

Chapitre 6

LE MAGNÉTISME ATOMIQUE

6.1 Introduction

En guise d'introduction, nous rappelons sans démonstrations certains résultats qui concernent le magnétisme : expressions de la force et du moment qui s'exercent sur un dipôle magnétique, expression de l'énergie potentielle d'un dipôle magnétique dans un champ magnétique, etc... Pour les démonstrations, nous renvoyons à tous cours de magnétisme, celui de E. Durand par exemple :

E. Durand *Magnétostatique*, Masson et Cie (Paris).

Les moments magnétiques sont l'une des caractéristiques de l'atome et plus généralement des systèmes physiques les plus divers, noyaux, molécules, réseaux cristallins (celui du fer par exemple). Rappelons tout d'abord les définitions.

L'espace est rapporté à un repère galiléen dont l'origine est O . Nous considérons un ensemble de points matériels de masse m_k , de charge q_k situées en M_k et animés de la vitesse \vec{v}_k . On définit le moment magnétique, $\vec{\mu}$, et le moment cinétique \vec{L} par rapport au point O :

$$\boxed{\vec{\mu} := \frac{1}{2} \sum_k q_k \vec{r}_k \wedge \vec{v}_k} \quad \text{et} \quad \boxed{\vec{L} := \sum_k m_k \vec{r}_k \wedge \vec{v}_k}$$

avec $\vec{r}_k = \overrightarrow{OM_k}$.

L'unité internationale de moment magnétique est le *joule par tesla* (JT^{-1}).

Le système que nous considérons est un atome dont le centre de masse est assimilé au noyau que nous prenons comme origine, O . Dans ce cas, seuls les électrons contribuent à la constitution des moments cinétique et magnétique car $\vec{r} = \vec{0}$ pour le noyau.

$$\vec{\mu} := \frac{1}{2} \sum_k q_e \vec{r}_k \wedge \vec{v}_k \quad \text{et} \quad \vec{L} := \sum_k m_e \vec{r}_k \wedge \vec{v}_k$$

où $q_k = q_e$ est la charge de l'électron tandis que $m_k = m_e$ est sa masse.

Remarquons la relation $\vec{\mu} = \gamma \vec{L}$ où $\gamma = \frac{q_e}{2m_e}$ est le rapport gyromagnétique.

Dans un atome, les mouvements des électrons sur leurs orbites engendrent un moment cinétique que l'on appelle "*moment cinétique orbital*", \vec{L} , pour le distinguer du moment cinétique propre des électrons ou "*spin*" électronique, \vec{S} . A chacun de ces moments cinétiques est associé un moment magnétique qui lui est proportionnel. Dans le cas des mouvement orbitaux, le coefficient de proportionnalité se calcule comme nous l'avons indiqué : $\vec{\mu}_L = \gamma_L \vec{L}$, avec $\gamma_L = \frac{q_e}{2m_e} \simeq 8,9 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1}$.

N.B. $1 \text{ s}^{-1} \text{ T}^{-1} = 1 \text{ C kg}^{-1}$.

Dans le cas du spin, les propriétés des atomes conduisent à l'expression $\vec{\mu}_S = \gamma_S \vec{S}$ avec $\gamma_S = 2\gamma_L$.

En physique atomique, les moment cinétiques ont pour ordre de grandeur \hbar (cf. la relation 5.1, page 73); on définit alors le "**magnéton de Bohr**" qui fixe l'ordre de grandeur des moments magnétiques électroniques : $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \simeq 9,3 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$.

De façon générale, à tout moment cinétique électronique, \vec{J} , combinaison de moments cinétiques orbitaux et de spins, est associé un moment magnétique, $\vec{\mu}$, dont la moyenne temporelle[†] \vec{m} , est proportionnelle à \vec{J} . On définit alors le "**facteur de Landé**", g , tel que

$$\vec{m} = g \frac{q_e}{2m_e} \vec{J} \quad \text{avec} \quad g_L = 1 \quad \text{et} \quad g_S = 2 \quad (6.1)$$

La valeur $g_S = 2$, associée au spin électronique, se déduit de l'équation de Dirac qui décrit l'électron en mécanique quantique relativiste. Dans le cadre de l'électrodynamique quantique, diverses corrections, que l'on sait calculer avec précision, conduisent à la valeur $g_S = 2,002\dots$, ce que confirme l'expérience. Nous utiliserons cependant la valeur $g_S = 2$ par la suite.

Il est souvent commode de considérer que les mouvements orbitaux des électrons créent des courants électriques, responsables des moments magnétiques des atomes. En utilisant la définition, on peut démontrer que la spire de courant élémentaire de la figure 6-1 où i est une constante, possède un moment magnétique

$$\vec{\mu} = \vec{m} = iS\vec{u} \quad (6.2)$$

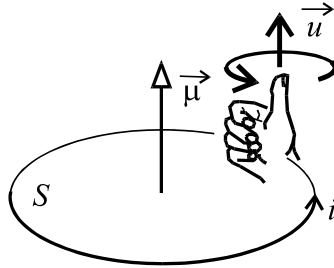


Figure 6-1.

Le courant permanent, d'intensité i , parcourt un circuit fermé, délimitant une surface plane d'aire S . Le vecteur unitaire normal à la spire, orienté par le courant (voir la règle de la main droite sur le dessin figure 6-1) est noté \vec{u} . Remarquons que $iS\vec{u}$ est indépendant de l'origine O .

Placée dans champ magnétique, \vec{B} , une charge q , animée de la vitesse \vec{v} , est soumise à la force de Laplace, \vec{F} , tandis qu'un élément de courant de longueur dl , porté par le vecteur unitaire \vec{T} , subit la force élémentaire $d\vec{F}$:

$$\vec{F} = q \vec{v} \wedge \vec{B} \quad \text{et} \quad d\vec{F} = idl \vec{T} \wedge \vec{B}$$

[†]La moyenne dont il est question est prise sur l'intervalle de temps $[t, t + T]$ où T est "très petit" : de l'ordre de quelques périodes électroniques (*N.B.* la période orbitale de l'électron de l'atome de Bohr sur son niveau fondamental est voisine de $1,5 \cdot 10^{-16}$ s). Une telle moyenne peut éventuellement dépendre du temps, t .

On en déduit que placée dans un champ magnétique, une spire de petite dimension, est soumise à un couple de moment $\vec{\Gamma}$ et à une force \vec{F} :

$$\boxed{\vec{\Gamma} = \vec{m} \wedge \vec{B}} \quad \text{et} \quad \boxed{\vec{F} = (\vec{m} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}} = \sum_{k=x,y,z} m^k \vec{\nabla} B^k \quad (6.3)$$

avec $\vec{m} \cdot \vec{\nabla} := \sum_k m^k \partial_k := m^x \frac{\partial}{\partial x} + m^y \frac{\partial}{\partial y} + m^z \frac{\partial}{\partial z}$. Remarquons que la relation $\text{rot} [\vec{B}] = \vec{0}$ implique les relations $F^m = \sum_k m^k \partial_k B^m = \sum_k m^k \partial_m B^k$ d'où la dernière des relations 6.3 : $\vec{F} = (\vec{m} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} = \sum_k m^k \vec{\nabla} B^k$

L'énergie potentielle du système formé par un moment magnétique ponctuel, \vec{m} , immergé dans un champ magnétique \vec{B} est $\boxed{U = -\vec{m} \cdot \vec{B}}$ lorsque $\|\vec{\mu}\|$ est indépendant de \vec{B} . Dans le cas général il vient

$$\boxed{dU = -\vec{m} \cdot d\vec{B}} \quad (6.4)$$

où dU est la variation d'énergie potentielle du système lorsqu'il est soumis à la variation de champ magnétique $d\vec{B}$.

Un dipôle magnétique est un système physique complètement décrit par son moment magnétique, \vec{m} : le couple et la force magnétiques qui agissent sur le dipôle ont pour expressions les expressions 6.3 tandis que l'énergie est donnée par la relation 6.4.

Un atome n'est pas rigoureusement un dipôle magnétique. Mais cette approximation décrit convenablement de nombreuses situations physiques. Nous l'utiliserons à diverses reprises.

Le magnétisme est parfois étudié comme un phénomène qui concerne les atomes individuellement (par exemple dans l'expérience de Stern et Gerlach paragraphe 6.2.5 page 90 ci-dessous) ; il est également perçu à travers ses effets macroscopiques collectifs (le paramagnétisme paragraphe 6.4.2 page 96, par exemple).

On distingue de nombreuses sortes de magnétisme : diamagnétisme, paramagnétisme, ferromagnétisme, ferrimagnétisme, etc... Les développements qui suivent concernent le diamagnétisme et le paramagnétisme : dans ce cas, les effets macroscopiques sont les conséquences statistiques des comportements individuels des systèmes atomiques sans que n'interviennent ni des interactions globales ni même des interactions entre systèmes voisins, autres que les éventuelles collisions dues à l'agitation thermique.

Du point de vue du magnétisme, l'état macroscopique d'un milieu est décrit par son intensité d'aimantation, $\vec{\mathcal{M}}$.

Considérons un petit volume V , entourant le point P . Dans ce petit volume, n systèmes atomiques sont présents. Les moments magnétiques de chacun de ces systèmes sont $\vec{m}_1, \vec{m}_2, \dots, \vec{m}_n$. Le moment magnétique total est $\vec{m} = \vec{m}_1 + \vec{m}_2 + \dots + \vec{m}_n$. L'**intensité d'aimantation** en P , ou plus simplement l'*aimantation* en P , est

$$\vec{\mathcal{M}} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\vec{m}}{V}$$

Les aimantations s'expriment donc en $\text{JT}^{-1} \text{m}^{-3} = \text{A m}^{-1}$

On définit alors la *susceptibilité magnétique*, χ , d'un milieu linéaire[†] :

$$\mu_0 \vec{\mathcal{M}} := \chi \vec{B}$$

où $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N A}^{-2}$ est la perméabilité magnétique du vide.

Appliquons un champ magnétique \vec{B} , sur un milieu linéaire, sans aimantation. Le champ \vec{B} induit dans le milieu une intensité d'aimantation $\vec{\mathcal{M}} := \chi \vec{B} / \mu_0$. Lorsque χ est positif, le milieu est dit "*paramagnétique*". Lorsque χ est négatif, le milieu est "*diamagnétique*".

6.2 Le magnétisme à l'échelle atomique

6.2.1 Le théorème de Larmor

Les effets du magnétisme sur un atome peuvent être étudiés grâce au théorème de Larmor. Nous le démontrons en annexe (A-1 page 99) dans le cas classique où l'atome apparaît comme un ensemble de charges ponctuelles (électrons et noyau).

Le noyau est généralement beaucoup plus massif que le nuage électronique. Nous pouvons admettre qu'il est confondu avec le centre de masse de l'atome et qu'il reste immobile à l'origine d'un repère galiléen $R = \{O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$.

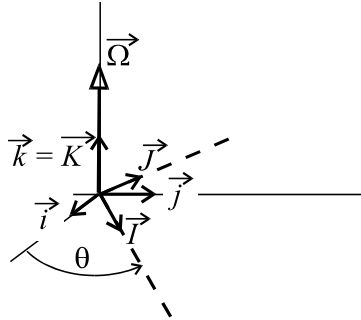


Figure 6-2.

L'atome est soumis à un champ magnétique, $\vec{B} = B \vec{k}$, que l'on considère comme uniforme à l'échelle de l'atome[‡]. On introduit un repère orthonormé, $R_T = \{O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{K} = \vec{k}\}$, d'origine O , tournant autour de l'axe \vec{k} avec une vitesse angulaire instantanée $\vec{\Omega}$ (figure 6-2). On pose

$$\vec{\Omega} = -\frac{q_e}{2m_e} \vec{B} := \vec{\Omega}_L$$

Dans ce cas, le repère tournant est appelé "*repère de Larmor*", il est noté R_L . La vitesse de rotation de ce repère, $\vec{\Omega}_L$, est la "*vitesse de rotation de Larmor*".

[†]Le milieu est dit "*linéaire*" lorsque l'aimantation induite par l'application du champ magnétique \vec{B} est proportionnelle à \vec{B} .

[‡]Cette approximation est en particulier légitime lorsque l'atome est soumis à un champ de radiofréquence ou à une onde électromagnétique du domaine visible. Dans ce cas, la longueur d'onde, λ , est supérieure à 400 nm tandis que la dimension de l'atome, a , n'excède pas quelques angströms : $a \ll \lambda$.

Dans les cas rencontrés en pratique, on démontre que l'atome est décrit par l'observateur tournant avec le repère de Larmor comme l'aurait décrit l'observateur fixe s'il n'y avait pas eu de champ magnétique appliqué. Cette propriété constitue le **théorème de Larmor**. On dit parfois que le champ magnétique est "absorbé" dans la rotation.

Le théorème de Larmor signifie que l'application du champ magnétique \vec{B} se traduit par une vitesse de rotation supplémentaire des électrons, $\vec{\Omega}_L$ de telle sorte qu'aucune modification n'est enregistrée dans le repère de Larmor.

6.2.2 Les moments magnétiques

Considérons un atome dont la position des électrons est donnée par $\{\vec{r}_k\}$ et leur vitesse par $\{\vec{v}_k\}$. Son moment magnétique par rapport à O est

$$\vec{\mu} = \frac{qe}{2} \sum_k \vec{r}_k \wedge \vec{v}_k.$$

En toute rigueur $\vec{\mu}$ est, en général, une fonction du temps que l'on peut appeler "moment magnétique instantané". Dans l'atome, les mouvements électroniques étant des mouvements de petites périodes, T (n'excédant généralement pas 10^{-13} s), c'est en fait la moyenne temporelle de $\vec{\mu}$, notée $\langle \vec{\mu} \rangle_t := \vec{m}$, qui est la grandeur physique pertinente pour décrire le comportement de l'atome et son évolution, pour autant que celle-ci soit due aux évolutions lentes[†] des champs extérieurs imposés. C'est \vec{m} que l'on désigne sous le nom de "moment magnétique".

La moyenne temporelle qui conduit à \vec{m} porte sur des durées de quelques périodes T . Le moment magnétique, \vec{m} , est donc une quantité qui dépend *a priori* de l'instant auquel on le calcule. C'est, en général, une fonction du temps qui dépend des champs extérieurs imposés.

En l'absence de champs extérieurs, \vec{m} est une constante.

On peut aussi admettre que la moyenne temporelle \vec{m} , puisse être remplacée par la moyenne sur un ensemble formé de nombreux atomes. De ce point de vue aussi, il est clair que \vec{m} est susceptible d'évoluer au cours du temps.

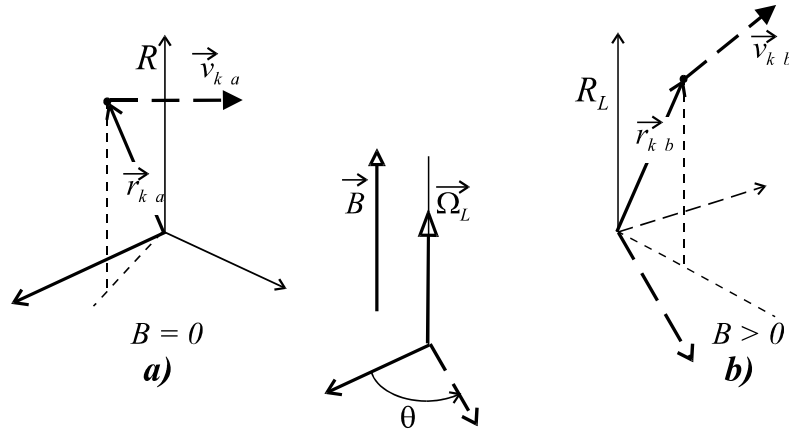


Figure 6-3.

Appliquons sur l'atome un champ magnétique $B \vec{k}$, nul à l'instant initial $t = 0$. Sur la figure 6-3 nous avons représenté, à un instant t quelconque, un électron particulier tel qu'il se présenterait en l'absence de champ magnétique (figure 6-3 a) et tel qu'il se présente en présence du champ magnétique (figure 6-3 b). Dans chacun des cas considérés, la position de l'électron est respectivement \vec{r}_{ka} et \vec{r}_{kb} , tandis que les vitesses sont \vec{v}_{ka} et

[†]"Evolutions lentes" signifie ici "Evolutions en des temps longs devant 10^{-13} s".

$\vec{v}_{kb} := \vec{v}_k/R_L$, vitesse par rapport à R_L . Posons $\vec{\mu}_b = \frac{q_e}{2} \sum_k \vec{r}_{kb} \wedge \vec{v}_{kb}$ et $\vec{\mu}_a = \frac{q_e}{2} \sum_k \vec{r}_{ka} \wedge \vec{v}_{ka}$. D'après le théorème de Larmor, \vec{r}_{kb} , \vec{v}_{kb} et $\vec{\mu}_b$ se déduisent de \vec{r}_{ka} , \vec{v}_{ka} et $\vec{\mu}_a$ par une rotation d'axe Oz , d'angle $\theta(t) = \int_0^t \frac{-q_e}{2m_e} B(t') dt'$. De même $\langle \vec{\mu}_b \rangle_{/t} := \vec{m}_b := \vec{m}_0$ se déduit de $\langle \vec{\mu}_a \rangle_{/t} = \vec{m}_a$ par une rotation d'angle θ . Le moment \vec{m}_a est le moment magnétique que l'on observerait en l'absence de champ magnétique. C'est un vecteur constant. Le vecteur $\vec{m}_b := \langle \vec{\mu}_b \rangle_{/t}$ est par définition ce que l'on note \vec{m}_0 . Ce vecteur subit, au cours du temps, une rotation de vitesse angulaire $\frac{d\theta}{dt}$. Ainsi, \vec{m}_0 est animé d'une rotation autour de \vec{B} , de vitesse angulaire $\vec{\Omega}_L$ (figure 6-4) et satisfait donc la relation (voir la relation 6.10 de l'annexe A-1 page 99)

$$\frac{d\vec{m}_0}{dt} = \vec{\Omega}_L \wedge \vec{m}_0 \quad (6.5)$$

N.B. Remarquer que $\vec{\Omega}_L$ et \vec{B} sont parallèles et de même sens.

Cependant, \vec{m}_0 n'est pas exactement égal au moment magnétique car, par rapport au repère fixe R , la vitesse de l'électron est $\vec{v}_k = \vec{v}_k/R_L + \vec{v}_E$ où \vec{v}_E est la vitesse d'entraînement (voir la relation 6.11 de l'annexe A-1 page 100); par conséquent $\vec{v}_k = \vec{v}_{kb} + \vec{\Omega}_L \wedge \vec{r}_{kb}$. On en déduit que le moment magnétique est $\vec{m} = \vec{m}_0 + \Delta\vec{m}$ avec

$$\Delta\vec{m} = \sum_k \left\langle \frac{q_e}{2} \vec{r}_{kb} \wedge \left(\vec{\Omega}_L \wedge \vec{r}_{kb} \right) \right\rangle_{/t} = \frac{-Zq_e^2}{4m_e} \left(\frac{1}{Z} \sum_k \left\langle (r_{kb}^2) \vec{B} - (\vec{B} \cdot \vec{r}_{kb}) \vec{r}_{kb} \right\rangle_{/t} \right)$$

$$\Delta\vec{m} = \frac{-Zq_e^2}{4m_e} B \left\langle \left((\vec{r}_\perp)^2 \vec{k} - (\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{r}_\perp \right) \right\rangle_{/t/Z_e}$$

la moyenne, $/Z_e$, est maintenant étendue à l'ensemble des Z électrons de l'atome (*N.B.* nous utilisons les notations de la figure 6-5).

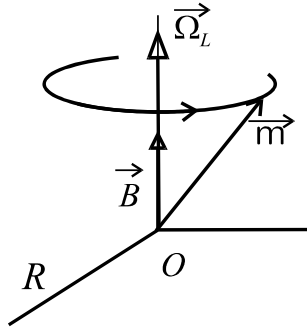


Figure 6-4.

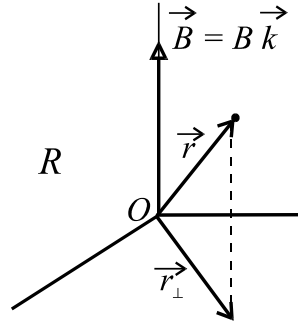


Figure 6-5.

Nous notons $\langle () \rangle$ la moyenne de $()$, étendue à tous les atomes du volume élémentaire dV entourant le point P . Admettons que la droite qui porte \vec{B} soit un axe de symétrie cylindrique pour la répartition statistique des configurations électroniques. Il vient $\left\langle \left\langle (\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{r}_\perp \right\rangle_{/t/Z_e} \right\rangle = \vec{0}$. On en déduit

$$\langle \Delta\vec{m} \rangle = \frac{-Zq_e^2}{4m_e} \rho^2 \vec{B}$$

avec $\rho^2 := \langle \langle r_{\perp}^2 \rangle \rangle_{/t/Z_e}$.

Nous verrons que $\langle \Delta \vec{m} \rangle$ est responsable du diamagnétisme tandis que $\langle \vec{m}_0 \rangle$ est responsable du paramagnétisme. En règle générale, dans les conditions que l'on rencontre le plus souvent, le diamagnétisme est négligeable devant le paramagnétisme sauf lorsque \vec{m}_0 est nul. Nous allons le montrer avec le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène.

6.2.3 L'atome de Bohr

Considérons l'atome de Bohr dans son état fondamental (figure 6-6). La vitesse angulaire de l'électron est ω_0 . Appliquons un champ magnétique uniforme $\vec{B} = B \vec{k}$, perpendiculaire au plan de l'orbite électronique.

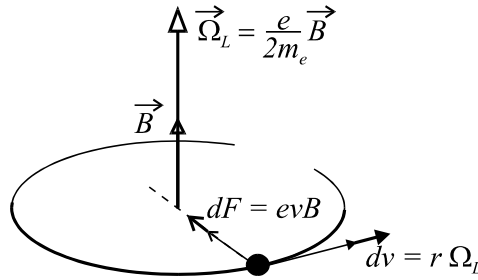


Figure 6-6.

Le théorème de Larmor affirme que dans le repère de Larmor, R_L le mouvement de l'électron reste toujours le même. Cela signifie que l'électron de la figure 6-6 tourne un peu plus vite sur son orbite, avec la vitesse angulaire $\omega = \omega_0 + \Omega_L$, tandis que le rayon de l'orbite reste inchangé. La force centripète correspondante est $m_e \omega^2 r$. Au premier ordre relativement à B , avec $\Omega_L = \frac{eB}{2m_e}$, cette force s'est accrue de $dF = 2m_e \omega r d\omega = 2m_e \omega \Omega_L r = \omega r e B = B e v$ où v est la vitesse de l'électron sur son orbite[†]. La force dF est précisément la force de Laplace supplémentaire qui est apparue en appliquant le champ B . C'est ce qui explique l'accroissement de la vitesse de rotation de l'électron sur son orbite.

Le moment magnétique initial est $\vec{\mu}_0 = \frac{-e}{2} v_0 r \vec{k} = \langle \vec{\mu}_0 \rangle_{/t} = \vec{m}_0$ où v_0 est la vitesse de l'électron sur son orbite fondamentale. Selon la relation de quantification 5.1 page 73, il vient $\|\vec{\mu}_0\| = \frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_B$, magnéton de Bohr. En présence du champ magnétique, le moment magnétique instantané devient $\vec{\mu} = \vec{\mu}_0 + d\mu \vec{k}$ avec $d\mu = \frac{-e}{2} r dv$ et $dv = r d\omega = r \Omega_L$. On en déduit $d\mu = \frac{-er^2}{2} \Omega_L = -\frac{e^2 r^2}{4m_e} B = \langle d\mu \rangle_{/t}$. Ce terme est responsable du diamagnétisme mais il est généralement négligeable devant μ_B . En effet en remplaçant r par le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène ($r \simeq 0,5 \text{ \AA}$) et B par 10 T, ce qui est un champ intense, il vient $\left| \frac{d\mu}{\mu_B} \right| \sim 2 \times 10^{-5} \ll 1$.

Dans la suite de cette section, nous négligeons le terme $\langle \Delta \vec{m} \rangle$ et nous posons $\vec{m} = \vec{m}_0$.

[†] On remarquera les égalités $dF = 2m_e \omega \Omega_L r = 2m_e (\omega_0 + \Omega_L) \Omega_L r = 2m_e \omega_0 \Omega_L r$, valables au second ordre près relativement à B car $\Omega_L = \frac{eB}{2m_e}$ est un terme du premier ordre en B .

6.2.4 Rapport gyromagnétique et précession de Larmor

Suivant la relation 6.1 rappelée en introduction, dans un atome, le moment magnétique, \vec{m} , d'origine électronique est proportionnel à son moment cinétique, \vec{J} :

$$\vec{m} = \gamma \vec{J} \text{ avec } \gamma = g \frac{q_e}{2m_e} \quad (6.6)$$

Appliquons sur le système étudié le champ magnétique \vec{B} . Il apparaît un couple de moment $\vec{m} \wedge \vec{B}$ (cf. les relations 6.3). L'équation d'évolution du moment cinétique s'écrit $\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{m} \wedge \vec{B}$. On en déduit

$$\boxed{\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma \vec{B} \wedge \vec{m}} \quad (6.7)$$

Cette relation signifie que \vec{m} est soumis à une précession de vitesse angulaire $\vec{\Omega} = -\gamma \vec{B}$. Dans le cas où seuls sont considérés les mouvements orbitaux des électrons, il vient $\vec{\Omega} = -\frac{q_e}{2m_e} \vec{B}$: c'est la relation 6.5 établie ci-dessus qui correspond à un facteur de Landé $g = 1$. Dans le cas général, il faut tenir compte du spin électronique en sus des mouvements orbitaux ; le facteur de Landé n'est donc pas toujours égal à l'unité (voir ci-dessous le modèle vectoriel page 102). La précession donnée par l'équation 6.7 est appelée "**précession de Larmor**". C'est la vitesse angulaire $\boxed{\vec{\Omega} = -\gamma \vec{B} = -g \frac{q_e}{2m_e} \vec{B}}$ que l'on appelle "**vitesse angulaire de Larmor**", dans le cas général et pas seulement lorsque $g = 1$.

6.2.5 L'expérience de Stern et Gerlach

L'expérience de Stern et Gerlach, réalisée en 1921, est l'exemple d'une mesure, de nature quantique dont la compréhension s'appuie sur les postulats qui régissent les mesures idéales.

Pour que toute la portée de cette expérience soit comprise, il fallut que les idées de l'école de Copenhague concernant la théorie de la mesure s'imposent (congrès Solvay de 1927) et que le spin de l'électron soit introduit (Uhlenbeck et Goudsmit 1925). Pour interpréter les résultats expérimentaux, nous ferons appel à la compréhension que nous avons de la mécanique quantique aujourd'hui[†], sauf à anticiper sur la présentation de cette théorie.

Les atomes que l'on souhaite étudier (l'argent dans l'expérience initiale) sont placés dans un four à la température T . Ils y forment une vapeur. Un trou laisse échapper un jet atomique qui pénètre dans l'entrefer d'un aimant où règne un fort gradient de champ magnétique (figure 6-7).

[†]La quête d'une meilleure compréhension se poursuit encore...

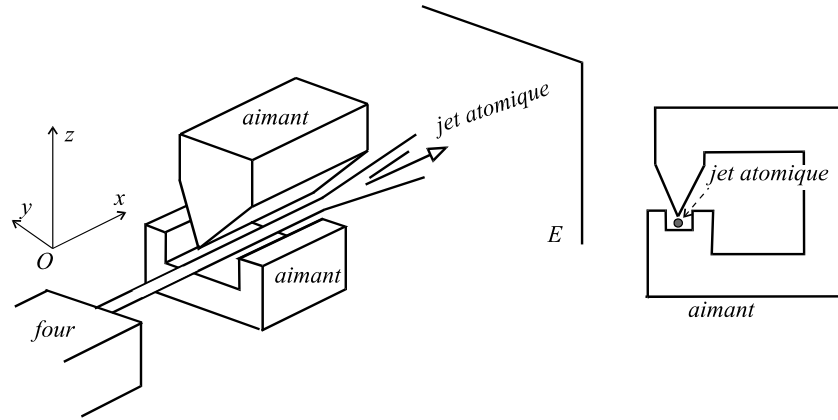


Figure 6-7.

Les atomes pénètrent dans l'entrefer de l'aimant avec la vitesse v (de l'ordre de $\sqrt{k_B T / M_{\text{at}}}$ où M_{at} est la masse de l'atome et T la température du four). Ils possèdent alors un moment magnétique, \vec{m} . Dans l'entrefer de l'aimant, ils sont soumis à un champ magnétique \vec{B} , parallèle à l'axe Oz . Le moment \vec{m} subit alors la précession de Larmor (cf. équation 6.7).

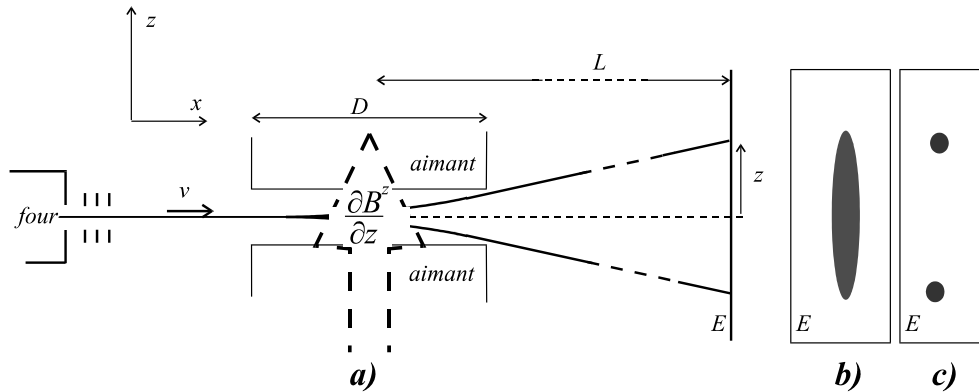


Figure 6-8.

Pendant que l'atome se déplace dans l'entrefer, il effectue plusieurs tours complets autour de \vec{B} . Les composantes m_x et m_y de \vec{m} , sont donc nulles en moyenne, tandis que m_z reste constant (cf. figure 6-4).

La force due au gradient du champ magnétique provient donc de la seule composante m_z . Selon l'expression 6.3 la seule composante non nulle de \vec{F} est $F^z = m_z \frac{\partial B^z}{\partial z}$. Cette force provoque une déviation de la trajectoire des atomes qui dépend de la valeur de la composante m_z de leur moment magnétique (figure 6-8 a).

L'atome considéré entre dans l'entrefer en A; il en sort en B (figure 6-9).

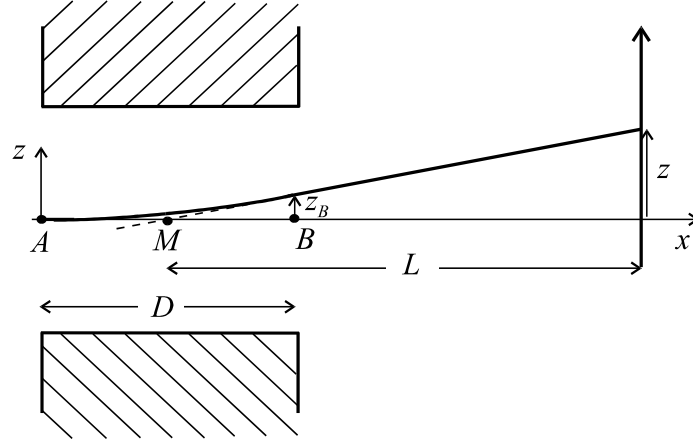


Figure 6-9.

Entre A et B les équations du mouvement sont $x = vt$ et $z = \frac{1}{2} \frac{F^z}{M_{\text{at}}} t^2$. En B il vient $x = D$ et par conséquent $z_B = \frac{1}{2M_{\text{at}}} \frac{\partial B^z}{\partial z} \left(\frac{D}{v}\right)^2 \times m_z$. Entre A et B la trajectoire est parabolique. Le point M de la figure 6-9 est donc le milieu de AB . Entre B et l'écran E , la trajectoire est rectiligne (la pesanteur produit des effets négligeables). On en déduit $\frac{z}{L} = \frac{z_B}{D/2}$:

$$z = \mathcal{A} \times m_z \quad \text{avec} \quad \mathcal{A} = \frac{\partial B^z}{\partial z} \frac{D L}{M_{\text{at}} v^2} \quad (6.8)$$

\mathcal{A} est une fonction d'appareil. L'observation du point d'impact sur l'écran fournit z . Le dispositif de Stern et Gerlach constitue donc un appareil de mesure de m_z .

Les moments magnétiques des atomes issus du four sont orientés au hasard, de façon isotrope. On s'attend donc à une distribution continue des valeurs de m_z , comprises entre $\|\vec{m}\|$ et $-\|\vec{m}\|$ et par conséquent à l'apparition d'une tache s'étendant de $z = -\mathcal{A} \|\vec{m}\|$ à $z = \mathcal{A} \|\vec{m}\|$ (voir la figure 6-8 b).

En réalité, Stern et Gerlach observèrent deux taches (figure 6-8 c). La théorie classique ne peut donc pas expliquer un tel phénomène.

6.3 La théorie de la mesure en mécanique quantique.

6.3.1 La théorie de la mesure

Nous pouvons utiliser la relation de proportionnalité $\vec{m} = \gamma \vec{J}$ (cf. équ. 6.6) pour présenter l'expérience de Stern et Gerlach comme une mesure de J_z plutôt que de m_z . Les résultats de l'expérience s'interprètent alors naturellement dans le cadre de la théorie de la mesure en mécanique quantique. Nous en résumons les traits essentiels.

Nous avons vu la relation de quantification $L = n\hbar$ établie à partir de considérations sur la continuité des ondes de matières (cf. 5.1 page 73). Nous avons indiqué alors que l'introduction des ondes de matière telles que nous les avons mises en oeuvre ne constituait pas une théorie, faute d'équation d'onde. En réalité, \vec{J} étant un moment cinétique quelconque, la théorie quantique prévoit que la mesure de \vec{J}^2 conduit nécessairement au résultat $j(j+1)\hbar^2$ où $2j$ est un entier naturel ($2j \in \mathbb{N}$). Si nous désignons par

J la racine carrée du résultat de la mesure de \vec{J}^2 il vient $J = \sqrt{j(j+1)} \hbar$. Remarquons que le résultat énoncé ici n'est pas en accord avec la relation de quantification. Cependant, pour $j \gg 1$ il vient $J = \sqrt{j(j+1)} \hbar \simeq j \hbar$ mais j n'est pas nécessairement entier, il peut être de la forme $j = k + \frac{1}{2}$ où k est un entier. Dans ce cas on dit que j est "demi entier". Découvrir l'existence d'une relation de quantification était un progrès considérable. Que celle-ci n'ait pas été exacte d'emblée, doit être considéré avec indulgence...

A) De façon générale, la liste des résultats possibles d'une mesure ne dépend que de la grandeur que l'on mesure. Cette grandeur est appelée "**une observable**"; la liste des résultats possible est "**le spectre de l'observable**". Ici le spectre de l'observable \vec{J}^2 est $\{j(j+1) \hbar^2\}$ avec $2j \in \mathbb{N}$.

B) Lorsqu'on effectue une mesure sur un système physique dans un état donné, on obtient un résultat qui est l'une des valeurs du spectre de l'observable. Lorsqu'on recommence la même mesure dans les mêmes conditions, on obtient le plus souvent un résultat différent. En recommençant un très grand nombre de fois dans des conditions identiques, on obtient un ensemble de résultats r_k , en proportion p_k .

La dispersion des résultats d'une mesure que l'on répète peut avoir diverses origines.

1. Recommencer deux mesures dans des conditions identiques est pratiquement impossible; des écarts d'une mesure à l'autre sont donc inévitables. Ce type de dispersion peut être réduit en améliorant les performances des appareils de mesures.
2. Les systèmes que l'on croyait avoir préparés de façon identiques peuvent ne pas être identiques. La encore, une modification de la préparation des systèmes peut améliorer l'homogénéité des résultats.
3. Les autres causes de dispersion étant éliminées, il subsiste, le plus souvent, une dispersion de nature quantique. L'état que nous avons préparé est parfaitement défini mais, en théorie quantique, cela ne veut pas dire que toutes les grandeurs physiques y sont parfaitement définies. En théorie quantique, mesurer une grandeur ce n'est pas seulement déterminer expérimentalement la valeur d'une grandeur qui serait bien définie avant la mesure; mesurer une grandeur c'est mettre en oeuvre une interaction entre le système étudié et un appareil de mesure. Cette interaction modifie le système physique[†] de telle sorte que la grandeur mesurée prenne une valeur bien définie. C'est précisément cette valeur qui est le résultat de la mesure. Il n'est donc pas possible de prédire avec certitude le résultat que l'on obtiendra. On peut seulement, connaissant l'état du système, calculer la probabilité pour que le résultat soit r_k . Selon la loi des grands nombres, cette probabilité est presque certainement p_k (ou très voisine de p_k). L'ensemble des probabilités p_k est une caractéristique de l'état du système physique sur lequel on opère.

C) Ayant préparé un grand nombre de systèmes d'une certaine manière, il peut arriver que tous donnent le même résultat de mesure. Pour ces systèmes, la grandeur est alors bien définie avant sa mesure. La mesure ne change pas cet état; l'appareil se contente de donner le résultat. C'est ce qui se produit si on effectue deux fois de suite la même mesure. La première mesure donne un résultat dont on ne peut prédire que la probabilité *a priori*. Le résultat de la première mesure étant obtenu (et connu), la seconde mesure

[†]L'état physique est décrit par une fonction d'onde et cette modification est appelée "réduction de la fonction d'onde".

donne certainement le même résultat si elle est effectuée immédiatement après la première mesure.

A l'issue du four, tous les atomes d'une espèce donnée, ont même moment cinétique J (pour des températures raisonnables qui laissent ces atomes dans l'état fondamental).

La valeur de j est donnée dans le tableau 1-4 page 9. Dans la troisième colonne on trouve la "formule spectrale" de l'atome considéré. Pour le nickel ($Z = 28$) la formule spectrale est 3F_4 . Le nombre 4 en indice à droite est la valeur de j . Pour certains atomes, j n'est pas indiqué. C'est le cas de l'argent ($Z = 47$) par exemple. Ces atomes ont tous pour formule spectrale kS . La valeur de j est alors $(k - 1)/2$. Ainsi, pour l'argent ($Z = 47$), de la formule spectrale, 2S , on déduit $j = 1/2$.

Pour un système quantique dont la valeur de j est fixée, on mesure J_z , projection de \vec{J} sur l'axe Oz .

La théorie quantique nous enseigne que le spectre de J_z est $\{m \hbar\}$ où m est l'un des nombres de la suite $-j, -j + 1, -j + 2, \text{etc}, j - 1, j$. Pour l'argent, $j = 1/2$, les valeurs possibles de m sont $-1/2$ et $+1/2$. Pour le titane ($Z = 22$) on trouve $j = 2$; les valeurs possibles de m sont $-2, -1, 0, 1$ et 2 . De façon générale il y a $2j + 1$ valeurs possibles de m et par conséquent $2j + 1$ valeurs possibles de $J_z = m\hbar$.

6.3.2 L'expérience de Stern et Gerlach : résultats et interprétation

Lorsque les atomes d'argent sortent du four, ils ont tous même valeur $j = \frac{1}{2}$ (voir le tableau 1-4 page 9). Le spectre de J_z est alors formé de deux valeurs $\left\{-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}\right\}$. Chacune de ces valeurs donne naissance à un jet atomique, dévié de la façon spécifique correspondant à la formule 6.8. On observe donc 2 taches.

Par contre si on effectue l'expérience avec du titane on observe 5 taches dont l'une correspond à un jet d'atomes qui ne sont pas déviés ($m = 0$).

Le nombre de taches sur l'écran permet donc de déterminer la valeur de j .

On peut démontrer que le moment cinétique orbital de l'argent (de configuration électronique $[Kr] 4d^{10}5s$) est nul. Les deux taches s'expliquent alors par l'existence du spin électronique qui confère à l'atome la valeur $j = 1/2$.

Remarquons enfin que la distance entre deux taches sur l'écran est le produit d'une fonction d'appareil et du facteur de Landé de l'atome considéré. Nous montrons ci-dessous (A-2 page 102), comment le modèle vectoriel permet de déterminer les facteurs de Landé des atomes .

6.3.3 Les mesures incompatibles

Supposons que nous percions d'un trou l'écran E de la figure 6-7, au point d'impact du faisceau correspondant à $J_z = \frac{1}{2}\hbar$ (figure 6-10). Derrière l'écran, dans la région II, l'état de J_z est bien défini. Nous utilisons alors le même dispositif pour mesurer J_y . Nous sélectionnons les atomes correspondant à la valeur $J_y = -\frac{1}{2}\hbar$ (figure 6-10).

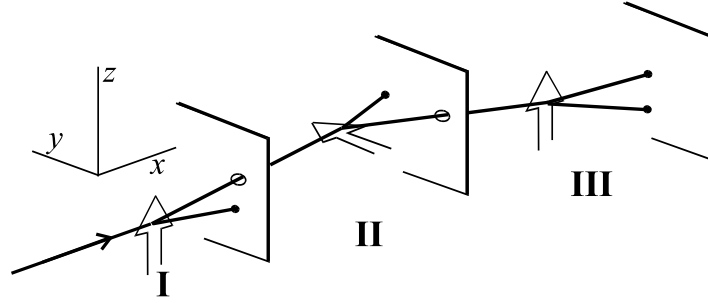


Figure 6-10.

On pourrait penser que dans la région III les grandeurs J_z et J_y sont toutes deux bien définies. C'est vrai pour J_y qui vient d'être mesuré, mais une mesure de J_z dans la région III montre que ce n'est pas le cas pour J_z . C'est là une différence importante entre la théorie classique et la théorie quantique. Nous devons admettre que, dans le cadre de la théorie quantique, **certaines grandeurs sont incompatibles** : elles ne peuvent pas être déterminées simultanément. C'est le cas de J_y et J_z . La valeur de J_z étant bien définie, une mesure de J_y (dans la région II) se traduit par une interaction qui modifie l'état du système. Le résultat en est que les mesures de J_z (dans la région III) présentent alors une dispersion de nature quantique telle que nous l'avons introduite ci-dessus (cf § B 3 page 93).

L'expérience de Stern et Gerlach et ses avatars s'interprètent convenablement dans le cadre de la théorie de la mesure esquissée ci-dessus et en constituent donc une justification.

6.4 Le magnétisme à l'échelle macroscopique

Nous utilisons la relation $\vec{m} = \vec{m}_0 + \Delta\vec{m}$, établie précédemment (paragraphe 6.2.2, page 87). En P , l'aimantation du milieu, \vec{M} , s'exprime donc sous la forme

$$\vec{M} = \vec{M}_0 + \Delta\vec{M} \text{ avec } \vec{M}_0 = N \langle \vec{m}_0 \rangle \text{ et } \Delta\vec{M} = N \langle \Delta\vec{m} \rangle \quad (6.9)$$

où $\langle \vec{m}_0 \rangle$ et $\langle \Delta\vec{m} \rangle$ sont les moyennes de \vec{m}_0 et $\Delta\vec{m}$ sur l'ensemble des atomes contenus dans le volume élémentaire dV entourant le point P , tandis que \vec{B} est le champ magnétique au point P et N le nombre d'atomes par unité de volume.

6.4.1 Le diamagnétisme

Ici nous supposons $\vec{m}_0 = \vec{0}$, ce qui implique $\vec{M}_0 = \vec{0}$. L'expression 6.9 devient

$$\vec{M} = \Delta\vec{M} = -N \frac{Zq_e^2}{4m_e} \rho \vec{B} = \frac{\chi}{\mu_0} \vec{B} \text{ avec } \chi = -N \mu_0 \frac{Zq_e^2}{4m_e} \rho$$

Le terme $\Delta\vec{M}$ est responsable du diamagnétisme ($\chi < 0$).

Pour le bismuth, par exemple, avec $\rho \sim 1\text{\AA}$, $Z = 83$ et $N = 2,8 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ (voir le tableau 1.3 page 8) on obtient l'ordre de grandeur $\chi \sim -2 \cdot 10^{-4}$. Le tableau ci-dessous donne la valeur de la susceptibilité pour quelques corps diamagnétiques dans les conditions usuels (normales pour l'argon et l'hydrogène).

Substance :	bismuth	mercure	eau	argon	hydrogène
$\chi =$	$-1,7 \times 10^{-4}$	$-3,2 \times 10^{-5}$	$-8,8 \times 10^{-6}$	$-9,5 \times 10^{-9}$	$-2,1 \times 10^{-9}$

6.4.2 Le paramagnétisme

Pour étudier le paramagnétisme, c'est à dire l'effet des moments magnétiques \vec{m}_0 introduits ci-dessus (paragraphe 6.2.2 ou 6.2.3) nous négligeons les effets du diamagnétisme qui est toujours présent mais est dans ce cas négligeable.

Nous considérons un ensemble de systèmes atomiques présentant le même facteur de Landé g . Dans ces conditions, il vient $\vec{m} = g \frac{q_e}{2m_e} \vec{J}$, selon l'expression 6.6.

Ces atomes sont soumis au champ magnétique uniforme, $\vec{B} = B \vec{k}$ où \vec{k} est le vecteur unitaire suivant l'axe Oz . Les valeurs possibles de la composante m_z du moment magnétique des atomes sont $m_z = m g \frac{q_e}{2m_e} \hbar := -m g |\mu_B|$ avec $m = -j, -j + 1, \text{etc.}, j$.

A chaque valeur de m correspond une valeur de l'énergie par atome : $U_m = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -B m_z = m g |\mu_B| B$ (voir la relation 6.4 dans le cas où $\vec{\mu}$ est indépendant de \vec{B} , c'est-à-dire en négligeant le diamagnétisme).

Les valeurs de m ne se répartissent pas uniformément entre les divers atomes. Deux tendances se contrarient : une tendance naturelle à réaliser un équilibre aussi stable que possible, c'est-à-dire à disposer d'une énergie minimale[†], et une tendance à l'"isotropisation" des moments magnétiques sous l'effet de l'agitation thermique. Les lois de l'équilibre thermodynamique conduisent au compromis suivant lequel les valeurs de m se répartissent en proportion $p_m = \Lambda e^{-U_m/k_B T}$.

Λ s'obtient en écrivant que la somme des proportions est égale à l'unité :

$$\Lambda \times \sum_{m=-j}^j e^{-U_m/k_B T} = 1.$$

La composante m_z du moment magnétique admet pour valeur moyenne $\langle m_z \rangle = \sum_{m=-j}^j p_m (-m g |\mu_B|)$.

Les composantes m_x et m_y du moment magnétique admettent une valeur moyenne nulle, car le système présente une symétrie de révolution statistique autour de l'axe Oz .

L'intensité d'aimantation du milieu est donc $\vec{M} = N \langle m_z \rangle \vec{k} = \frac{N \langle m_z \rangle}{B} \vec{B}$ où N est le nombre d'atomes par unité de volume. La relation $\mu_0 \vec{M} = \chi \vec{B}$ permet de trouver la susceptibilité magnétique $\chi = \mu_0 \frac{\langle m_z \rangle}{B} N$.

Etudions comme exemple le cas $j = 1/2, g = 2$.

Les deux valeurs de m sont $\pm \frac{1}{2}$. Les valeurs de l'énergie sont $U_{\pm} = \pm |\mu_B| B$; ces valeurs sont celles de l'énergie d'atomes présents en proportion $p_{\pm} = \Lambda e^{(\pm g |\mu_B| B)/(2k_B T)}$. On en déduit $\Lambda (e^{-(|\mu_B| B)/(k_B T)} + e^{(|\mu_B| B)/(k_B T)}) = 1$, d'où

$$\Lambda = \frac{2}{\cosh(X)} \text{ avec } X := \frac{|\mu_B| B}{k_B T}.$$

On rappelle que $\cosh x$ est le "cosinus hyperbolique de x ", défini par la relation $\cosh x := \frac{e^x + e^{-x}}{2}$.

Résumons sous forme de tableau les divers cas possibles.

[†]Dans l'état d'énergie minimale, \vec{m} s'aligne sur \vec{B} , dans le même sens.

$m = \frac{1}{2}$	$p_+ = \frac{2 e^{-X}}{\cosh X}$	$U_+ = \mu_B B$	$(m_z)_+ = - \mu_B $
$m = -\frac{1}{2}$	$p_- = \frac{2 e^X}{\cosh X}$	$U_- = - \mu_B B$	$(m_z)_- = \mu_B $

On détermine aisément les valeurs moyennes :

1. $\langle U \rangle := p_+ \times U_+ + p_- \times U_- = |\mu_B| B \times (p_+ - p_-) = -|\mu_B| \tanh X \times B$
2. $\langle m_z \rangle = p_+ \times (-|\mu_B|) + p_- \times (|\mu_B|) = |\mu_B| (p_- - p_+) = |\mu_B| \tanh X$

On rappelle que $\tanh X :=$ tangente hyperbolique $X := \frac{\sinh X}{\cosh X} = \frac{e^X - e^{-X}}{e^X + e^{-X}}$

avec $\sinh X :=$ sinus hyperbolique $X := \frac{e^X - e^{-X}}{2}$.

Le milieu présente donc une susceptibilité magnétique $\chi = \mu_0 \frac{\langle m_z \rangle}{B} N :$

$\chi = \mu_0 \frac{|\mu_B|}{B} \tanh \left(\frac{|\mu_B| B}{k_B T} \right) \times N > 0$. La susceptibilité du milieu est positive; le milieu est donc paramagnétique.

Dans le cas général on trouve[†]

$$\vec{M} = N g j |\mu_B| B_j(X) \frac{\vec{B}}{B} \text{ avec } X := g j \frac{|\mu_B| B}{k_B T} \text{ et}$$

$$B_j(X) := \frac{2j+1}{2j} \frac{1}{\tanh [(2j+1) X / (2j)]} - \frac{1}{2j} \frac{1}{\tanh [X / (2j)]}$$

$B_j(X)$ est "la fonction de Brillouin". Nous représentons l'allure du graphe de la fonction $X \mapsto j B_j(X)$ figure 6-11.

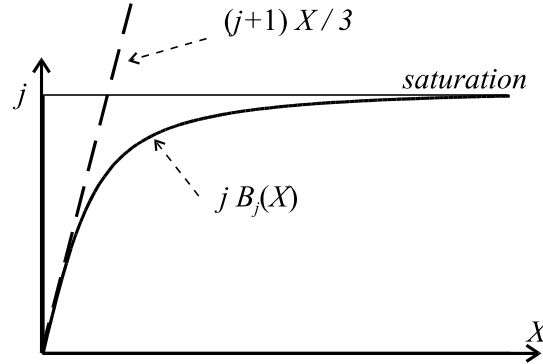


Figure 6-11.

En champ fort, c'est-à-dire pour $X \gg 1$ ce qui implique $|B| \gg k_B T / |\mu_B|$, les moments magnétiques sont presque tous orientés suivant \vec{B} : c'est la "saturation". On remarquera que c'est à basse température que l'on peut s'approcher de la saturation pour des valeurs de B pas trop élevées[‡].

[†] Consulter C. Kittel, *introduction à la physique de l'état solide*, Dunod éditeur (Paris).

[‡] La situation est différente pour les matériaux ferromagnétiques que nous n'étudions pas ici.

Pour $X := g j \frac{|\mu_B| B}{k_B T} \ll 1$, c'est à dire dans la plupart des situations physiques rencontrées ordinairement (sauf les basses températures), il vient

$$\vec{\mathcal{M}} = \frac{N g^2 j(j+1) \mu_B^2}{3 k_B T} \vec{B} \text{ et par conséquent, } \chi = \frac{N \mu_0 g^2 j(j+1) \mu_B^2}{3 k_B T} := \frac{C}{T}$$

la loi de décroissance (en $1/T$) de la susceptibilité magnétique en fonction de la température est appelée "*loi de Curie*".

Le tableau ci-dessous donne la valeur de la susceptibilité de quelques substances à la température ordinaire.

Substance :	platine	aluminium	oxygène ^(†)	air ^(†)
Susceptibilité, χ :	$2,9 \times 10^{-4}$	$2,1 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-6}$	$3,7 \times 10^{-7}$

(†) : dans les conditions normales.

6.5 Conclusion

Nous n'avons pas considéré le magnétisme d'origine nucléaire. Celui-ci est pourtant bien présent. Les moments magnétiques des noyaux sont généralement exprimés sous la forme $\vec{m}_N = g_N \frac{e}{2m_P} \vec{I}_N$ où \vec{I}_N est le spin du noyau et m_P la masse du proton, tandis que g_N est le facteur de Landé nucléaire. Comme pour l'étude du magnétisme électronique $\|\vec{I}_N\|$ est de l'ordre de quelques \hbar et g_N de l'ordre de quelques unités ; par conséquent $\|\vec{m}_N\| \sim \frac{m_e}{m_P} \|\vec{m}\|$ où $\|\vec{m}\|$ est le moment d'origine électronique. Les moments magnétiques d'origine nucléaire sont généralement beaucoup plus petits que les moments d'origine électronique car $m_e \ll m_P$. On peut cependant les étudier et en utiliser les propriétés par des méthodes spécifiques, au moyen de la résonance magnétique par exemple.

Le magnétisme atomique est un domaine qui nous a beaucoup appris sur la physique de l'atome et la physique quantique. Ce n'est pas surprenant car on peut démontrer que le magnétisme est de nature purement quantique (théorème de "Miss" J. H. van Leeuwen). La raison est la suivante : s'il n'y avait pas quantification des orbites dans le modèle de Bohr, toutes les énergies et toutes les orbites seraient acceptables. On démontre que dans ces conditions les termes diamagnétiques compenseraient exactement les termes paramagnétiques, à l'équilibre thermodynamique, et qu'aucun moment magnétique n'apparaîtrait.

Sur le plan pratique, mentionnons que le magnétisme électronique et le magnétisme nucléaire fournissent des moyens puissants d'analyse non destructive, par exemple en chimie et en médecine où le développement de l'imagerie par résonance magnétique (IRM) nous a donné un outil de diagnostic irremplaçable aujourd'hui.

Sur le plan théorique, soulignons tout particulièrement l'importance qu'il faut attacher à l'expérience de Stern et Gerlach pour l'interprétation des mesures en mécanique quantique.

Annexes

A-1. Théorème de Larmor

a- Préalables

Considérons deux repères. Le repère $R = \{O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{k}\}$ est un repère galiléen, orthonormé tandis que le repère $R_T = \{O; \vec{I}, \vec{J}, \vec{K} = \vec{k}\}$ est un repère orthonormé, tournant autour de l'axe \vec{k} avec une vitesse angulaire instantanée $\vec{\Omega} = \Omega \vec{k}$ (figure 6-2).

A l'instant t il vient

$$\vec{I} = \cos \theta \vec{i} + \sin \theta \vec{j}, \quad \vec{J} = -\sin \theta \vec{i} + \cos \theta \vec{j}, \quad \vec{K} = \vec{k}$$

A l'instant $t + dt$, l'angle θ de la figure 6-2 a augmenté de $d\theta = \Omega dt$. Le vecteur \vec{I} a subit la variation

$$d\vec{I} = \frac{d\vec{I}}{d\theta} \Omega dt = \vec{J} \Omega dt = \vec{K} \wedge \vec{I} \Omega dt = \vec{\Omega} \wedge \vec{I} dt$$

Un calcul analogue peut être effectué pour les vecteurs \vec{J} et \vec{K} . On en déduit

$$\frac{d\vec{I}}{dt} = \vec{\Omega} \wedge \vec{I}, \quad \frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\Omega} \wedge \vec{J}, \quad \frac{d\vec{K}}{dt} = \vec{\Omega} \wedge \vec{K} = \vec{0}$$

Considérons maintenant un vecteur, \vec{V} , constant par rapport au repère tournant; par définition, il s'exprime sous la forme $\vec{V} = a\vec{I} + b\vec{J} + c\vec{K}$ où a, b et c sont des constantes. Par conséquent, en dérivant par rapport au temps il vient

$$\boxed{\frac{d\vec{V}}{dt} = \vec{\Omega} \wedge \vec{V}} \quad (6.10)$$

Cette relation est très générale. Elle caractérise un mouvement de rotation quelconque dans lequel $\vec{\Omega}$ est la vitesse angulaire instantanée de rotation. Dans le cas général, $\vec{\Omega}$ n'est pas nécessairement assujéti à rester parallèle à un vecteur \vec{k} donné, ainsi que nous l'avons supposé ici.

Considérons maintenant le vecteur \vec{r} :

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} = X\vec{I} + Y\vec{J} + Z\vec{K}$$

Dérivons \vec{r} par rapport au temps :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{r}}{dt} &= \frac{dx}{dt}\vec{i} + \frac{dy}{dt}\vec{j} + \frac{dz}{dt}\vec{k} = \frac{dX}{dt}\vec{I} + \frac{dY}{dt}\vec{J} + \frac{dZ}{dt}\vec{K} \\ &+ X\frac{d\vec{I}}{dt} + Y\frac{d\vec{J}}{dt} + Z\frac{d\vec{K}}{dt} \end{aligned}$$

On définit

1. la vitesse par rapport à R ou "vitesse absolue" : $\vec{v}_{/R} = \frac{dx}{dt}\vec{i} + \frac{dy}{dt}\vec{j} + \frac{dz}{dt}\vec{k}$,
2. la vitesse par rapport à R_T ou "vitesse relative" : $\vec{v}_{/R_T} = \frac{dX}{dt}\vec{I} + \frac{dY}{dt}\vec{J} + \frac{dZ}{dt}\vec{K}$,
3. la vitesse d'entraînement : $\vec{v}_E = X\frac{d\vec{I}}{dt} + Y\frac{d\vec{J}}{dt} + Z\frac{d\vec{K}}{dt} = \vec{\Omega} \wedge \vec{r}$.

Il vient

$$\boxed{\vec{v}/R = \vec{v}/R_T + \vec{v}_E = \vec{v}/R_T + \vec{\Omega} \wedge \vec{r}} \quad (6.11)$$

Dérivons une seconde fois :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} &= \frac{d^2 x}{dt^2} \vec{i} + \frac{d^2 y}{dt^2} \vec{j} + \frac{d^2 z}{dt^2} \vec{k} \\ &= \frac{d^2 X}{dt^2} \vec{I} + \frac{d^2 Y}{dt^2} \vec{J} + \frac{d^2 Z}{dt^2} \vec{K} + \frac{dX}{dt} \frac{d\vec{I}}{dt} + \frac{dY}{dt} \frac{d\vec{J}}{dt} + \frac{dZ}{dt} \frac{d\vec{K}}{dt} \\ &\quad + \frac{d\vec{\Omega}}{dt} \wedge \vec{r} + \vec{\Omega} \wedge \frac{d\vec{r}}{dt} \end{aligned}$$

Cette expression s'écrit encore

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} &= \frac{d^2 X}{dt^2} \vec{I} + \frac{d^2 Y}{dt^2} \vec{J} + \frac{d^2 Z}{dt^2} \vec{K} + \vec{\Omega} \wedge \vec{v}/R_T \\ &\quad + \frac{d\vec{\Omega}}{dt} \wedge \vec{r} + \vec{\Omega} \wedge (\vec{v}/R_T + \vec{\Omega} \wedge \vec{r}) \end{aligned}$$

On définit

1. l'accélération par rapport à R ou "accélération absolue" :

$$\vec{\gamma}/R = \frac{d^2 x}{dt^2} \vec{i} + \frac{d^2 y}{dt^2} \vec{j} + \frac{d^2 z}{dt^2} \vec{k},$$

2. l'accélération par rapport à R_T ou "accélération relative" :

$$\vec{\gamma}/R_T = \frac{d^2 X}{dt^2} \vec{I} + \frac{d^2 Y}{dt^2} \vec{J} + \frac{d^2 Z}{dt^2} \vec{K},$$

3. l'accélération d'entraînement : $\vec{\gamma}_E = \frac{d\vec{\Omega}}{dt} \wedge \vec{r} + \vec{\Omega} \wedge (\vec{\Omega} \wedge \vec{r})$,

4. l'accélération de Coriolis : $\vec{\gamma}_C = 2\vec{\Omega} \wedge \vec{v}/R_T$.

Il vient

$$\boxed{\vec{\gamma}/R = \vec{\gamma}/R_T + \vec{\gamma}_C + \vec{\gamma}_E}$$

b- Le théorème de Larmor

Considérons un électron dont la position est donnée par \vec{r} , particule ponctuelle de masse m_e et de charge q_e , soumis à la force \vec{F} . Cette force est la force de Coulomb qu'exercent les autres charges de l'atome. C'est une fonction de leur position \vec{r}_k par l'intermédiaire de $\vec{r} - \vec{r}_k$.

Dans le repère R , supposé galiléen, les équations de la dynamique s'écrivent

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r} - \vec{r}_k) \quad (6.12)$$

Appliquons maintenant sur le système physique, un champ magnétique $\vec{B} = B \vec{k}$, uniforme. Il vient

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F} + q_e \vec{v} \wedge \vec{B}$$

où \vec{v} est la vitesse de la charge considérée.

Considérons un repère tournant R_T . Exprimons la vitesse \vec{v} et l'accélération $\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$ en fonction des quantités relatives au repère tournant.

$$m_e (\vec{\gamma}_{/R_T} + \vec{\gamma}_C + \vec{\gamma}_E) = \vec{F} + q_e (\vec{v}_{/R_T} + \vec{v}_E) \wedge \vec{B}$$

En remplaçant les divers termes par leur expression, on obtient

$$\begin{aligned} \vec{F} + q_e \vec{v}_{/R_T} \wedge \vec{B} + q_e (\vec{\Omega} \wedge \vec{r}) \wedge \vec{B} &= m_e \vec{\gamma}_{/R_T} + 2m_e \vec{\Omega} \wedge \vec{v}_{/R_T} \\ &+ m_e \frac{d\vec{\Omega}}{dt} \wedge \vec{r} + m_e \vec{\Omega} \wedge (\vec{\Omega} \wedge \vec{r}) \end{aligned} \quad (6.13)$$

Posons

$$\vec{\Omega} = \boxed{-\frac{q_e}{2m_e} \vec{B} := \vec{\Omega}_L}$$

L'équation 6.13 s'écrit

$$m_e \vec{\gamma}_{/R_L} = \vec{F} + \frac{q_e}{2} \frac{d\vec{B}}{dt} \wedge \vec{r} + \frac{q_e^2}{4m_e} \vec{B} \wedge (\vec{B} \wedge \vec{r}) \quad (6.14)$$

Dans l'atome, la force \vec{F} est due à la présence d'un champ électrique, \vec{E} ; celui-ci est engendré par des charges de l'ordre de $\pm e$ à une distance, r , de l'ordre de 1\AA ; on trouve $\|\vec{F}\| \sim \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$. Les deux derniers termes de l'expression 6.14 sont donc négligeables lorsque $\left\| \frac{d\vec{B}}{dt} \right\| \ll \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e}{r^3} \sim 3 \cdot 10^{21} \text{ T s}^{-1}$ et $\|\vec{B}\| \ll \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4m_e}{r^3} \right)^{1/2} \sim 2 \cdot 10^5 \text{ T}$. Ces conditions sont généralement satisfaites en laboratoire mêmes dans des cas extrêmes. On obtient donc l'expression

$$m_e \vec{\gamma}_{/R_L} = \vec{F} \quad (6.15)$$

où \vec{F} est seulement fonction des positions relatives des diverses charges. Dans l'atome, les charges en présence sont le noyau de charge Ze , situé à l'origine conformément à nos hypothèses, et les électrons situés en M_k tel que $\vec{OM}_k = x_k \vec{i} + y_k \vec{j} + z_k \vec{k} = X_k \vec{I} + Y_k \vec{J} + Z_k \vec{K}$ avec $k = 1, 2, \text{etc.}$, Z . La force qui s'exerce sur l'électron j est donc :

$$\begin{aligned} \vec{F}_j &= \sum_{k \neq j} \frac{e^2 \left((x_j - x_k) \vec{i} + (y_j - y_k) \vec{j} + (z_j - z_k) \vec{k} \right)}{4\pi\epsilon_0 \left((x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2 + (z_j - z_k)^2 \right)^{3/2}} - \frac{Ze^2 \left(x_j \vec{i} + y_j \vec{j} + z_j \vec{k} \right)}{4\pi\epsilon_0 \left(x_j^2 + y_j^2 + z_j^2 \right)^{3/2}} \\ &= \sum_{k \neq j} \frac{e^2 \left((X_j - X_k) \vec{I} + (Y_j - Y_k) \vec{J} + (Z_j - Z_k) \vec{K} \right)}{4\pi\epsilon_0 \left((X_j - X_k)^2 + (Y_j - Y_k)^2 + (Z_j - Z_k)^2 \right)^{3/2}} - \frac{Ze^2 \left(X_j \vec{I} + Y_j \vec{J} + Z_j \vec{K} \right)}{4\pi\epsilon_0 \left(X_j^2 + Y_j^2 + Z_j^2 \right)^{3/2}} \end{aligned}$$

Une équation du type de l'équation 6.15 existe pour chaque électron de l'atome. L'ensemble de ces équations exprime $\frac{d^2 X_j}{dt^2}$, $\frac{d^2 Y_j}{dt^2}$ et $\frac{d^2 Z_j}{dt^2}$ en fonction de $\{X_k, Y_k, Z_k\}$ (pour les diverses valeurs de j et k). Ces équations sont identiques aux équations 6.12 qui expriment $\frac{d^2 x_j}{dt^2}$, $\frac{d^2 y_j}{dt^2}$ et $\frac{d^2 z_j}{dt^2}$ en fonction de $\{x_k, y_k, z_k\}$, seules les notations changent.

Appliquons sur un atome le champ magnétique $B \vec{k}$. A l'échelle de l'atome, B est supposé uniforme. Il est initialement nul et atteint une valeur constante après un certain temps. Initialement le repère de Larmor est confondu avec le repère fixe (car $B = 0 \Rightarrow \vec{\Omega}_L = \vec{0}$). Par la suite, à chaque instant, dans le repère de Larmor, les coordonnées de chaque électron satisfont les mêmes équations (aux notations près) que dans le repère fixe en l'absence de champ magnétique. Il en est de même du noyau qui reste à l'origine ($x_N = y_N = z_N = 0 = X_N = Y_N = Z_N$). L'atome est donc décrit par l'observateur tournant comme l'aurait décrit l'observateur fixe s'il n'y avait pas eu de champ magnétique appliqué. Cette propriété constitue **le théorème de Larmor**.

A-2. Le modèle vectoriel de l'atome

L'étude du magnétisme atomique nécessite la connaissance du facteur de Landé. Celui-ci est convenablement calculé dans la plupart des cas au moyen du modèle vectoriel (figure 6-12.).

Le moment cinétique, \vec{J} , d'un système isolé est un vecteur constant. Sous l'effet des champs magnétiques internes à l'atome, le moment magnétique instantané tourne autour du moment cinétique; dans ces conditions, le moment magnétique effectif est la moyenne temporelle de la projection sur \vec{J} du moment magnétique instantané. Il est proportionnel au moment cinétique.

Nous considérons un système formé par deux sous-systèmes de moments magnétiques $\vec{\mu}_1$ et $\vec{\mu}_2$ et de moments cinétiques \vec{J}_1 et \vec{J}_2 . Le moment magnétique total est $\vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$. La projection de $\vec{\mu}$ sur \vec{J} est $\vec{m} = \frac{(\vec{\mu} \cdot \vec{J})}{J^2} \vec{J}$. En remplaçant $\vec{\mu}$ par $\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$, il vient $\vec{m} = \frac{\vec{\mu}_1 \cdot \vec{J} + \vec{\mu}_2 \cdot \vec{J}}{J^2} \vec{J}$ avec $\vec{\mu}_1 = g_1 \frac{q_e}{2m_e} \vec{J}_1$ et $\vec{\mu}_2 = g_2 \frac{q_e}{2m_e} \vec{J}_2$ où g_1 et g_2 sont les facteurs de Landé associés aux moments cinétiques \vec{J}_1 et \vec{J}_2 . On en déduit $\vec{m} = \frac{q_e}{2m_e} \times \frac{g_1 \vec{J}_1 \cdot \vec{J} + g_2 \vec{J}_2 \cdot \vec{J}}{J^2} \vec{J}$.

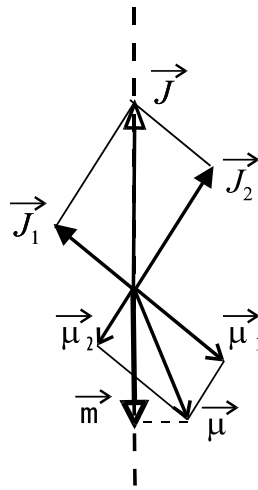


Figure 6-12.

On introduit le facteur de Landé, g , associé au moment cinétique \vec{J} en posant

$\vec{m} = g \frac{q_e}{2m_e} \vec{J}$. Il vient $g = \frac{g_1 \vec{J}_1 \cdot \vec{J} + g_2 \vec{J}_2 \cdot \vec{J}}{\vec{J}^2}$. La relation $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ s'écrit $\vec{J}_2 = \vec{J} - \vec{J}_1$.

En élevant au carré, on obtient $(\vec{J}_2)^2 = (\vec{J})^2 + (\vec{J}_1)^2 - 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}$ soit $\vec{J}_1 \cdot \vec{J} = \frac{1}{2} \left((\vec{J})^2 + (\vec{J}_1)^2 - (\vec{J}_2)^2 \right)$. De même il vient $\vec{J}_2 \cdot \vec{J} = \frac{1}{2} \left((\vec{J})^2 + (\vec{J}_2)^2 - (\vec{J}_1)^2 \right)$. On en déduit

$$g = \frac{g_1 + g_2}{2} + \frac{g_1 - g_2}{2} \times \frac{(\vec{J}_1)^2 - (\vec{J}_2)^2}{(\vec{J})^2}$$

Au moment cinétique \vec{J}_1 est associé le nombre quantique j_1 tel que le résultat de la mesure de \vec{J}_1^2 est $j_1(j_1 + 1) \hbar^2$. De même j_2 et j sont associés à \vec{J}_2 et \vec{J} . On remplace $(\vec{J}_1)^2$, $(\vec{J}_2)^2$ et $(\vec{J})^2$ par le résultat des mesures correspondantes et on obtient

$$g_j = \frac{g_1 + g_2}{2} + \frac{g_1 - g_2}{2} \times \frac{j_1(j_1 + 1) - j_2(j_2 + 1)}{j(j + 1)} \quad (6.16)$$

Pour chaque atome dans son état fondamental, le moment cinétique \vec{J} est la combinaison du moment orbital des électrons, $\vec{J}_1 := \vec{L}$, et du moment de spin $\vec{J}_2 := \vec{S}$. Les nombres quantiques correspondants $j_1 := L$ et $j_2 := S$ sont donnés par la formule spectrale de l'atome que l'on trouve dans la troisième colonne du tableau 1-4 page 9. La formule spectrale se présente sous la forme $^{2S+1}L_j$. La notation qui permet de lire la

valeur de L est la suivante :

	S	P	D	F	<i>etc.</i>
$L =$	0	1	2	3	<i>etc.</i>

Le nickel ($Z = 28$) par exemple a pour formule spectrale 3F_4 . Il faut comprendre $2S + 1 = 3$, soit $S = 1$ et $L = "F" = 3$. Quant à j , nous avons appris à le calculer au paragraphe 6.3.1 page 93, qu'il soit ou non mentionné dans la formule spectrale; ici $j = 4$.

L'aluminium ($Z = 13$) a pour formule $^2P_{1/2}$ correspondant à $S = 1/2$, $L = 1$ et $j = 1/2$. A $\vec{J}_1 := \vec{L}$ est associé un facteur de Landé $g_1 = g_L = 1$, tandis qu'à $\vec{J}_2 := \vec{S}$ est associé le facteur de Landé $g_2 = g_S = 2$ (cf. 6.1 page 84). En utilisant l'expression 6.16, pour l'aluminium il vient : $g = \frac{3}{2} + \frac{1-2}{2} \times \frac{(1)(1+1) - (1/2)(1/2+1)}{(1/2)(1/2+1)} = \frac{2}{3}$.

Le moment magnétique est $\vec{m} = \frac{2}{3} \frac{q_e}{2m_e} \vec{J} = \frac{q_e}{3m_e} \vec{J}$. La mesure de $(\vec{m})^2$ peut donner le résultat $\left(\frac{q_e}{3m_e} \right)^2 j(j+1) \hbar^2$ avec $j = 1/2$ pour l'aluminium, il vient $(\vec{m})^2 = \frac{1}{3} \mu_B^2$. Les valeurs possibles de J_z étant $-j\hbar = -\frac{1}{2}\hbar$ et $\frac{1}{2}\hbar = j\hbar$, on en déduit les valeurs possibles de $(\vec{m})_z$ qui sont $\frac{\mu_B}{3}$ et $-\frac{\mu_B}{3}$.

Supposons que l'atome d'aluminium soit placé dans un champ magnétique \vec{B} . La droite qui porte \vec{B} est choisie comme axe Oz . La mesure algébrique de \vec{B} est notée B . L'expression 6.4 page 85 donne l'énergie du système : $U = -B(\vec{m})_z$. Deux valeurs peuvent être observées selon la valeur de $(\vec{m})_z$: ce sont $-\frac{B\mu_B}{3}$ et $\frac{B\mu_B}{3}$.

Conclusion : vers la mécanique ondulatoire

Le passage de l'ancienne théorie des quanta à la notion d'onde de matière représentait un progrès important mais encore insuffisant à bien des égards. L'étape décisive fut franchie par Schrödinger en proposant une équation d'onde non relativiste et en l'appliquant à de nombreux problèmes (1926). En guise de conclusion au cours de physique atomique, nous établissons cette équation dans le cas le plus simple où les particules ne sont soumises à aucune force.

Considérons une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k} := \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$ où λ est la longueur d'onde tandis que \vec{u} est le vecteur unitaire suivant la propagation. Une telle onde est de la forme $\psi = \psi_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. La quantité ψ représente la valeur de l'onde au point repéré par le vecteur \vec{r} . Si l'on étudie une onde sonore dans l'air, ψ représente une pression acoustique, si c'est une onde électromagnétique dans le vide, ψ est une composante du champ électrique par exemple. Dans le cas des ondes de matière, ψ est la "fonction d'onde" nous n'en dirons pas plus mais nous précisons l'utilité de ψ et la façon dont on en déduit les propriétés physiques intéressantes (voir le cours de mécanique ondulatoire).

L'étude de l'effet Compton a montré que les photons possèdent une impulsion $p = \frac{h\nu}{\lambda}$ dirigée suivant le sens de propagation de l'onde qui leur est associée, ce qui implique

$$\boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}} \quad (\text{C.1})$$

Cette relation est précisément celle que postule Louis de Broglie pour les ondes de matière.

L'amplitude de l'onde, ψ_0 , est généralement une fonction du temps, $Ae^{-i\omega t}$ par exemple. La pulsation de l'onde est alors la constante ω . Si cette onde est une onde électromagnétique, l'énergie du photon, E , s'exprime en fonction de la pulsation de l'onde :

$$\boxed{E = \hbar\omega} \quad (\text{C.2})$$

A l'instar de la relation C.1, cette relation est considérée comme très générale, satisfaite aussi bien par les photons que par les corpuscules matériels. Ce qui distingue les photons et les corpuscules matériels, ce sont les relations entre E et \vec{p} qui diffèrent.

Nous considérons donc les ondes de la forme

$$\boxed{u = e^{-i\omega t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}} \quad (\text{C.3})$$

Nous les interprétons comme des ondes dont **les quanta associés ont pour énergie $\hbar\omega$ et pour impulsion $\hbar \vec{k}$** . La relation entre E et \vec{p} étant connue, nous en déduisons

la relation entre ω et \vec{k} . Une telle relation est appelée "**relations de dispersion**". La relation de dispersion étant donnée, on peut considérer pour simplifier que ω est une fonction connue de \vec{k} : on pose $u_{\vec{k}}(t, \vec{r}) := e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. L'onde la plus générale est une combinaison linéaire d'ondes $u_{\vec{k}}(t, \vec{r})$ que l'on écrit sous la forme

$$\psi(t, \vec{r}) = \iiint \Lambda_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(t, \vec{r}) dk_x dk_y dk_z$$

On vérifie aisément[†] les relations $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{\vec{k}} = \hbar\omega u_{\vec{k}}$ et $-i\hbar \vec{\nabla} u_{\vec{k}} = \hbar\vec{k} u_{\vec{k}}$, soit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_{\vec{k}} = E u_{\vec{k}} \quad \text{et} \quad -i\hbar \vec{\nabla} u_{\vec{k}} = \vec{p} u_{\vec{k}} \quad (\text{C.4})$$

Notre propos est d'établir une équation d'onde pour les ondes ψ , à partir de la relation de dispersion. Cette équation doit être satisfaite quelque soit $\Lambda_{\vec{k}}$.

Nous considérons trois exemples correspondant à des particules libres.

1- Les particules libres relativistes de masse m satisfont la relation

$$E^2 - c^2 \vec{p}^2 = m^2 c^4 \quad (\text{C.5})$$

En utilisant les relations C.4 il vient $E^2 u_{\vec{k}} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u_{\vec{k}}$ et $\vec{p}^2 u_{\vec{k}} = -\hbar^2 \Delta u_{\vec{k}}$ où Δ est le laplacien[‡].

Chaque onde élémentaire $u_{\vec{k}}$ satisfait l'équation

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} u_{\vec{k}} - c^2 (-\hbar^2 \Delta u_{\vec{k}}) = m^2 c^4 u_{\vec{k}} \Leftrightarrow \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} u_{\vec{k}} - \Delta u_{\vec{k}} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} u_{\vec{k}} = 0.$$

L'opérateur $\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta$ est le "**dalembertien**" (d'après d'Alembert); on le note

par le symbole \square . Les ondes élémentaires satisfont l'équation $\square u_{\vec{k}} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} u_{\vec{k}} = 0$. Toute combinaison linéaire des $u_{\vec{k}}$ satisfait la même équation. On en déduit l'équation d'onde satisfaite par ψ (équation d'onde d'une particule libre relativiste de masse m) :

$$\square \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0$$

Cette équation est connue sous le nom d'équation de Klein-Gordon.

2- Pour les particules de masse nulle (les photons par exemple), en posant $m = 0$, il vient :

$$E^2 - c^2 \vec{p}^2 = 0 \quad \text{et} \quad \square \psi = 0 \quad (\text{C.6})$$

L'équation de Klein-Gordon devient l'équation de d'Alembert.

[†]Rappelons la définition du gradient : $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \Leftrightarrow \vec{\nabla} f(\vec{r}) = \frac{\partial f}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{k}$.

[‡]Rappelons la définition du laplacien : $\Delta := \vec{\nabla}^2 \Leftrightarrow \Delta f(\vec{r}) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$.

3- Les particules non relativistes sont caractérisées par les relations $E = mc^2 + \mathcal{E}$ avec $\mathcal{E} \ll mc^2$. Ici on pose $E = \hbar\Omega$ et $\mathcal{E} = \hbar\omega$. Il vient $u_{\vec{k}} = e^{-i\Omega t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = e^{-i(mc^2/\hbar + \omega)t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. L'onde la plus générale s'écrit : $\psi = \iiint \Lambda_{\vec{k}} e^{-i(mc^2/\hbar + \omega)t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk_x dk_y dk_z$. Nous posons $\Lambda_{\vec{k}} = |\Lambda_{\vec{k}}| e^{i\varphi_{\vec{k}}}$, il vient $\psi = e^{-imc^2 t/\hbar} \iiint |\Lambda_{\vec{k}}| e^{i\varphi_{\vec{k}}} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk_x dk_y dk_z$.

La différence de phase entre les composantes \vec{k} et $\vec{\ell}$ de l'onde ψ est de la forme

$$\left(\varphi_{\vec{k}} - mc^2 t/\hbar - \omega_{(\vec{k})} t + \vec{k} \cdot \vec{r} \right) - \left(\varphi_{\vec{\ell}} - mc^2 t/\hbar - \omega_{(\vec{\ell})} t + \vec{\ell} \cdot \vec{r} \right)$$

Cette différence est la même que la différences de phase entre les composantes \vec{k} et $\vec{\ell}$ de l'onde $\psi' = \iiint \Lambda_{\vec{k}} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk_x dk_y dk_z$, or ce sont ces différences de phase qui jouent un rôle physique, dans les expériences d'interférences par exemple. Les ondes ψ et ψ' présentent donc des propriétés physiques identiques : elles décrivent un même état physique ; nous retrouverons un résultat semblable, encore que plus général, en mécanique quantique. Pour ces raisons, nous considérons que, dans le cas non relativiste, l'onde la plus générale est de la forme $\psi = \iiint \Lambda_{\vec{k}} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk_x dk_y dk_z$.

De plus, la relation C.5 s'écrit $(mc^2 + \mathcal{E})^2 - c^2 \vec{p}^2 = m^2 c^4$, soit $\mathcal{E} \simeq \frac{\vec{p}^2}{2m}$ à l'approximation non relativiste (c'est à dire $\mathcal{E} \ll mc^2$) :

$$\mathcal{E} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \hbar\omega \quad \text{avec} \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \tag{C.8}$$

\mathcal{E} est l'énergie cinétique de la particule et \vec{p} son impulsion.

En utilisant le même procédé que précédemment, on obtient l'équation d'onde de la particule libre non relativiste sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi \tag{C.9}$$

où Δ est l'opérateur Laplacien.

Lorsque la particule de masse m est soumise à une énergie potentielle $V(\vec{r})$ dépendant de sa position, l'équation précédente se généralise sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{(t,\vec{r})} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi_{(t,\vec{r})} + V(\vec{r}) \psi_{(t,\vec{r})}$$

Cette équation d'évolution est parfois appelée "équation de Schrödinger" ; son étude fait l'objet du cours de mécanique ondulatoire.