faisons maintenant l'hypothèse que le champ externe est indépendant du temps (système dit isolé, quoique soumis à un champ) ; alors H est indépendant du temps et il vient :

$$dH = 0 \quad \text{entre deux points infiniment voisins d'une trajectoire réelle.} \quad (8.46)$$

De proche en proche, on en déduit que l'énergie se conserve le long de la trajectoire et prend la même valeur pour tout couple de points, voisins ou non. Cette valeur constante est fixée une fois pour toutes par la donnée des conditions initiales. Le fait que H est une constante du mouvement introduit une relation explicite entre les variables dynamiques :

$$H(q_l, p_l) = E; \quad (8.47)$$

autrement dit, quand le temps passe les q_l et les p_l varient, mais leur variation est telle que la fonction H garde la même valeur. Le mouvement (dans l'espace des phases²⁰ de dimension $6N$) se développe donc sur la surface à $6N - 1$ dimensions d'énergie constante et égale à la valeur E fixée par l'état initial. Plus généralement, toute constante du mouvement scalaire (une composante de moment cinétique par exemple, quand il existe une symétrie axiale de rotation) réduit d'une unité la dimension du sous-espace contenant l'orbite dans l'espace des phases.

8.1.3 Équation de Hamilton - Jacobi

L'action S est reliée au Lagrangien L , qui permet la définition du Hamiltonien H ; il existe donc forcément une relation entre S et H , qui va maintenant être établie.

La stationnarité de l'action conduit aux équations de Lagrange, obtenues en considérant toutes les lignes reliant deux points fixés atteints à deux instant également fixés. Un autre point de vue est aussi possible, en se posant d'emblée la question suivante : pour toute trajectoire *réelle*, comment varie l'action en fonction du point terminal, le point de départ étant fixé ? Pour y répondre, il suffit de faire varier les paramètres du point final, coordonnée et temps.

Examinons d'abord la dépendance vis-à-vis de q seul, prenant pour simplifier un seul degré de liberté. Pour ceci, il suffit de considérer deux trajectoires réelles infiniment voisines l'une de l'autre, partant d'un même

²⁰Les trajectoires dans l'espace des phases ont des propriétés remarquables, voir note 32.

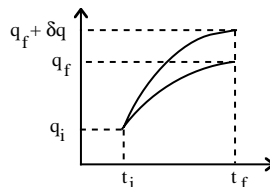


Figure 8.2: Variation d'une trajectoire en fonction de la coordonnée du point terminal.

point q_i et aboutissant au même instant t_f l'une à q_f , l'autre à $q_f + \delta q$ (voir figure 8.2), et de calculer la variation correspondante δS de l'action²¹. Suivant la même démarche que dans la sous-section 8.1.1 (variation, intégration par parties), on trouve à nouveau l'expression (8.6) mais, compte tenu des conditions aux bornes maintenant différentes (le terme tout intégré n'est pas nul) et du fait que les deux trajectoires sont réelles (l'intégrand est nul), il reste ici :

$$\delta S_{i,f} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q , \quad (8.48)$$

δq désignant toujours la valeur finale de l'écart entre les deux trajectoires réelles. Cette équation montre que la dérivée partielle de S par rapport à la coordonnée q , pour t fixé n'est autre que le moment conjugué :

$$\frac{\partial S}{\partial q} = p . \quad (8.49)$$

La dérivée partielle de S par rapport au temps se trouve comme suit. Par la définition même de l'action, on a :

$$\frac{dS}{dt} = L . \quad (8.50)$$

Par ailleurs, pour toute fonction $q(t)$, la variation totale de l'action le long de la trajectoire (réelle ou fictive) est :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q} \frac{dq}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + p\dot{q} , \quad (8.51)$$

où (8.49) a été pris en compte. Le rapprochement de (8.50), (8.51) et de la définition (8.31) de H ($H = p\dot{q} - L$) montre que :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H . \quad (8.52)$$

Ainsi, pour un degré de liberté, la différentielle de l'action est :

$$dS = p dq - H dt . \quad (8.53)$$

Bien sûr, tout ceci se généralise pour un nombre quelconque de degrés de liberté :

$$\frac{\partial S}{\partial q_l} = p_l , \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H , \quad dS = \sum_l p_l dq_l - H dt . \quad (8.54)$$

En se souvenant que H est une fonction des q_l et des p_l , $H(\{q_l\}, \{p_l\})$, et en remplaçant p_l par $\partial S / \partial q_l$ conformément à (8.54), on peut finalement rassembler ces équations en une seule :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H \left(q_l, \frac{\partial S}{\partial q_l} \right) , \quad (8.55)$$

²¹ Visiblement, ces deux trajectoires n'ont pas la même énergie : leurs pentes diffèrent en t_i (si tel n'était pas le cas, les deux trajectoires seraient confondues puisqu'elles sont toutes deux réelles).

qui est précisément l'équation de Hamilton - Jacobi²². Cette équation est d'une grande complexité : elle est aux dérivées partielles, et non-linéaire puisque H est quadratique en p , donc par rapport aux dérivées spatiales de S . La raison principale de son introduction ici est la suivante : cette équation présente de grandes analogies avec l'équation de Schrödinger (et d'ailleurs, c'est en raisonnant par analogie que Schrödinger induisit son illustre équation). En outre, on verra que dans la limite quasi-classique, la fonction d'onde est de la forme $\sim e^{iS/\hbar}$, S satisfaisant précisément une équation du même type que (8.55) – où apparaissent de surcroît des termes correctifs²³ en \hbar . L'un de ces termes est en facteur de la dérivée d'ordre le plus élevé, ce qui constitue une perturbation dite *singulière* (voir [26], §17).

Il est facile (et utile) de vérifier que l'action d'une particule libre $S = m(q - q_0)^2/(t - t_0)$ (voir (8.22)) satisfait effectivement (8.55).

Remarques

1. Il ne faut pas déduire de ce qui précède que la condition de stationnarité de l'action en tant que fonctionnelle de la trajectoire – condition qui donne la trajectoire réelle – s'écrit $dS = 0$ où dS est la différentielle de S comme fonction de q et de t , (8.54). En effet, écrire cette dernière condition donne, pour une particule isolée (énergie constante) à un seul degré de liberté :

$$pdq - Hdt = 0 \iff \frac{dq}{dt} = \frac{E}{p}, \quad (8.56)$$

où E désigne la valeur constante de l'énergie²⁴. En fait, la condition $dS = 0$ exprime la constance de l'action $S(q, t)$ et donne donc la cinématique d'une surface d'action constante ; (8.56) exprime la relation stricte entre q et t assurant que si t varie, q ne varie pas n'importe comment, de sorte que la valeur de la fonction $S(q, t)$ ne change pas. Une telle surface est appelée surface d'équiaction. Le rapport E/p , qui donne selon (8.56) la vitesse de déplacement d'un point de cette surface, est une "vitesse d'action", v_σ – dont Hamilton subodorait²⁵, dès *ca.* 1850, qu'elle pouvait être l'équivalent de la vitesse de phase d'une onde donnant le déplacement d'un point d'une surface d'équiphasse ($v_\phi = \omega/c$). Notons que v_σ est tributaire de la définition de l'origine des énergies²⁶ qui, en principe – du moins en Mécanique de Galilée – ne joue aucun rôle physique.

Dans le cas d'une particule libre, p est une constante du mouvement (tout comme E), de sorte que l'action calculée le long de la trajectoire est $S(q, t) = p(q - q_0) - E(t - t_0) + S(q_0, t_0)$. On a ici $v_\sigma = [p^2/(2m)]/p = v/2 \neq v$, vitesse de la particule libre.

2. Le Lagrangien relativiste peut se deviner en suivant la même démarche que celle qui a conduit au Lagrangien galiléen, avec notamment l'objectif de retomber sur ses pieds en retrouvant²⁷ $d\vec{p}/dt = \vec{F}$, où $\vec{p} = \gamma m\vec{v}$. On montre ainsi que l'on peut prendre :

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \beta^2} - V, \quad (8.57)$$

toujours à un terme additif près qui est une dérivée totale en temps (en particulier, on peut ajouter une constante, par exemple mc^2 , auquel cas le développement à $\beta \ll 1$ reproduit strictement l'expression non-relativiste de L). En tout cas, le moment conjugué $\vec{p} = \partial L / \partial \vec{v}$ ressort bien comme $\vec{p} = \gamma m\vec{v}$ (indépendamment de l'éventuelle constante additive ajoutée à L) et $H = \vec{p} \cdot \vec{v} - L$ est l'énergie totale $\gamma mc^2 + V$. La vitesse d'action est encore le rapport $E/p = E/(\gamma mv) = c^2/v$. Pour une particule libre, la relation stricte entre la vitesse de la particule et la vitesse d'équiaction est $v_\sigma v = c^2$: les surfaces d'équiaction se déplacent toujours plus vite que la lumière !

²²Mathématicien allemand né à Potsdam, Carl Gustav Jacobi (1804 - 1851) fut, avec Niels Henrik Abel, le fondateur de la théorie des fonctions elliptiques dont il donna de nombreuses applications aux branches les plus diverses des mathématiques, notamment la Théorie des nombres.

²³D'un autre côté, les tentatives pour interpréter ces corrections comme un "potentiel quantique" n'ont pas abouti (voir [28], ch. 7 – *Peut-on se passer de la fonction d'onde ?*)

²⁴De toute façon, on a déjà remarqué que deux trajectoires variées ne pouvaient pas avoir la même énergie, les tangentes pouvant différer aux extrémités fixes.

²⁵et il avait raison !

²⁶Ce n'est pas le cas pour une vitesse de groupe qui, par analogie, serait définie comme $v_g = dE/dp$ (avec $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$, on retrouve la relation connue en Électromagnétisme $v_g = d\omega/dk$) ...

²⁷ $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$, $\beta = \|\vec{v}\|/c$; m désigne toujours la masse (propre) de la particule.

3. L'action S peut donc être écrite comme une fonction des q_l et du temps t , $S(q_l, t)$, sans faire référence à une trajectoire réelle particulière – tout comme, pour une particule à une dimension, le Hamiltonien H s'écrit $p^2/(2m) + V(q)$ et est ainsi une certaine fonction de q et p , sans aucune mention particulière de la dépendance de ces variables par rapport au temps. Cette fonction S devient une autre fonction, du temps seul cette fois, quand on y injecte pour chaque q_l la loi horaire $q_l(t)$ obtenue par intégration des équations du mouvement. La nouvelle fonction ainsi construite peut être notée $S_{\text{traj}}(t)$ pour la différencier et reste paramétrée par les valeurs des coordonnées et des vitesses à l'instant initial ; les extrémités étant fixées, $S_{\text{traj}}(t)$ est la valeur extrême (en général minimale) de l'action.
4. Le principe variationnel conduisant aux équations de Lagrange est une forme moderne plus générale que le principe historique énoncé par Maupertuis (*ca.* 1720). C'est cette forme un peu restrictive qui a guidé les pionniers de la Mécanique Ondulatoire dans leurs tout premiers pas ; ne serait-ce que dans un but utilitaire, il est bon de montrer comment elle peut s'obtenir à partir du principe plus général.

Pour un système conservatif d'énergie constante E et pour le sous-ensemble de trajectoires conservant l'énergie (toutes situées par conséquent sur la surface d'équation $H(q, p) = E$), on a :

$$S = \int_0^t L dt = \int_0^t (p\dot{q} - H) dt = \int_0^t (p\dot{q} - E) dt = \int_{M_0}^{M_t} p dq - Et \equiv \mathcal{J} - Et , \quad (8.58)$$

où a été définie l'action dite de Maupertuis \mathcal{J} . Pour toute variation des trajectoires sur la surface d'énergie constante, il est équivalent de faire varier L ou \mathcal{J} ; dès lors, on obtient en guise de principe variationnel la forme simplifiée de Maupertuis (Principe de Moindre Action), qui s'écrit :

$$\delta \mathcal{J} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \delta \int_{M_0}^{M_t} p dq = 0 . \quad (8.59)$$

Il se trouve qu'une autre forme est encore possible. En effet :

$$S = \int_0^t L dt = \int_0^t (T - V) dt = \int_{M_0}^{M_t} (2T - H) dt = \int_{M_0}^{M_t} 2T dt - Et , \quad (8.60)$$

et la variation de S à t fixé donne :

$$\delta \int_0^t 2T dt = 0 \quad \text{avec } H(q, p) = E . \quad (8.61)$$

Maintenant, les variations de q et \dot{q} ne sont plus indépendantes ; en effet, comme la variation est restreinte à l'ensemble des fonctions conservant l'énergie, il faut prendre en compte la condition $H(q, p = m\dot{q}) = E$. Clairement, cette relation permet d'exprimer q en fonction de \dot{q} ou inversement, de sorte que la mise en œuvre est en fait un peu plus compliquée formellement que précédemment²⁸.

En dépit des apparences, les formes (8.59) et (8.61) sont identiques en vertu de suite de relations :

$$2T dt = 2(E - V) \frac{dq}{v} = 2(E - V) \frac{dq}{\sqrt{(2/m)(E - V)}} = \sqrt{2m(E - V)} dq \equiv p dq . \quad (8.62)$$

8.1.4 Crochets de Poisson

Soit une fonction $f(\{q_l\}, \{p_l\}, t)$ représentant une grandeur physique, les q_l et les p_l étant certaines fonctions du temps. La dérivée totale en temps de f est :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_l \left(\frac{\partial f}{\partial q_l} \dot{q}_l + \frac{\partial f}{\partial p_l} \dot{p}_l \right) . \quad (8.63)$$

Supposons maintenant que les coordonnées et les moments varient selon les lois horaires définissant une trajectoire réelle. De ce fait, les équations de Hamilton sont satisfaites et l'expression (8.63) devient :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_l \left(\frac{\partial f}{\partial q_l} \frac{\partial H}{\partial p_l} - \frac{\partial f}{\partial p_l} \frac{\partial H}{\partial q_l} \right) \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} . \quad (8.64)$$

²⁸On pourrait d'ailleurs utiliser la méthode des multiplicateurs de Lagrange, ce qui reviendrait à relaxer la contrainte ci-dessus pour ne la reprendre en compte qu'après variation : ceci ne serait rien d'autre que le processus variationnel utilisé en premier !

La notation $\{f, H\}$ n'est qu'un raccourci d'écriture et s'appelle par définition le crochet de Poisson de f avec H . Si f ne dépend pas explicitement du temps, on a :

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} , \quad (8.65)$$

d'où l'affirmation : pour qu'une grandeur indépendante du temps soit une constante du mouvement, il faut et suffit que son crochet de Poisson avec le Hamiltonien soit nul.

D'une façon générale, on définit²⁹ le crochet de Poisson pour deux fonctions quelconques f et g :

$$\{f, g\} = \sum_l \left(\frac{\partial f}{\partial q_l} \frac{\partial g}{\partial p_l} - \frac{\partial f}{\partial p_l} \frac{\partial g}{\partial q_l} \right) . \quad (8.67)$$

Le commutateur de deux opérateurs, rencontré par la suite en Mécanique Quantique, est l'équivalent (au facteur $i\hbar$ près) du crochet classique³⁰.

8.2 La règle de Planck pour l'oscillateur harmonique

Il s'agit ici de réinterpréter la proposition de Planck pour les modes propres du champ électromagnétique dans une cavité, supposant que les échanges d'énergie ne peuvent se faire que par quantum $h\nu$, où ν est la fréquence propre d'un oscillateur. Revenant pour fixer les idées au cas d'un oscillateur matériel de masse m , examinons sous un autre angle les conséquences de l'hypothèse de Planck. En désignant par $\omega = 2\pi\nu$ la pulsation propre de l'oscillateur, le Hamiltonien de l'oscillateur est³¹ :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 . \quad (8.69)$$

L'oscillateur isolé a une énergie constante, dont la valeur E est fixée une fois pour toutes par les conditions initiales. Pour une valeur de l'énergie ainsi déterminée, les trajectoires³² dans l'espace des phases (q, p) sont donc telles que :

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = E . \quad (8.70)$$

Il s'agit d'ellipses paramétrées par E , dont l'équation cartésienne³³ est (voir figure 8.3) :

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2E/(m\omega^2)} = 1 . \quad (8.72)$$

²⁹ Attention, cette définition varie d'un auteur à l'autre par son signe. On trouve aussi :

$$\{f, g\} = \sum_l \left(\frac{\partial f}{\partial p_l} \frac{\partial g}{\partial q_l} - \frac{\partial f}{\partial q_l} \frac{\partial g}{\partial p_l} \right) , \quad (8.66)$$

qui est l'opposé du crochet défini en (8.67).

³⁰ Avec la définition (8.66), on a précisément :

$$\{b, \sharp\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\Delta, \Diamond] , \quad (8.68)$$

où Δ et \Diamond sont les représentants quantiques des grandeurs physiques classiques b et \sharp . Il en résulte que l'équation (8.65) a aussi son équivalent quantique, appelée équation de Heisenberg.

³¹ en prenant l'origine de l'énergie potentielle au point d'équilibre $q = 0$. Avec ce choix, l'énergie est toujours positive ou nulle, ce dernier cas correspondant à la particule classique au repos en son point d'équilibre. Un tel "repos absolu" est impossible en Mécanique Quantique : il violerait le principe d'incertitude de Heisenberg.

³² Toute trajectoire dans l'espace des phases possède des propriétés remarquables découlant directement de l'unicité des solutions des équations dynamiques, une fois fixées les conditions initiales. En particulier, une trajectoire donnée est ou bien une courbe fermée (pour un mouvement périodique) ou une courbe ouverte ne se croisant pas elle-même. Pour deux jeux de conditions initiales distincts, les deux trajectoires qui en sont issues ne peuvent se croiser. Ces propriétés ne tiennent que pour les trajectoires dans l'espace des phases ; leurs "projections" dans l'espace réel ne sont pas soumises à de telles contraintes. Par exemple, dans le cas du champ coulombien traité en dynamique relativiste (voir sous-section 8.3.3), la trajectoire $r(\theta)$ est une rosette qui se recoupe elle-même régulièrement (voir figure 8.4).

³³ L'équation cartésienne d'une ellipse dans le plan xOy est :

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 , \quad (8.71)$$

où a et b sont les demi-grand et -petit axes.

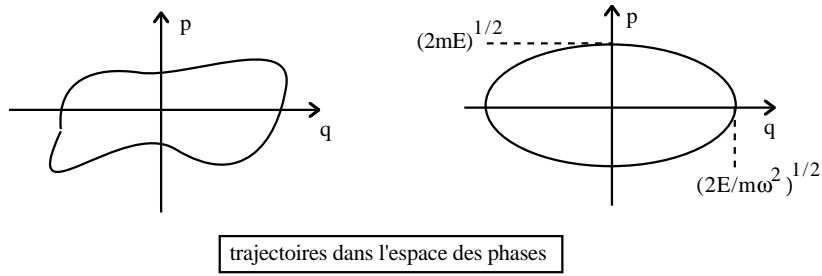


Figure 8.3: Trajectoires dans l'espace des phases pour un système périodique à un degré de liberté q (à droite, l'oscillateur harmonique).

Classiquement, l'énergie E peut prendre n'importe quelle valeur et ces trajectoires forment donc un ensemble dense. Au contraire, l'hypothèse révolutionnaire de Planck revient à affirmer que l'oscillateur ne peut absorber ou émettre de l'énergie que par quantités finies $h\nu = h(\omega/2\pi) \equiv \hbar\omega$. C'est aussi dire que l'énergie de l'oscillateur est forcément un multiple entier du produit $h\nu$ (à une constante additive près) ; comme elle est une quantité positive ou nulle, elle est de la forme $n h\nu$ où n est un entier naturel positif ou nul³⁴. Les trajectoires possibles forment alors un ensemble discret (toujours infini, mais maintenant dénombrable) : tout comme dans la Théorie de Bohr, l'hypothèse de quantification revient à passer au peigne fin l'ensemble des trajectoires classiques pour ne retenir que celles satisfaisant cette exigence.

Dans le cas présent, l'intégration des équations du mouvement donne :

$$q(t) = A \cos(\omega t + \phi) , \quad p(t) = -m\omega A \sin(\omega t + \phi) . \quad (8.73)$$

Les constantes d'intégration A et ϕ sont obtenues par calage sur les conditions initiales. En particulier, A est reliée à l'énergie E suivant³⁵ :

$$\frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = E . \quad (8.74)$$

Par ailleurs, on peut toujours prendre $\phi = 0$ en choisissant convenablement l'origine des temps.

La constante de Planck est homogène à une action, tout comme l'intégrale \mathcal{J} définie en (8.58). En calculant cette intégrale sur une période de l'oscillateur, on trouve³⁶ :

$$\mathcal{J} \equiv \oint p dq = \int_0^{2\pi/\omega} p(t) \dot{q}(t) dt = \pi m \omega A^2 = \frac{2\pi E}{\omega} = \frac{E}{\nu} , \quad (8.76)$$

les deux fonctions $p(t)$ et $q(t)$ étant données par (8.73). Ainsi, admettre $E = n h\nu$ équivaut à admettre :

$$\oint p dq = n h\nu . \quad (8.77)$$

Cette relation a une interprétation géométrique évidente : elle signifie que la surface des orbites (ici des ellipses) dans l'espace des phases est un multiple entier de h .

³⁴On verra par la suite que l'oscillateur quantique dans son état de plus basse énergie a une énergie *non-nulle*, en accord avec le principe d'incertitude (repos absolu impossible).

³⁵(8.74) s'obtient en notant que quand la vitesse est nulle (soit $p = 0$), l'énergie se réduit à l'énergie potentielle, qui vaut alors $(1/2)m\omega^2 A^2$. Par ailleurs, si on écarte l'oscillateur de x_0 par rapport à sa position d'équilibre et qu'il est lâché à $t = 0$ sans vitesse initiale, on a $\phi = 0$ et $A = x_0$.

³⁶(8.76) peut d'ailleurs être obtenue d'une autre manière, en calculant l'intégrale suivante :

$$\oint p dq \equiv \oint \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2 q^2]} dq = 2 \int_{q_-}^{q_+} \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2 q^2]} dq , \quad (8.75)$$

où q_- et q_+ ($q_- < q_+$) sont les valeurs extrêmes de la coordonnée lors du mouvement (ce sont les racines de l'équation $E - (1/2)m\omega^2 q^2 = 0$). La dernière intégrale vaut $\pi E/\omega$.

8.3 Les règles de quantification de Bohr - Wilson - Sommerfeld

8.3.1 Généralisation de la règle de Bohr

Wilson, puis peu après Sommerfeld, ont proposé d'appliquer la relation de quantification $\oint p dq = nh$ à *tous* les degrés de liberté d'un système³⁷. Pour un système dont la situation est définie par les N coordonnées q_k , on adopte ainsi :

$$\mathcal{I}_k \equiv \oint p_k dq_k = n_k h \quad (n_k \text{ entier}, k = 1, 2, \dots, N) . \quad (8.78)$$

Les n_k sont appelés nombres quantiques ; ce sont des entiers positifs, ou positifs ou nuls, selon les cas (on tranche au coup par coup par analyse de la quantité $p_k dq_k$). L'intégrale porte sur une période complète de la variable q_k , laquelle peut ne pas être la même pour toutes³⁸ les coordonnées.

Il vaut la peine de remarquer que l'utilisation de ces conditions de quantification évacue de fait (partiellement) la nécessité de recourir à des conditions initiales (inconnues !) afin de déterminer les constantes d'intégration apparaissant naturellement dans la résolution de tout problème de Mécanique classique. Dans le cas de l'oscillateur harmonique à une dimension, il y a une seule condition du genre (8.78), qui fixe la valeur de l'énergie : par référence avec le problème posé d'un point de vue strictement classique, on voit que la condition (8.78) revient à poser une interdépendance entre vitesse et position initiales, alors que classiquement, tous les couples indépendants sont possibles.

8.3.2 Application à l'atome d'hydrogène

La théorie de Bohr rend compte, par construction, de ce fait essentiel : l'existence d'un spectre de raies. Toutefois, toutes les raies observées ne sont pas retrouvées dans cette approche simple ; par exemple la raie d'émission correspondant à la transition $n = 3 \rightarrow n = 2$ de la série de Balmer (appelée raie H_α) est en fait un doublet de deux raies très voisines séparées d'environ 11 GHz. L'idée de quantifier davantage de degrés de liberté repose sur l'espoir que l'accroissement de la complexité théorique permettra de rendre compte de la richesse des spectres observés. On verra qu'il n'en est rien – du moins tant que le calcul est fait dans un cadre non-relativiste.

L'objectif est donc ici de quantifier l'atome le plus simple, en élargissant l'ensemble des trajectoires possibles. Bohr n'avait considéré que des orbites circulaires, alors que le champ de force attractif en r^{-2} donne, pour les mouvements confinés, des trajectoires elliptiques (qui, lorsque leur excentricité est nulle, deviennent en effet des cercles).

Pour simplifier, le noyau (proton) est supposé infiniment massif et donc immobile³⁹. La trajectoire de l'électron étant plane (conservation du vecteur moment cinétique), le système n'a de fait que deux degrés de liberté. Pour des raisons de symétrie, le choix des coordonnées polaires du plan, (r, θ) s'impose. Les composantes de la vitesse sont \dot{r} et $r\dot{\theta}$. Le Lagrangien est donc :

$$L = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 - V = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - \frac{-e'^2}{r} . \quad (8.79)$$

Il y a ici deux équations de Lagrange, qui s'écrivent :

$$\frac{d}{dt}(m\dot{r}) + \frac{e'^2}{r^2} = 0 , \quad \frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = 0 , \quad (8.80)$$

³⁷Il est sous-entendu que ce genre de relation ne s'applique que pour les mouvements confinés (liés) où il est possible de définir une période pour chaque degré de liberté.

³⁸Pour l'hydrogène traité en dynamique relativiste (voir sous-section 8.3.3), le rayon vecteur r ne reprend pas la même valeur lorsque l'angle θ a augmenté de 2π : la trajectoire est une rosette, une courbe qui ressemble à une ellipse en précession (voir figure 8.4).

³⁹La prise en compte de la masse finie du noyau se fait en remplaçant partout m par la masse réduite μ .

cependant que les deux moments conjugués sont :

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad , \quad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} \quad . \quad (8.81)$$

On reconnaît en p_θ la valeur du moment cinétique mesuré suivant un axe perpendiculaire à la trajectoire ; ayant toujours le choix du sens positif pour les angles dans le plan, on convient d'orienter cette axe de sorte que $\dot{\theta}$ soit positif, et il en est de même pour p_θ . Par ailleurs, on note que les coordonnées n'étant pas rectangulaires, l'énergie cinétique n'a pas la forme simple spécifique de l'usage de coordonnées cartésiennes. On examine ici les mouvements liés de l'électron, c'est-à-dire les trajectoires qui restent à distance finie⁴⁰ du proton (ce sont des ellipses) ; avec la convention $V(+\infty) = 0$, ceci suppose que l'énergie mécanique E est *négative*, soit $T + V < 0 \iff T < |V|$.

Les conditions de quantification (8.78) sont ici au nombre de deux, à savoir :

$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h \quad , \quad \oint p_r dr = n_r h \quad . \quad (8.82)$$

La quantification sur l'angle est immédiate, puisque p_θ est une constante du mouvement⁴¹, notée J . Il vient donc immédiatement :

$$\mathcal{J}_\theta = \oint p_\theta d\theta = J \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi J = n_\theta h \quad , \quad (8.84)$$

d'où la quantification du moment cinétique, déjà posée par Bohr afin de reproduire la série de Balmer⁴² :

$$J = n_\theta \hbar \quad (n_\theta = 1, 2, \dots) \quad . \quad (8.85)$$

n_θ est le nombre quantique azimutal, pour rappeler qu'il est lié à la quantification de l'angle polaire.

La quantification de la variable radiale r est moins simple à expliciter. Le calcul part de (voir (8.81)) :

$$\mathcal{J}_r = \oint m\dot{r} dr \quad . \quad (8.86)$$

La trajectoire dans le plan est définie par la fonction polaire $r(\theta)$, à trouver par la suite. En notant simplement r' la dérivée $dr/d\theta$, l'intégrale \mathcal{J}_r s'écrit :

$$\mathcal{J}_r = \int_0^{2\pi} mr'^2 \dot{\theta} d\theta = J \int_0^{2\pi} \frac{r'^2}{r^2} d\theta \quad , \quad (8.87)$$

où on a utilisé $\dot{\theta} = J/(mr^2)$. Pour expliciter l'intégrale, il faut connaître la fonction $r(\theta)$, obtenue par intégration des équations du mouvement (8.80). L'élimination de θ au profit de r et J permet d'écrire⁴³ l'équation différentielle suivante pour la fonction $r(\theta)$:

$$\frac{r''}{r^2} - 2\frac{r'^2}{r^3} - \frac{1}{r^3} + \frac{me'^2}{J^2} = 0 \quad . \quad (8.88)$$

Cette équation non-linéaire se ramène à une équation linéaire très simple en changeant de fonction inconnue, en posant $u(\theta) = 1/r(\theta)$; en effet, on trouve que u satisfait :

$$u'' + u = +\frac{me'^2}{J^2} \quad . \quad (8.89)$$

⁴⁰Le champ de force attractif en $1/r^2$ donne des trajectoires coniques (ellipses, paraboles ou hyperboles).

⁴¹ L étant indépendant de θ , l'invariance du moment cinétique se traduit par l'équation de Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} - 0 = 0 \quad \iff \quad \dot{p}_\theta = 0 \quad \iff \quad p_\theta = \text{Cste} = J \quad . \quad (8.83)$$

θ est une variable cyclique. Le caractère cyclique d'une variable exprime une propriété de symétrie et produit l'invariance dans le temps du moment correspondant. Il y a donc équivalence entre propriété de symétrie et invariance.

⁴²La valeur $n_\theta = 0$ est impossible : elle correspond à une trajectoire en segment de droite, l'électron traversant périodiquement le noyau (!?!).

⁴³Il faut au préalable exprimer les dérivées temporelles \dot{r} , \ddot{r} en fonction des dérivées de r par rapport à θ ($\dot{r} = r'\dot{\theta}$, etc).

de sorte que finalement :

$$r(\theta) = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos \theta} . \quad (8.90)$$

p s'appelle traditionnellement le paramètre de la conique⁴⁴, ε est l'excentricité, qui mesure géométriquement la déformation de l'ellipse par rapport au cercle (lequel a une excentricité nulle). Ces quantités ont pour expressions⁴⁵ :

$$p = \frac{J^2}{me'^2} , \quad \varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2EJ^2}{me'^4}} < 1 . \quad (8.91)$$

En reportant l'expression (8.90) dans (8.87), on trouve :

$$\mathcal{J}_r = 2\pi \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} - 1 \right) J , \quad (8.92)$$

d'où l'on déduit, compte tenu de (8.85) :

$$\left(\frac{1}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} - 1 \right) J = n_r \hbar \iff \frac{1}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} = 1 + \frac{n_r}{n_\theta} . \quad (8.93)$$

n_r peut être nul : c'est le cas si $\dot{r} = 0$, c'est-à-dire si la trajectoire est un cercle (cas particulier de Bohr). En revenant maintenant aux définitions (8.91)), et en introduisant un entier n :

$$n = n_r + n_\theta \quad (n = 1, 2, \dots) , \quad (8.94)$$

on obtient finalement l'énergie E :

$$E = -\frac{me'^4}{2n^2\hbar^2} \equiv E_n . \quad (8.95)$$

En résumé, l'application des règles de quantification permet de définir complètement les états possibles de l'atome par deux nombres quantiques n et $k \equiv n_\theta$, eux-mêmes donnant les valeurs possibles quantifiées de l'énergie et du moment cinétique :

$$J = k\hbar , \quad E = -\frac{me'^4}{2n^2\hbar^2} , \quad n = 1, 2, \dots , \quad k = 1, 2, \dots , . \quad (8.96)$$

Pour une énergie donnée E_n (donc n fixé), il n'y a que n possibilités pour k , puisque $k = n - n_r$ et que $k \geq 1$ et $n_r \in \mathbb{N}$:

$$n \text{ fixé} , k = 1, 2, \dots , n . \quad (8.97)$$

Autrement dit, fixer l'énergie ne détermine pas *complètement* l'état de l'atome ; puisqu'il y a n états distincts⁴⁶ de même énergie, on dit que le niveau d'énergie E_n est n fois dégénéré. Les trajectoires à E fixée (soit n fixé) se distinguent par leur excentricité ε . Par rapport au cercle, elles sont d'autant plus aplaties que ε est grand, donc que l'entier k est petit, puisque compte tenu de (8.91) et (8.96), on a :

$$\varepsilon = \sqrt{1 - \frac{k^2}{n^2}} . \quad (8.98)$$

L'ellipse la plus allongée correspond à $k = 1$ ($k = 0$ donne le segment de droite éliminé antérieurement) ; $k = n$ donne le $n^{\text{ème}}$ cercle de Bohr.

L'idée de Sommerfeld était de rendre compte de la richesse des spectres observés. De ce point de vue, les résultats sont décevants : la quantification de tous les degrés de liberté fait bien apparaître plus d'états (il faut maintenant deux nombres quantiques pour spécifier complètement l'état, alors que le modèle de Bohr n'en considère qu'un, n) mais le degré supplémentaire ne fait qu'introduire une dégénérescence en énergie. Au total, il y a exactement le même nombre de niveaux d'énergie et, par la règle de Bohr $E_n - E_{n'} = h\nu$, exactement le même nombre de transitions. Du point de vue spectral, la théorie de Sommerfeld n'apporte rien de plus que celle de Bohr.

⁴⁴La notation p pour le paramètre d'une conique est traditionnelle. Ne pas confondre avec un moment conjugué !

⁴⁵Se souvenir que l'énergie E est négative. Si $(2EJ^2)/(me'^4) = -1$, l'excentricité est nulle, on retombe sur les orbites circulaires de Bohr, voir chapitre précédent.

⁴⁶différant par la valeur du moment cinétique.

8.3.3 Corrections relativistes

C'est Bohr qui attira l'attention sur le fait que les effets relativistes pouvaient être pertinents en raison de l'extraordinaire précision des mesures spectroscopiques. Pour appréhender ce point, il est utile de récrire l'expression (8.95) en y faisant apparaître l'énergie propre de l'électron :

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2 \quad (\alpha = \frac{e'^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}) \quad (8.99)$$

C'est évidemment dans les états de petit n que les effets relativistes sont les plus importants, puisque c'est quand il est près du noyau que l'électron tourne vite. Pour $n = 1$, la vitesse de l'électron est de l'ordre de $7 \times 10^{-3} c$, qui n'est pas très petit devant c . Pour cette raison, Sommerfeld entreprit le calcul relativiste – qui est évidemment nettement plus compliqué. En partant du Lagrangien relativiste donné plus haut (voir remarque 2 à la fin de la sous-section 8.1.3), on obtient les deux équations de Lagrange :

$$\frac{d}{dt} (\gamma m r^2 \dot{\theta}) = 0, \quad \frac{d}{dt} (\gamma m \dot{r}) - \frac{J}{\gamma m r^3} + \frac{e'^2}{r^2} = 0. \quad (8.100)$$

La première exprime la constance du moment cinétique ($\gamma m r^2 \dot{\theta} = J$), qui donne immédiatement la quantification :

$$J = n_\theta \hbar. \quad (8.101)$$

En éliminant le temps, on obtient une équation différentielle pour la fonction $r(\theta)$ (la méthode est essentiellement la même que dans le calcul non-relativiste), dont l'intégration donne ([29], p. 122) une fonction de même allure que celle obtenue en (8.90) :

$$r(\theta) = \frac{p'}{1 + \varepsilon' \cos(\varpi \theta)}; \quad (8.102)$$

La seule différence formelle avec le cas non-relativiste (voir (8.90)) est l'intrusion d'un certain facteur ϖ dans l'argument du cosinus au dénominateur. Les différentes quantités sont définies comme suit :

$$\varpi = \sqrt{1 - \frac{e'^4}{J^2 c^2}} = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{n_\theta^2}}, \quad p' = \frac{\varpi^2}{1 + E/(mc^2)} p \quad (8.103)$$

et :

$$\varepsilon' = \frac{\varpi^2}{1 + E/(mc^2)} \sqrt{1 + \left(1 + \frac{E}{2mc^2}\right) \frac{2EJ^2}{me'^4}}. \quad (8.104)$$

Elles redonnent⁴⁷ bien leurs équivalents non-relativistes (8.91) si l'on y fait $c = +\infty$.

L'apparition pateline du facteur ϖ dans (8.102) modifie radicalement l'allure qualitative de la trajectoire : ce n'est plus une courbe se superposant à elle-même d'une période du mouvement à l'autre. En effet, comme ϖ est (légèrement) inférieur à 1, r ne reprend pas tout à fait la même valeur quand θ varie de 2π . Dit autrement, pour que r reprenne la même valeur, il faut que θ augmente de $2\pi/\varpi \equiv 2\pi + \Delta\theta$: le périhélie avance⁴⁸ à chaque fois d'une petite quantité $\Delta\theta$ (environ 5×10^{-6} radian, voir figure 8.4 où l'effet est grossi pour la clarté du dessin). Comme $2\pi/\Delta\theta$ n'est pas entier (on ne voit pas pourquoi il le serait), le mouvement, globalement, n'est plus périodique, bien que chaque degré de liberté ait une période stricte finie (mouvement quasi-périodique).

⁴⁷Il est intéressant de noter que si J est trop petit ($J < e'^2/c \equiv \alpha\hbar$), il n'existe pas de mouvement lié ([29], eq. (39.2)). Alors ϖ devient imaginaire pur, le cos devient un cosh et la distance au centre finit par être nulle : il y a capture. Il est remarquable que la dynamique relativiste, requise pour la prise en compte d'effets *a priori* petits, ouvre la possibilité d'un phénomène exclu par l'approche classique. Il est tout aussi remarquable que les effets relativistes éliminent d'emblée le cas $n_\theta = 0$, écarté "à la main" dans le calcul non-relativiste.

⁴⁸Tout comme celui de la planète Mercure. La concordance entre la valeur observée pour ce dernier et le calcul sur la base de la Relativité restreinte est considéré comme l'une des premières preuves expérimentales – à peu près contemporaine des expériences de Kaufmann pour la mesure du rapport e/m – de la validité de cette dernière.

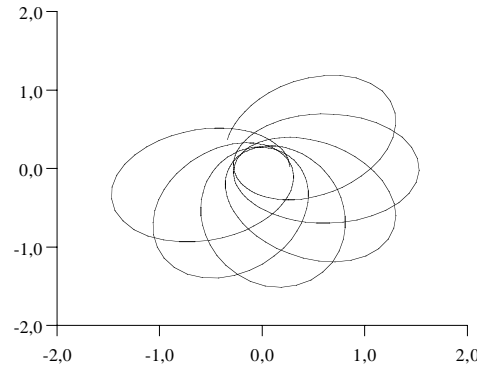


Figure 8.4: Orbite de l'électron dans le calcul relativiste ($\varpi = 0.9$, $\varepsilon = 0.7$). Pour la clarté, $1 - \varpi$ est fortement exagéré.

Plus intéressant encore est le résultat final donnant la valeur de l'énergie, résultant de la quantification de la variable radiale $\oint p_r dr = n_r h$. En posant à nouveau $n = n_r + n_\theta$ et $n_\theta = k$, le calcul explicite (lourd !) donne⁴⁹ :

$$E = \frac{\alpha^2 mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n-k+\sqrt{k^2-\alpha^2})^2}}} - mc^2 \equiv E_{n,k} . \quad (8.105)$$

Le point remarquable est le suivant : maintenant l'énergie dépend explicitement de n et de k , et non plus seulement de n : deux états de même n mais de k différents ont bien des énergies différentes, l'effet recherché par Sommerfeld !

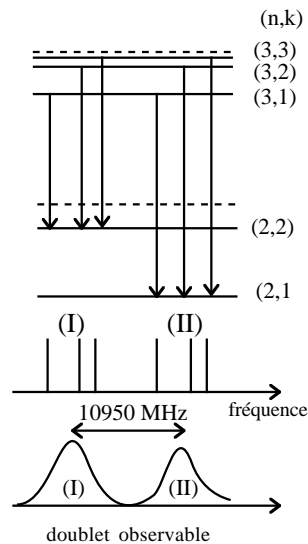


Figure 8.5: Structure fine de la raie H_α de l'hydrogène selon Sommerfeld.

Le succès de ce calcul est aussi quantitatif, puisque l'accord numérique pour la raie H_α est tout à fait remarquable. Comme $\alpha \ll 1$, il est tout aussi commode de manipuler le développement limité de l'expression (8.105). On trouve :

$$E_{n,k} = -mc^2 \frac{\alpha^2}{2n^2} \left[1 + \frac{1}{n^2} \left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4} \right) \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^4) \right] . \quad (8.106)$$

Ainsi par exemple, k variant de 1 à n , le niveau $n = 2$ de Bohr donne en fait deux niveaux très voisins, séparés de $\Delta E = \alpha^2 mc^2 / 32 + \mathcal{O}(\alpha^6) \simeq 4.5 \times 10^{-5}$ eV, soit, en fréquence, $\Delta\nu \simeq 10$ GHz, ou, en nombre d'onde,

⁴⁹On a choisi la bonne constante additive dans L pour retrouver le résultat non-relativiste (8.95) dans la limite $c \rightarrow +\infty$.

$\Delta(1/\lambda) \simeq 0.36 \text{ cm}^{-1}$. Par ailleurs, toujours en vertu du fait que k varie de 1 à n , toute transition $n+1 \rightarrow n$, de fréquence ν_0 de la théorie de Bohr va devenir un groupe de $n(n+1)$ transitions de fréquences très proches $\simeq \nu_0$ (structure fine⁵⁰). Ainsi, pour la raie H_α de l'hydrogène (la raie la plus “rouge” de la série de Balmer, $n=3 \rightarrow n=2$), les états de départ sont $n=3, k=1, 2, 3$, et les niveaux d'arrivée sont $n=2, k=1, 2$, ce qui donne *a priori* six raies de fréquences très voisines. La figure 8.5 illustre ces possibilités (elle n'est pas à l'échelle, pour la clarté). En réalité, pour des raisons diverses, la structure n'est pas complètement résolue et, de fait, on observe un doublet. L'écart (moyen, compte tenu des 6 possibilités *a priori*), calculé à partir de l'expression (8.105) donne un écart de 10950 MHz entre les deux composantes du doublet, très voisin de la valeur mesurée.

Le succès sur ce point précis est donc total, mais ce fut le chant du cygne de l'ATQ. En effet, en dépit d'autres succès (par exemple l'explication de l'effet Zeeman *normal* – décomposition d'une raie atomique sous l'effet d'un champ magnétique – par Debye et Sommerfeld), cette théorie ne permit pas de rendre compte du spectre des atomes plus complexes. Les dernières tentatives survinrent au moment où Heisenberg et Schrödinger jetaient les bases d'une théorie radicalement différente, qui devait, peu à peu mais rapidement, résoudre toutes les difficultés rencontrées depuis des décennies.

⁵⁰C'est la constante α qui pilote les écarts de structure fine, d'où son nom.

Chapitre 9

Structure du noyau atomique

Dans les chapitres précédents, une fois admis le modèle planétaire, le noyau a été considéré comme un objet ponctuel sans structure propre, et simplement réduit au rôle d'une source ponctuelle de champ électrostatique attirant les électrons atomiques. Cette simplification est légitime si l'on se cantonne au domaine des basses énergies (typiquement inférieure à quelques dizaines d'eV) et pour les phénomènes survenant sur une échelle de longueur de l'ordre de l'Angström ou plus.

Le but de ce chapitre est un exposé phénoménologique élémentaire de la structure du noyau de l'atome, étant entendu que sa description théorique détaillée relève de la Mécanique Quantique.

9.1 Charge du noyau

Une caractéristique importante du noyau est sa charge (positive) $Z|e|$. Les tout premiers renseignements sur Z furent donnés par les expériences de Barkla sur la diffusion des rayons X, dont la longueur d'onde typique est de l'ordre de l'Angström. Par la relation de Planck - Einstein entre énergie et fréquence, on a $E = hc/\lambda$, soit :

$$E_{\text{eV}} \simeq \frac{12400}{\lambda_{\text{\AA}}} , \quad (9.1)$$

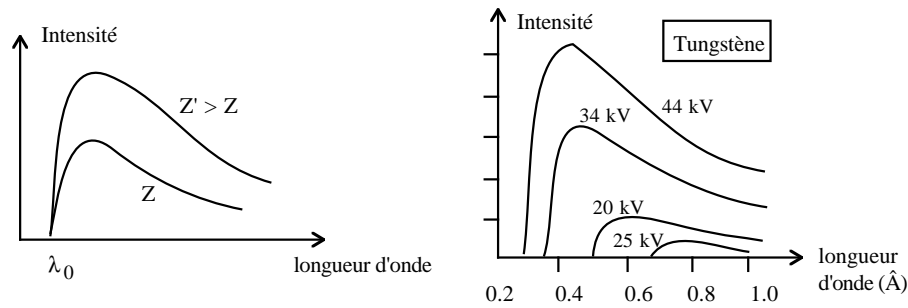
de sorte que l'introduction des rayons X comme outil d'investigation permet de rentrer dans le domaine de la dizaine de keV et donc de sonder les électrons atomiques fortement liés – à n'en pas douter, ce sont ceux qui sont les plus proches du noyau. Par ailleurs, avec les rayons X, on se rapproche du domaine des énergies nucléaires typiques, révélées par l'étude élémentaire de la radioactivité (de l'ordre du MeV=10⁶ eV) .

Les rayons X peuvent être produits de diverses manières. La façon la plus simple (en principe) est d'utiliser le fait qu'une charge accélérée rayonne. En particulier, si l'on accélère un faisceau d'électrons par une forte ddp (plusieurs dizaines de kV) que l'on envoie sur une pièce de métal (en pratique, c'est l'anode, appelée traditionnellement anticathode), les électrons vont se trouver brutalement décélérés en arrivant sur l'anode et vont émettre : c'est le rayonnement de freinage (*Bremsstrahlung*). Lorsque la tension accélératrice U n'est pas trop élevée, on observe un rayonnement dont l'intensité est distribuée continûment en longueur d'onde comme indiqué sur la figure 9.1 (fond continu). L'intensité est plus élevée si Z est plus élevé (le freinage est plus violent) et/ou si la ddp plus grande.

La longueur d'onde seuil λ_0 suit la loi (Duane et Hunt, 1915) :

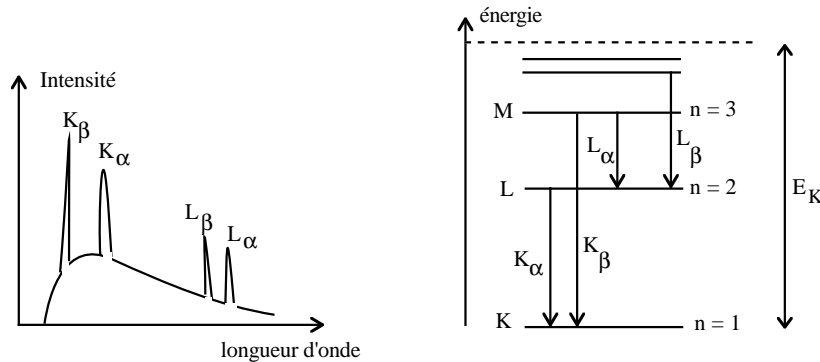
$$|e|U = \frac{hc}{\lambda_0} , \quad (9.2)$$

qui s'explique facilement : λ_0 correspond à une fréquence ν_0 qui, par la relation de Planck - Einstein, est associée à l'énergie cinétique des électrons accélérés par la ddp U . Le freinage sur l'anticathode provoque une avalanche de phénomènes très complexes épuisant finalement l'énergie cinétique des électrons, mais une chose est sûre : c'est lorsque toute cette énergie est exclusivement convertie en lumière que l'on obtient les photons les plus

Figure 9.1: Spectre X pour une tension U pas trop élevée.

énergétiques. L'existence du fond continu traduit par ailleurs la complexité des phénomènes mis en jeu : la cible peut être excitée de bien des façons (continûment) et l'énergie résiduelle disponible pour l'émission de lumière peut avoir n'importe quelle fréquence (inférieure à ν_0).

Si l'on augmente la ddp U , on voit évoluer graduellement le fond continu (il croît en intensité) puis, soudainement, pour une valeur de U caractéristique du métal de l'anticathode, on voit apparaître un groupe de raies très fines et assez voisines. Si U continue à augmenter, le même type de phénomène se reproduit ailleurs (figure 9.2).

Figure 9.2: Spectre X pour une tension U élevée, et interprétation dans le modèle en couches de l'atome.

L'interprétation de ce phénomène peut être donnée à l'intérieur du modèle en couches de l'atome, fondé sur la considération des états de Bohr hydrogénoïdes. Chaque état n peut recevoir un nombre maximum d'électrons, $2n^2$, conformément à une règle¹ due à Pauli (principe d'exclusion de Pauli, 1928) permettant de justifier les grandes lignes du tableau périodique des éléments. Pour un atome de grand Z , il y a donc un grand nombre d'états n contenant des électrons, chacun d'entre eux constituant ce que l'on appelle une *couche*. Dans l'état fondamental, les couches les plus basses sont pleines et la plus haute couche occupée est en général partiellement remplie (les gaz rares font exception : leur dernière couche est pleine). Par ailleurs, on conserve la règle de Bohr : un électron peut transiter d'une couche à l'autre par absorption ou émission d'un photon de fréquence donnée par $\nu = \hbar^{-1}\Delta E$.

Le mécanisme donnant lieu aux raies fines groupées est le suivant. Si la ddp U donne aux électrons une énergie supérieure à E_K , ceux-ci sont en mesure d'éjecter un électron profond hors de la couche K. Il en résulte une lacune dans le cortège électronique de l'atome, très vite comblée par le transfert d'un autre électron d'une couche supérieure vers la couche K. Ainsi, dès que $|e|U > E_K$, toutes les transitions K apparaissent simultanément². On comprend aussi que les différents groupes de raies K, L, M, ... sont bien séparés, puisque les énergies des

¹Cette règle, imposée par l'expérience, recevra un fondement théorique en Mécanique Quantique, lui-même imposé par la suppression de la notion de trajectoire conduisant à l'impossibilité de distinguer entre elles deux particules identiques (postulat de symétrisation).

²L'émission de photons n'est pas la seule mutation possible de l'énergie lorsqu'un électron descend d'une couche à l'autre. L'énergie disponible peut aussi être donnée à un autre électron de l'atome et même, si elle est assez grande, peut conduire à l'éjection ce dernier : c'est l'effet Auger (Auger, 1925). Par exemple, le saut de L à K peut également produire un électron libre de

différentes couches sont nettement distinctes. Bien sûr, partant d'une tension modérée et augmentant U , le groupe M (non représenté) apparaît avant le groupe L, lui-même avant le groupe K. Les différentes raies d'un même groupe sont indicées suivant le niveau de départ (α désigne la raie la moins énergétique d'un groupe).

En définitive, les raies fines qui se superposent au fond continu quand U est grand sont exactement de la même nature que les spectres de raies des vapeurs atomiques : elles sont la signature de l'élément lourd dont est faite l'anticathode. Leur différence essentielle est purement quantitative : ces raies se situent dans le domaine X (pour des Z modérés, on va en gros de 0.5 à 2 Å, soit de 25 à 6 keV environ). En outre, comme elles impliquent des électrons très profonds et donc très proches du noyau, ceux-ci ressentent presque exclusivement la charge nucléaire et sont relativement insensibles à ce qui se passe en périphérie de l'atome (laquelle au contraire conditionne les propriétés chimiques). On peut donc se douter que la fréquence de la raie K_α , tout particulièrement, est bien représentée par le modèle hydrogénoïde de Bohr : les électrons qui y participent étant aux premières loges, leur comportement reflète essentiellement la charge nucléaire. De fait, il existe une loi due à Moseley (1914) énonçant que la fréquence de cette raie est donnée par :

$$\sqrt{\nu_{K_\alpha}} = A(Z - \sigma) , \quad (9.3)$$

où A est une constante et σ une constante dite d'écran, petite devant Z et ne dépendant que faiblement de Z . On peut rendre compte de cette loi en écrivant l'énergie d'un électron des couches K et L de la façon suivante :

$$E_n = -\frac{me'^4(Z - \sigma)^2}{2n^2\hbar^2} . \quad (n = 1, 2) \quad (9.4)$$

Alors, la fréquence de la raie K_α est donnée par $E_2 - E_1$, soit :

$$\nu_{K_\alpha} = \frac{3}{4h} \frac{me'^4(Z - \sigma)^2}{2\hbar^2} \iff \sqrt{\nu_{K_\alpha}} = \sqrt{3Ryc/4}(Z - \sigma) , \quad (n = 1, 2) \quad (9.5)$$

qui reproduit le comportement énoncé par (9.3). On trouve empiriquement que, pour Z compris entre 20 (Calcium) et 30 (Zinc), la loi précise ajustée expérimentalement est :

$$\sqrt{\nu_{K_\alpha}} = 0.874\sqrt{Ryc}(Z - 1.13) ; \quad (9.6)$$

0.874 n'est pas très différent de $\sqrt{3/4}$ (comparer avec (9.5)). La loi de Moseley a joué un rôle très important pour la détermination du Z des nouveaux éléments découverts peu à peu à l'époque (exemple, le Hafnium, $Z = 72$). Par ailleurs, il est intéressant de constater que cette propriété $\sqrt{\nu_{K_\alpha}} \propto Z$ donne une évolution uniforme par rapport à la charge nucléaire, alors que les propriétés chimiques ont plutôt un comportement périodique.

9.2 Rayon du noyau

Une autre caractéristique du noyau – à partir du moment où il n'est plus considéré comme ponctuel – est son rayon géométrique, ou plus généralement une longueur typique de son extension spatiale³.

Le caractère non ponctuel du noyau peut être révélé expérimentalement de diverses façons. La première consiste à faire de la diffusion Rutherford à haute énergie et petit paramètre d'impact : ceci assure que la particule α va s'approcher près du "centre" du noyau. La taille nucléaire va se manifester dès que la distance minimum d'approche va devenir de l'ordre de grandeur du rayon nucléaire : le calcul à *la* Rutherford devient alors incorrect, ce qui se traduit par un écart sensible entre les sections efficaces mesurée et calculée avec pour seul champ de forces l'interaction coulombienne. Le calcul de $\sigma_d(\theta)$ repose sur la relation établie⁴ entre la déviation θ de la particule α et le paramètre d'impact b :

$$\tan \frac{\theta}{2} = \frac{Ze'^2}{bE_\alpha} , \quad (9.7)$$

où E_α est l'énergie initiale de la particule α . Cette relation permet, à énergie donnée ou à déviation donnée, d'exhiber la valeur de b à partir de laquelle expérience et théorie (de Rutherford) commencent à différer, c'est-à-dire à donner l'ordre de grandeur de la taille nucléaire.

vitesse v , à condition que l'équation de bilan $mv^2/2 = (E_2 - E_1) + E_2$ puisse être satisfaite. Le processus peut d'ailleurs se répéter (cascade Auger) et est parfois utilisé pour produire des ions fortement chargés.

³Tous les noyaux ne sont pas sphériques, loin de là.

⁴On suppose que l' α , quoique de grande énergie, est encore non-relativiste, de sorte que le calcul classique de Rutherford reste valable, de ce point de vue.

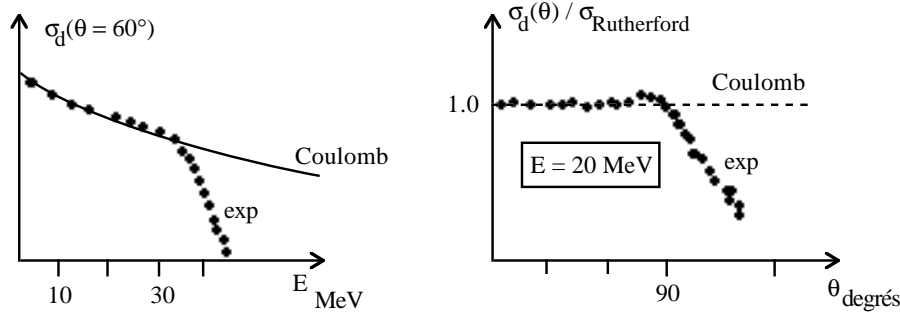


Figure 9.3: Ecart entre expérience et théorie de Rutherford à déviation donnée et à énergie donnée (cible de Pb, $Z = 82$).

Dans l'exemple montré sur la figure 9.3, on voit que pour une déviation de 60° , l'écart se creuse à partir de 30 MeV ; pour une énergie de 20 MeV donnée, l'écart est visible à partir de 90° . Dans ces deux cas⁵, la valeur critique b_c du paramètre d'impact en-dessous de laquelle la relation (9.7) devient suspecte est telle que :

$$\frac{Ze'^2}{b_c E_\alpha} \sim 1 \quad (9.8)$$

En reportant $Z = 82$, $E_\alpha = 20$ MeV dans cette expression, on trouve :

$$b_c \sim 3 \times 10^{-15} \text{ m} \equiv 3 \text{ F} . \quad (9.9)$$

La dimension linéaire du noyau, notée r_0 , est donc quelques Fermis, environ 100 000 fois plus petite que celle de l'atome. Par ailleurs, comme le calcul de Rutherford rend compte de l'expérience au-dessus de cette valeur, on peut affirmer que le rayon d'action des forces nucléaires est effectivement de l'ordre du Fermi, pas plus : ce sont donc des forces à très courte portée.

Une fois obtenu l'ordre de grandeur de la dimension nucléaire, il importe d'obtenir des renseignements précis sur la *forme* du noyau, ce que l'on peut faire en éclairant le noyau convenablement, avec une lumière de longueur d'onde appropriée. En fait, pour voir les détails, celle-ci doit être comparable à la taille nucléaire⁶ ; le déphasage spatial de l'onde sur l'espace nucléaire provoquera dans ces conditions une distribution de l'intensité diffractée constituant au sens strict une image du noyau : compte tenu de la taille estimée ci-dessus, il faut donc un "rayonnement" de longueur d'onde $\lambda \sim 1 \text{ F}$. Si l'on ne pense qu'au rayonnement électromagnétique, il faut disposer de photons d'énergie 100 000 fois plus grande que celle d'un photon X de longueur d'onde 1 \AA , soit des photons d'énergie⁷ de l'ordre de 1200 GeV ... La solution est ailleurs, et utilise le fait que, suivant la suggestion de de Broglie, à toute particule d'impulsion p se trouve associée une onde dont la longueur d'onde λ est donnée par⁸ :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (9.10)$$

Pour un électron relativiste d'énergie E , cette relation s'écrit :

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}} . \quad (9.11)$$

λ doit être de l'ordre de grandeur du Fermi ; on connaît une longueur fondamentale du même ordre de grandeur, c'est le rayon classique de l'électron, $e'^2/(mc^2)$. Il faut donc :

$$\frac{hc}{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}} \sim \frac{e'^2}{mc^2} \iff E \sim mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^2} \simeq \frac{2\pi}{\alpha} mc^2 \simeq 860 mc^2 . \quad (9.12)$$

⁵L'écart ne peut certainement pas s'expliquer par le fait que le calcul de Rutherford est non-relativiste : dans les cas présentés, on a $E_\alpha \ll M_\alpha c^2 \sim 4000 \text{ MeV} = 4 \text{ GeV}$.

⁶Si la longueur d'onde est très grande, le noyau apparaîtra comme ponctuel, et on rate l'objectif.

⁷ $1 \text{ \AA} \leftrightarrow 12400 \text{ eV}$

⁸ $p = \gamma mv$, $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$; dans le cas non-relativiste, on a simplement $\lambda = h/(mv)$

Avec $mc^2 = 0.511$ MeV, on a $E \simeq 440$ MeV ~ 0.5 GeV.

La sonde étant trouvée, la confrontation théorie - expérience passe par l'établissement de l'expression de la section efficace de diffusion d'un électron relativiste par un noyau étendu sur une échelle ~ 1 F. Le point de départ est la section différentielle (élastique⁹) pour un noyau *ponctuel*, obtenue par Mott et donnée par [30] :

$$\sigma_{d\cdot}(\theta) = \frac{Z^2}{4} r_e^2 \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \frac{1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2)}{\sin^4(\theta/2)} = \left(\frac{Ze'^2}{2mv^2} \right)^2 (1 - \beta^2) \frac{1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2)}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (9.13)$$

où¹⁰ r_e est le rayon classique de l'électron et $\beta = v/c$. La section réelle est en fait plus petite, puisque le noyau est précisément un objet étendu dans l'espace : l'électron interagit avec les protons, dont la distribution de charge diffuse $\rho_c(\vec{r})$ introduit un déphasage spatial $e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$, \vec{q} étant le transfert de moment $\vec{q}_f - \vec{q}_i$ de la sonde vers le noyau. Au total, la section efficace pour le noyau non-ponctuel est¹¹ :

$$\sigma_{d\bullet}(\theta) = \sigma_{d\cdot}(\theta) \left| \int_{\text{volume nucléaire}} \frac{1}{Q} \rho_c(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right|^2 \equiv \sigma_{d\cdot}(\theta) |F(\vec{q})|^2. \quad (9.14)$$

$F(\vec{q})$ s'appelle le facteur de forme (de charge) du noyau et représente précisément l'image géométrique du noyau (apportant aussi sa propre dépendance angulaire) : la distribution de charge s'obtient en effectuant la transformation de Fourier inverse. La forme du noyau apparaîtra clairement si $qr_0 \sim 1$ et pour les angles de diffusion nettement différents de zéro¹². La mesure de $F(\vec{q})$ permet de reconstituer au sens propre l'image géométrique du noyau.

Le noyau, tout comme l'atome, peut être caractérisé par une densité de masse et une densité de charge. Pour l'atome, l'échelle d'extension spatiale de la densité de charge est de l'ordre de l'Å, cependant que la densité de masse est très concentrée, puisque les électrons sont très peu massifs – sur ce point, seul le noyau compte. Il est donc naturel de définir un rayon de masse (qui est donc de l'ordre du Fermi) et un rayon de charge ~ 1 Å. Pour le noyau, au contraire, toutes les expériences montrent que rayon de charge et rayon de masse sont semblables : les nucléons ont donc tous à peu près la même masse ; parmi eux, ceux qui portent la charge (les protons) sont donc bien répartis dans tout l'espace nucléaire. Par ailleurs, l'aspect ramassé des distributions nucléaires (fig.9.4) résulte du fait que l'interaction est à très courte portée, contrastant fortement avec l'interaction électromagnétique (à très longue portée) responsable du caractère très étendu la distribution électronique de l'atome.

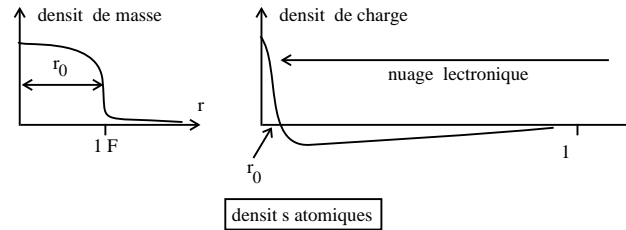


Figure 9.4: Représentation schématique des densités de charge et de masse.

La bonne connaissance de l'interaction électromagnétique fait des électrons une sonde privilégiée pour l'étude de la densité nucléaire. Sans entrer dans la zoologie de la géométrie nucléaire, il importe de citer un résultat majeur : pour les noyaux sphériques (tous ne le sont pas), il existe une relation empirique simple entre le rayon (de charge) R_c et le nombre de masse A . Cette relation est :

$$R_c = r_0 A^{1/3}, \quad (9.15)$$

où r_0 est une constante (une longueur !) valant à peu près 1.25 F. Bien sûr, ceci ne veut pas dire que le noyau a une frontière bien délimitée : la densité varie graduellement, et r_0 ne fait qu'en donner une échelle typique.

⁹Donc dans l'hypothèse où il n'y a pas excitation interne du noyau.

¹⁰(9.13) reproduit bien la formule de Rutherford dans la limite $\beta \rightarrow 0$.

¹¹ Q est la charge nucléaire $Z|e|$.

¹²La diffusion vers l'avant $\vec{q}_f - \vec{q}_i$ fait disparaître la dépendance en q et efface complètement la géométrie (on retrouve alors la formule de Mott).

L'exposant $1/3$ qui figure dans la relation (9.15) est remarquable : il implique que la densité nucléaire est à peu près constante. En effet, M étant la masse d'un nucléon, la densité de masse ρ_m d'un noyau sphérique est :

$$\rho_m = \frac{AM}{(4\pi/3)(r_0 A^{1/3})^3} = \frac{3M}{4\pi r_0^3} , \quad (9.16)$$

quand on assimile rayon de charge et rayon de masse. L'application numérique révèle alors que la densité nucléaire est fantastiquement élevée ; (9.16) donne :

$$\rho_m \simeq 2 \times 10^{14} \text{ g/cm}^3 . \quad (9.17)$$

C'est évidemment l'interaction forte à très courte portée qui est responsable de la compacité nucléaire, donc de sa densité gigantesque. Une autre mesure de cette propriété est donnée par la densité de nucléons, n :

$$n = \frac{A}{(4\pi/3)(r_0 A^{1/3})^3} \simeq 10^{38} / \text{cm}^3 . \quad (9.18)$$

Cette densité est environ 10^{16} fois plus élevée que celle de la matière condensée "ordinaire", de l'ordre de $10^{22} / \text{cm}^3$ (un atome dans un cube de $\sim 3 \text{ \AA}$ de côté). Dernière estimation : la densité de charge nucléaire ; on trouve :

$$\rho_c = \frac{Z|e|}{(4\pi/3)(r_0 A^{1/3})^3} = \frac{3|e|}{4\pi r_0^3} \frac{Z}{A} \sim 2 \times 10^{19} \text{ C/cm}^3 . \quad (9.19)$$

Toutes ces valeurs des densités montrent qu'à l'aune des échelles nucléaires, même la matière dite condensée est très diluée !

L'étude systématique d'un grand nombre de noyaux permet de trouver une forme analytique simple rendant convenablement compte de la géométrie d'un noyau sphérique :

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-R_c)/a}} , \quad (9.20)$$

où a est une constante ($a \simeq 0.50 \text{ F}$), mais où ρ_0 varie d'un noyau à l'autre. L'exponentielle du dénominateur rend bien compte de la descente abrupte de ρ pour $r \sim R_c$.

9.3 Composition du noyau

La radioactivité β (plus précisément β^-) a fait longtemps penser que des électrons étaient présents dans le noyau. Dans cette hypothèse, le noyau contenait A protons et $A - Z$ électrons, donnant une charge totale égale à $Z|e|$. Ce point de vue se révéla par la suite en contradiction avec des faits simples ; par exemple, le noyau d'azote ($A = 14$, $Z = 7$) contiendrait alors 14 protons et 7 électrons, soit au total 21 particules. Pour d'autres raisons, il avait fallu attribuer un moment cinétique intrinsèque (*spin*) à chacune d'entre elles, égal à $\hbar/2$ (dans la bonne unité, le spin vaut donc $1/2$). La somme de ces moments en nombre impair (21) donne fatalement un spin total *demi-entier* ; or, par d'autres mesures, on savait que le spin total du noyau d'azote est entier.

La découverte¹³ du neutron par Chadwick (1932) marqua une étape décisive de la Physique Nucléaire. Le noyau est en fait composé de Z protons (lui donnant la charge $Z|e|$) et de N_n neutrons ($N_n = A - Z$), chacun de ces derniers étant de charge totale nulle. Par ailleurs, les masses du proton et du neutron sont très voisines, celle du neutron étant très légèrement plus élevée :

$$M_{\text{neutron}} = 939.57 \text{ MeV} , \quad M_{\text{proton}} = 938.28 \text{ MeV} , \quad \frac{M_{\text{neutron}}}{M_{\text{proton}}} \simeq 1.001 . \quad (9.21)$$

Le neutron est instable à l'état libre, sa durée de vie est de l'ordre de la dizaine de minutes. En revanche, au moins jusqu'à présent¹⁴, le proton est considéré comme stable.

¹³Pour des détails, voir [31].

¹⁴On a récemment, mais vainement, cherché à mettre en évidence la désintégration du proton.

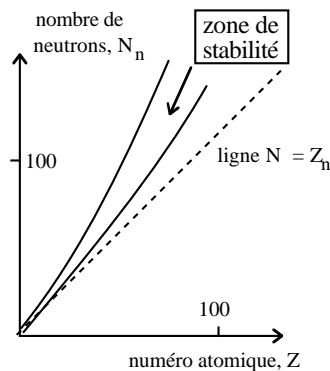


Figure 9.5: Zone de stabilité des noyaux.

Protons et neutrons sont désignés sous le vocable générique de nucléons et sont ici considérés comme les briques de la matière nucléaire¹⁵. Les noyaux se construisent en assemblant les uns avec les autres ; le plus simple est le noyau d'hydrogène, puis viennent les noyaux de deutérium (un proton et un neutron) et de tritium (un proton et deux neutrons), et ainsi de suite. L'expérience montre que les noyaux stables contiennent en réalité un léger excès de neutrons (voir figure 9.5) – d'où $A > 2Z$, d'autant plus marqué qu'il s'agit d'un noyau lourd. L'interaction électromagnétique pèse peu devant l'interaction forte (environ mille fois plus intense), mais il est certain de l'accumulation de protons est un facteur déstabilisant au vu de leur répulsion électrostatique ; on peut voir l'excès de neutrons comme une nécessité venant équilibrer la répulsion coulombienne grandissante entre les Z protons pour les noyaux lourds.

9.4 Energie de liaison du noyau

9.4.1 Défaut de masse

Le noyau atomique, comme tout édifice stable, est caractérisé par une énergie de liaison, représentant l'énergie à fournir pour briser le noyau en ses constituants. Par la relation $E = mc^2$, la masse d'un noyau stable est *inférieure* à la somme de ses composants libres, la différence étant appelée historiquement défaut de masse :

$$M(\triangle b \spadesuit \# \dots) < M(\triangle) + M(b) + M(\spadesuit) + M(\#) + \dots \quad (9.22)$$

Pour un noyau (A, Z) de masse M , on écrit précisément :

$$M(A, Z) c^2 = (A - Z) M_{\text{neutron}} c^2 + Z M_{\text{proton}} c^2 - B(A, Z) ; \quad (9.23)$$

$B(A, Z) > 0$ est l'énergie de liaison¹⁶ dont l'expérience montre qu'elle est d'autant plus élevée que le nombre de nucléons est grand :

$$B \text{ est une fonction croissante de } A . \quad (9.25)$$

La bonne quantité est en fait le rapport B/A , qui varie comme suit en fonction de A : une montée rapide et irrégulière pour A petit puis un long plateau légèrement incurvé vers le bas et aux environs de 6 MeV par nucléon, présentant un maximum très peu accusé pour $A \simeq 60$. On comprend pourquoi l'on peut récupérer de l'énergie soit en fusionnant deux noyaux légers, soit en fissionnant un noyau lourd : dans les deux cas, les produits ont une énergie de liaison par nucléon *plus grande* que les éléments de départ.

¹⁵Depuis le début des années 70, on sait que les nucléons sont eux-mêmes composés d'entités plus "élémentaires", appelées *quarks*.

¹⁶En toute rigueur, le même type de relation peut être écrit pour un atome. Par exemple, les lois de conservation décrivant l'émission d'un photon de fréquence ν par un atome sont très exactement :

$$M_i c^2 = \gamma M_f c^2 + h\nu , \quad 0 = -\gamma M_f v + h\nu/c , \quad (9.24)$$

où M_i et M_f ($M_i > M_f$) sont les masses initiale et finale de l'atome. Toutefois, dans la gamme d'énergie de la Physique Atomique (ou de la Chimie), les effets correspondants sont très petits et usuellement ignorés.

9.4.2 Formule de Weizsäcker et le modèle de la goutte liquide

La formule de Weizsäcker est une formule semi-empirique permettant d'écrire l'énergie de liaison d'un noyau en prenant en compte successivement les différents effets physiques susceptibles d'y contribuer et d'en faire simplement la somme. Il en résulte que la formule de Weizsäcker a un sens physique parfaitement clair ; elle reste néanmoins empirique dans la mesure où les différents coefficients qui apparaîtront successivement seront déterminés par ajustement avec un très grand nombre de données expérimentales.

Le premier terme qui vient à l'esprit est une contribution strictement proportionnelle au nombre de nucléons, compte tenu de l'une des observations faites ci-dessus lors de la discussion du rapport B/A . Ainsi, le développement de $B(A, Z)$ doit pouvoir commencer comme :

$$B(A, Z) = a_v A + \dots, \quad (9.26)$$

où a_v est une constante, en principe indépendante de A et de Z . On sait par ailleurs que le rayon du noyau, R , suit approximativement la loi $R = r_0 A^{1/3}$, ce qui suggère que les nucléons se rassemblent dans le noyau pour former un ensemble compact dont la densité varie peu d'un noyau à l'autre, constituant une sorte de standard de la Physique, à savoir la densité de la matière nucléaire.

Tout ceci est un peu réminiscent des systèmes thermodynamiques et des grandeurs extensives. Par exemple, pour un objet macroscopique, l'énergie totale est simplement proportionnelle au nombre de particules¹⁷ N , ici c'est A qui joue ce rôle ; de la même façon, le volume est proportionnel au nombre de particules, de sorte que la densité N/V est une constante indépendante de la quantité de matière considérée. Il en va de même pour le noyau : la loi $R = r_0 A^{1/3}$ montre bien que, quelle que soit la forme précise du noyau (sphère, ellipsoïde, ...) son volume (qui croît comme R^3) est proportionnel au nombre de constituants, A .

Ces considérations suggèrent de se représenter le noyau comme une goutte de matière condensée ("goutte liquide"), dont les constituants sont rassemblés les uns près des autres mais ont encore la faculté de se déplacer les uns par rapport aux autres (d'où le mot "liquide"). Cette image est confortée par la connaissance de l'interaction nucléon-nucléon, V_{nn} , dont l'allure est donnée sur la figure 9.6, réminiscente de l'interaction entre deux atomes ou deux molécules ; d'ailleurs, cette énergie potentielle varie comme $-C^{\text{ste}}/r^6$ aux grandes distances, tout comme l'interaction de van der Waals. Elle est bien sûr très fortement répulsive à courte distance (~ 0.3 F).

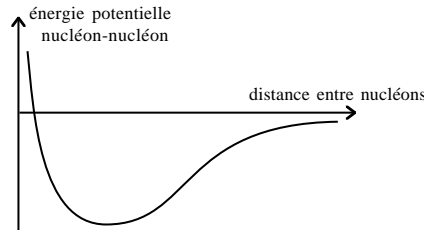


Figure 9.6: Allure typique de l'interaction entre deux nucléons.

Ces analogies servent de guide pour élucider les différentes contributions à $B(A, Z)$ et pour construire la formule de Weizsäcker. Tout comme pour un objet macroscopique, il existe des effets de surface venant corriger l'extensivité des grandeurs comme l'énergie. Le rapport surface/volume varie comme L^{d-1}/L^d pour un objet de taille linéaire L plongé dans l'espace \mathbb{R}^d ; comme $R \propto A^{1/3}$, le terme correctif est donc en $A^{2/3}$; comme les nucléons de surface interagissent moins avec leurs congénères (d'un côté le vide, de l'autre l'intérieur du noyau), la correction à l'énergie de liaison est *négative*. Ainsi, le développement de B se complète en :

$$B(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} + \dots, \quad (9.27)$$

où a_s est une constante caractéristique de cet effet de surface. Par ailleurs, il convient de prendre en compte la répulsion électrostatique entre les protons, qui est un facteur déstabilisant et doit donc elle aussi contribuer à abaisser l'énergie de liaison. Le terme correspondant s'exprime évidemment à l'aide du carré de la charge nucléaire $Z|e|$. Pour fabriquer une énergie à partir du carré d'une charge électrique, il suffit de diviser par une

¹⁷En toute rigueur, il faut passer à la limite thermodynamique. En fait, compte tenu de l'énormité du nombre d'Avogadro, cette limite est pratiquement atteinte pour tout système macroscopique.

longueur ; la seule longueur disponible physiquement est le rayon nucléaire R , de sorte que le terme cherché est nécessairement de la forme $-C^{\text{ste}}(Z|e|)^2/R$. Au total, on ajoute un terme en $-Z^2 R^{-1} \propto -Z^2 A^{-1/3}$ en vertu de (9.15) :

$$B(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \dots, \quad (9.28)$$

où a_C est une constante caractéristique de la répulsion Coulombienne.

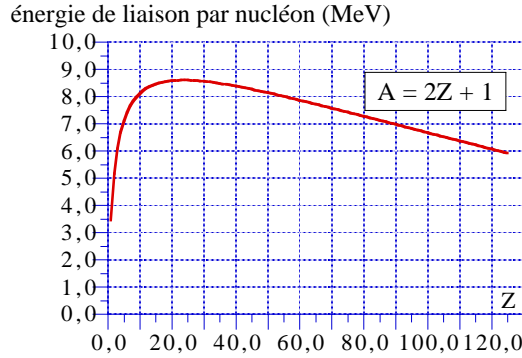


Figure 9.7: Energie de liaison par nucléon d'après la formule de Weizsäcker.

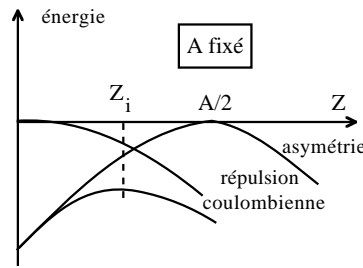


Figure 9.8: Isobare le plus stable.

Les trois termes déjà écrits ne peuvent expliquer l'existence de la zone de stabilité, laquelle s'écarte peu à peu de la ligne $N_n = Z$ quand Z augmente ; en effet, avec le développement ci-dessus, la maximisation de l'énergie de liaison à A fixé conduit à $\dots Z = 0$ et "produit" une matière nucléaire dépourvue de protons ! Un dernier terme doit donc être inclus, qui va justement traduire l'existence de cette zone de stabilité ; ce terme s'appelle terme d'asymétrie. Sa forme précise résulte de considérations tenant à la fois à la nature de l'interaction (forte) et à l'aspect quantique des nucléons¹⁸. On l'écrit :

$$-a_a \frac{(N_n - Z)^2}{A} = -a_a \frac{(A - 2Z)^2}{A}, \quad (9.29)$$

où a_a est une constante caractérisant l'asymétrie en terme de nombres de protons et de neutrons. On note que l'excès de neutrons, tout comme l'excès de protons, réduit l'énergie de liaison. C'est un fait que la stabilité nucléaire résulte d'effets subtils ; en tout état de cause, ce dernier terme décrit une tendance à la stabilisation ancrée strictement sur la ligne $N_n = Z$, soit $Z = A/2$. Au total, la formule de Weizsäcker est :

$$B(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_C \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(A - 2Z)^2}{A}. \quad (9.30)$$

Les constantes sont déterminées par ajustement avec les données expérimentales ; on obtient ainsi :

$$a_v = 15.56 \text{ MeV}, \quad a_s = 17.23 \text{ MeV}, \quad a_C = 0.7 \text{ MeV}, \quad a_a = 23.6 \text{ MeV}. \quad (9.31)$$

Pour $A < 20$, les résultats sont corrects à mieux que 1% près. La figure montre la variation de B/A déduite de (9.30) pour $A = 2Z + 1$ (en plein dans la zone de stabilité).

¹⁸Ce sont des fermions et obéissent au principe de Pauli.

Par ailleurs, en dérivant B à A fixé, on obtient :

$$\left(\frac{\partial B}{\partial Z}\right)_A = -a_C \frac{2Z}{A^{1/3}} + 4a_a Z \frac{A - 2Z}{A} ; \quad (9.32)$$

Cette fonction s'annule pour un certain Z , Z_i , donné par :

$$Z_i = \frac{A}{2 + (a_C/2a_a)A^{2/3}} = \frac{A}{2 + 0.015A^{2/3}} . \quad (9.33)$$

Le noyau ayant $Z \simeq Z_i$ s'appelle l'isobare le plus stable. Z_i est légèrement inférieur à $A/2$, et donne le point moyen de la zone de stabilité. Z_i résulte de deux tendances antagonistes : une tendance au maximum pour $Z = A/2$ venant du terme d'asymétrie et une tendance au maximum en $Z = 0$ venant de la répulsion coulombienne des protons (voir figure 9.8).

Bibliographie

- [1] Robert Lenoble, *Histoire de l'idée de Nature* (Albin Michel, Paris, 1969)
- [2] Jean PERRIN, *Les atomes* (Flammarion, Paris, 1991)
- [3] Encyclopedia Universalis, **8**, 116 (1993)
- [4] Max JAMMER, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1966)
- [5] Micheline CHARPENTIER-MORIZE, *Perrin, Savant et homme politique* (Belin, Paris, 1997)
- [6] Jean PERRIN, *Hypothèses moléculaires*, La Revue Rose, **15**, 449 (1901)
- [7] Voir par exemple :

<http://www.tcaep.co.uk/science/constant/>
- [8] J. Byrne , P. G. Dawber , C. G. Habeck , S. J. Smidt , J. A. Spain et A. P. Williams, *A revised value for the neutron lifetime measured using a Penning trap*, Europhys. Lett, **33**, 187 (1996)
- [9] Max BORN, *Structure atomique de la matière* (Armand Colin, Paris, 1970)
- [10] Steven WEINBERG, *Le Monde des Particules – de l'électron aux quarks* (Collection *Pour la Science*, Belin, Paris, 1983)
- [11] <http://web.ccr.jussieu.fr/radioactivite/biographie/BioBecquerel.html>
- [12] Jorge LEITE LOPES, *Fondements de la physique atomique* (Hermann, Paris, 1967)
- [13] Georges BRUHAT, *Thermodynamique* (Masson, Paris, 1962)
- [14] Yvan SIMON, *Energie et entropie* (Armand Colin, Paris, 1979)
- [15] E.N da COSTA ANDRADE, *Rutherford and the Nature of the Atom* (Doubleday, Garden City, N.Y., 1964)
- [16] Marcello ALONSO et Edward J. FINN, *Physics* (Addison-Wesley, Reading, 1995)
- [17] Claude COHEN-TANNOUDJI, Bernard DIU et Franck LALOË, *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris, 1977)
- [18] Bernard CAGNAC et Jean-Claude PEBAY-PEYROULA, *Physique Atomique*, tome 1 (Dunod, Paris, 1971)
- [19] Edouard CHPOLSKI, *Physique Atomique*, tome 1 (Mir, Moscou, 1977)
- [20] R. A. MILLIKAN, *A Direct Photoelectric Determination of Planck's "h"*, Phys. Rev., **7**, 355 (1916)
- [21] <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>
- [22] Roderic LAKES *Experimental Limits on the Photon Mass and Cosmic Magnetic Vector Potential*, Phys. Rev. Lett., **80**, 1826-1829 (1998)
- [23] John D. JACKSON, *Classical Electrodynamics* (John Wiley, New York, 1975)
- [24] <http://www.usatoday.com/weather/science/wonderquest/photonmass.htm>

- [25] Arthur Holly COMPTON *Secondary high frequency radiation*, Phys. Rev., **18**, 96 (1921) ; *ibid. The spectrum of secondary rays*, Phys. Rev., **19**, 267 (1922) ; *ibid. Wave-length measurements of scattered X-rays*, Phys. Rev., **21**, 715 (1923) (1922)
- [26] Lev LANDAU et Evguéni LIFSHITZ, *Mécanique Quantique*, (Mir, Moscou, 1967)
- [27] A. DAHAN DALMENICO, J.-L. CHABERT et K. CHEMLA *Chaos et déterminisme*, (Seuil, Coll. Point Sciences, Paris, 1992)
- [28] D. I. BLOKHINTSEV, *Principes essentiels de la Mécanique Quantique*, (Dunod, Paris, 1968)
- [29] Lev LANDAU et Evguéni LIFSHITZ, *Théorie du champ*, (Mir, Moscou, 1966)
- [30] N. F. MOTT et H. S. W. MASSEY, *The Theory of Atomic Collisions*, 3^{ème} édition, p. 235 (Clarendon Pr., Oxford, 1965)
- [31] C. M. H. SMITH, *A Textbook of Nuclear Physics* (Pergamon Pr., Oxford, 1965)
- [32] Harald A. ENGE, *Introduction to Nuclear Physics* (Addison – Wesley, Reading, 1966)