

LP39 - ASPECT ONDULATOIRE DE LA MATIÈRE - NOTION DE FONCTION D'ONDE

9 décembre 2016

Pierre Ragueneau & Alexia Barbosa De Lima

*BOB : Si l'électron est une **particule**, elle doit être quelque part ! Or on ne voit que des ondes diffuses qui exprime des probabilités. Mais si l'électron est une **onde**, comment se fait-il qu'un seul détecteur signalera son arrivée ? !*

*NIELS BOHR : Jeune homme, c'est le genre de question qu'il ne faut pas se poser.
—Le mystère du monde quantique, Dargaud*

Niveau L3

Commentaires du jury

- **2015** : Les dispositifs interférométriques avec les ondes de matière ne se résument pas aux expériences du type fentes d'Young.
- **2010** : Cette leçon peut être l'occasion d'introduire simplement l'équation de Schrödinger. La signification physique des différents termes de l'équation de Schrödinger n'est pas toujours connue. Le jury constate qu'un nombre significatif de candidats confondent équation aux valeurs propres et équation de Schrödinger. Enfin, les candidats sont invités à s'interroger sur les aspects dimensionnels de la fonction d'onde et sur sa signification physique précise.

Bibliographie

✦ *Mécanique Quantique*, **Basdevant**

→ Aspect historique et expériences, Équation de Schrödinger et applications

✦ *Mécanique Quantique I*, **Cohen**

→ Pratique pour les ordres de grandeurs, les TF et paquets d'onde

✦ *Mécanique Quantique I*, **Aslangul**

→ Bien pour l'analogie Optique-Mécanique

✦ *Tout-en-un Physique PC-PC**, **Sanz**

→ IL est cool pour débiter et comprendre la plupart des aspects de cette leçon. Le seul que j'ai trouvé qui parle du biprisme. Mais ils sont tous d'une grande aide et se complètent !

Prérequis

- Optique géométrique et ondulatoire
- Notion de transformée de Fourier
- Aspect corpusculaire du rayonnement

Expériences

☞ Canon à électron sur graphite

Table des matières

1	Découverte de l'aspect ondulatoire de la matière	2
1.1	Analogie Optique-Mécanique	2
1.2	Expérience de Davisson et Germer	3
1.3	Ordre de grandeur du comportement ondulatoire	3
2	Un outil : La fonction d'onde	4
2.1	Illustration à l'aide du biprisme de Fresnel	4
2.2	Équation de Schrödinger	5
2.3	Paquet d'ondes et Incertitudes d'Heisenberg	6
2.4	Particule dans un puit	6

Introduction

Pendant longtemps la matière étaient seulement envisagée comme une assemblée de particules, d'objets ponctuelles. La description dynamique de ces particules se fait à l'aide de trajectoires (ensemble de position et vitesse à tout instants, soit 6 variables). L'évolution de ces trajectoires est prédite par les lois de Newton.

Mais au début du $xx^{ème}$ siècle, la vision classique ne permet pas d'expliquer certaines observations (effet photoélectrique notamment). Afin d'expliquer ces phénomènes il faut renoncer à la vision classique et considérer une dualité onde corpuscule. Dans cette leçon on s'intéressera à l'aspect ondulatoire de la matière.

But : définir cet aspect ondulatoire et donner le formalisme nécessaire pour remplacer les lois de Newton.

1 Découverte de l'aspect ondulatoire de la matière

↓ *Commençons par observer le parallèle entre science du corpuscule, la mécanique, et science des ondes, l'optique.*

1.1 Analogie Optique-Mécanique

✎ Aslangul

L'optique géométrique peut-être entièrement expliquée par le principe de Fermat : le chemin optique est stationnaire.

$$\delta \int n ds = 0 \quad (1)$$

avec n l'indice optique du milieu, s l'abscisse curviligne et δ indique la forme différentielle.

De même en mécanique classique les lois de Newton découlent d'un principe plus général : le principe de moindre action. La trajectoire suivie par la particule est celle qui minimise l'action. Sous certaines hypothèses cela revient à minimiser l'impulsion p et on peut alors écrire :

$$\delta \int p dq = 0 \quad (2)$$

avec ici p l'impulsion et q la coordonnée généralisée, comme dans la mécanique lagrangienne.

On peut ainsi voir par analogie que n et p jouent le même rôle, et donc qu'on peut associer mécanique et optique. Ce constat a été fait par Hamilton, puis surtout De Broglie qui postule : La mécanique classique serait une approximation de la mécanique ondulatoire, comme l'optique géométrique est une approximation de l'optique ondulatoire.

On peut regrouper ceci dans un schéma

Toujours par analogie avec l'optique (surtout par analogie avec le photon introduit quelques années plus tôt), De Broglie fera l'hypothèse suivante (1924) :

A toute particule de matière de quantité de mouvement p est associée une longueur d'onde λ_{DB} donnée par :

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p} \quad (3)$$

Avec $h = 6,626 \cdot 10^{-34} J.s$ la constante de Planck qui est fondamentale en mécanique quantique. On discute l'homogénéité de l'expression.

Cette longueur d'onde de matière λ_{DB} nous donne les limites de la mécanique classique. De la même façon qu'en optique, si λ_{DB} est de l'ordre de grandeur de la taille caractéristique du système on ne peut plus négliger l'aspect ondulatoire de la matière. Il faut alors laisser la mécanique classique au profit d'une mécanique ondulatoire.

↓ Quelles ont été les vérifications expérimentales de cette hypothèse ? Quel expérience met en lumière l'aspect ondulatoire des particules ?

1.2 Expérience de Davisson et Germer



En 1927, Davisson et Germer ont fourni une preuve critique qui confirme l'hypothèse de De Broglie postulant que les particules, comme les électrons, pouvaient se comporter comme des ondes. Ils ont bombardé une cible de poudre de nickel cristallin par des électrons lents de 54 électron-volts, soit une vitesse de 4 000 km/s. La dépendance angulaire de l'intensité électronique réfléchiée a été mesurée, et sa figure de diffraction a été identifiée comme identique à celle prédite par Bragg pour les rayons X. La diffraction des électrons, caractérise un phénomène ondulatoire, et confirme l'hypothèse de de Broglie.

Aujourd'hui, nous allons reproduire cette manipulation grâce au canon à électron et une cible en graphite.



Diffraction des électrons par le graphite

🔗 Plein d'info sur la notice de la manip

⌚ 5 min

Matériel : Canon à électron, alimentation spécial, aimant.

L'expérience se fait dans une ampoule sous vide. La source est un filament chauffé auquel on arrache des électrons grâce à un potentiel V . Après traversé de la poudre de graphite les électrons arrivent sur la paroi fluorescente.

- On prouve la nature des électrons en approchant un aimant qui les dévient.
- Qualitatif : On note une figure formée d'anneaux (anisotropie de la poudre). Leurs diamètre diminuent avec V . On illustre ainsi qu'il existe un lien entre vitesse (et donc p) des électrons et leurs longueurs d'onde.
- Quantitatif : On peut ainsi calculer à partir de l'expérience la longueur d'onde λ_{Bragg} des électrons avec la relation de Bragg et les données du montage ^a.

$$2d \sin \theta = n \lambda_{Bragg} \quad (4)$$

^a. Puisque la question avait été posé dans une autre leçon : seul le paramètre de maille a peut être obtenue. La distance entre feuillets de graphène b ne peut être obtenue car trop grande et correspond à un angle θ trop faible. Typiquement elle produit un anneau de l'ordre de 2mm de diamètre à 5kV.

On mesure à $V = 5kV$ $\lambda_{Bragg} = \dots$

Comparons cette valeur avec la relation de de Broglie λ_{DB} :

En approche Newtonienne (*i.e.* non relativiste), on a $p = mv$ et $v = \sqrt{\frac{2eV}{m}}$, ce qui nous donne

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \dots \quad (5)$$

Les valeurs de λ_{Bragg} et λ_{DB} trouvées sont cohérentes. De plus il est aussi cohérent d'observer un phénomène ondulatoire lorsque la longueur d'onde est de l'ordre de distance inter réticulaire du cristal $D \approx 100pm \approx \lambda_{électron}$.

↓ Il est possible d'observer le comportement ondulatoire des électrons. Mais en est-il de même pour tout corpuscule ?

1.3 Ordre de grandeur du comportement ondulatoire

Les particules plus massives que l'électron peuvent-elles aussi manifester des comportements ondulatoires ? Il faut alors vérifier si la taille caractéristique du système $D \approx \lambda_{DB}$. Nous pouvons voir le cas de molécules sphériques assez grosses : les fullerènes C_{60} constitués de 60 atomes de carbone.

- $m = 60m_C = 2.10^{-26}kg$
- $v = 200m.s^{-1}$
- $\Rightarrow \lambda_{fullerène} = \frac{h}{mv} = 0,2nm$

Or le diamètre des fullerènes est $0,7\text{nm}$ il est donc possible de construire des expériences d'interférences avec des fentes d'Young nanométrique où $D \approx \lambda_{\text{fullerène}}$.

Mais les fullerènes restent des objets microscopiques. Si on considère cette fois un grain de poussière :

- $m = 10^{-15}\text{kg}$
- $v = 1\text{mm.s}^{-1}$
- $\Rightarrow \lambda_{\text{poussière}} = \frac{h}{mv} = 7.10^{-15}\text{m}$

Or le diamètre d'un grain de poussière est de l'ordre de $1\mu\text{m} \gg \lambda_{\text{poussière}}$. Impossible donc d'observer un phénomène ondulatoire d'un grain de poussière.¹ Plus généralement il est difficile de trouver des manifestations macroscopique de l'aspect ondulatoire de la matière. Cela explique pourquoi il a fallu les avancées techniques du $\text{xx}^{\text{ème}}$ pour que la mécanique ondulatoire trouve son sens.

↓ *Nous avons montré le comportement ondulatoire de la matière. Quel formalisme adopter pour réconcilier les notions d'onde et de corpuscule qui semblent incompatibles ?*

2 Un outil : La fonction d'onde

✎ Sanz

Toujours par analogie avec l'optique, nous allons utiliser la notion de fonction d'onde pour décrire une particule. On note la définition :

La description complète de l'état dynamique d'une particule de masse m dans l'espace à l'instant t se fait au moyen d'une fonction d'onde complexe $\Psi(\vec{r}, t)$.

↓ *Comment interpréter cette fonction ?*

2.1 Illustration à l'aide du biprisme de Fresnel

✎ Sanz

Afin d'illustrer les propriétés de Ψ on réalise une expérience virtuelle. On utilise un interféromètre équivalent du biprisme de Fresnel pour les électrons. Les électrons sont en translation entre deux plaques métalliques parallèles. On applique une ddp sur une tige entre ces deux plaques afin de dévier les électrons qui passent au dessus et en dessous. Nous obtenons ainsi deux sources (noté voie 1 et 2) que l'on fait suivre d'un écran. On vous laisse le soin de reprendre le schéma :

La quantité d'électron détecté à l'écran sur une abscisse de l'écran pendant une durée unité est noté sous la forme de probabilité P . On bouche la voie 2 et on note P_1 la probabilité de détecter un électron sur l'écran. De même on bouche ensuite la voie 1 et on ré-ouvre la voie 2, on note P_2 la probabilité de détecter l'électron. Lorsqu'on ouvre les deux voie, et qu'on considère l'électron comme une simple particule, on s'attend à obtenir une probabilité totale $P_{\text{tot}} = P_1 + P_2$.

1. Les petits malins peuvent toujours chercher à ralentir le grain de poussière. Pour cela il "suffit" de refroidir les grains à quelques picokelvin. C'est numérobis qui va être content !

Si l'on fait l'expérience on observe une figure d'interférence, les probabilités ne se somment pas : $P_{tot} \neq P_1 + P_2$). Par analogie avec l'optique on voit le parallèle entre la P_{tot} et l'intensité $I = |A|^2$ d'une OPPH lumineuse d'amplitude A . Il s'agit de l'interprétation physique de Born

La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un volume d^3r entourant $\vec{r}$ est :

$$d^3P(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad (6)$$

On dit aussi que la fonction d'onde est appelée amplitude de probabilité de présence et son module au carré est appelé densité de probabilité de présence.

En physique, la particule ne peut pas se ballader n'importe où et a un domaine d'accessibilité noté par exemple D . Alors on va pouvoir avoir une condition de normalisation (puisque la particule existe forcément quelque part) :

$$\int_D |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (7)$$

↓ *L'interprétation de Born permet de réconcilier la vision ondulatoire et corpusculaire d'une particule. Mais il nous manque encore une équation pour prédire l'évolution de cette probabilité de présence.*

2.2 Équation de Schrödinger

On poursuit l'analogie avec l'optique où nous avons montré qu'il était possible de décomposer toutes ondes de carré sommable (ça tombe bien c'est ce qu'on a) sur une base d'OPPH. Nous pouvons donc ramener nos problèmes à la description de l'OPPH

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (8)$$

Pour une particule libre (non relativiste) : $E = \frac{p^2}{2m}$

De même on a les relations $E = \hbar\omega$ et $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Ce qui nous conduit à la relation de dispersion :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \quad (9)$$

Ce qui conduit à

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (10)$$

Enfin nous admettons que dans le cas d'une particule non libre, le potentiel V conduit à l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (11)$$

On remarque :

- l'équation est linéaire en Ψ : permet le principe de superposition propre en phénomène ondulatoire.
- 1^{er} ordre en t : l'évolution de Ψ est déterministe.
- " $\Delta \Psi(\vec{r}, t)$ " $\Rightarrow \Psi$ est continue et dérivable.

L'onde plane ne peut pas être une solution car le module au carré diverge et ne correspond donc pas à un état physique. Le paquet d'onde lui est envisageable.

2.3 Paquet d'ondes et Incertitudes d'Heisenberg

On assimile donc la solution pour la fonction d'onde à un paquet d'onde de la forme :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k, t) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (12)$$

On reconnaît donc une TF qui implique la relation $\Delta x \Delta k \geq 1$.

On peut trouver avec les relations de De Broglie que $\Delta p = \hbar \Delta k$ et donc que les incertitudes de position et de quantité de mouvement sont reliées par $\Delta x \Delta p \geq \hbar$

On retrouve ainsi le principe d'incertitude d'Heisenberg.

2.4 Particule dans un puit

On peut donc essayer d'appliquer tout ce que l'on vient de voir en regardant la particule dans un puit, que l'on prend infini, qui est une vision simpliste mais qui peut expliquer le comportement d'un électron dans un atome.

On reprend l'équation de Schrodinger et on regarde le cas stationnaire qui nous donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x) + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (13)$$

On l'appelle l'équation aux valeurs propres.

- Pour le cas où $x \geq |a|$, la fonction d'onde est nulle
- Pour le cas où $-a \leq x \leq a$, le potentiel V est nul et on a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} = E \Psi(x)$$

On trouve alors, avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ une solution sous la forme : $\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

On se sert alors des conditions aux limites pour aller plus loin, en notant la continuité de la fonction d'onde lors du changement de région en $-a$ et a . On obtient un système qui, en prenant le déterminant, donne accès à $\sin(2ka) = 0$ donc

$$k = \frac{n\pi}{2a} \quad (14)$$

avec cette égalité, on voit que k et a , qui représente x , varient de façon inverse. Lorsque l'on aura un puit très étalé, la position de la particule ne sera pas précise mais, les oscillations étant faibles, on aura une bonne précision sur la quantité de mouvement. Et inversement. On illustre ainsi le principe d'indétermination d'Heisenberg.

Conclusion

On a pu voir que la matière, en plus d'être caractérisée de façon corpusculaire, peut afficher un aspect ondulatoire, prouvé expérimentalement et permettant d'expliquer beaucoup de phénomènes grâce à un formalisme adapté. Par exemple, l'effet tunnel peut être abordé, ainsi de la quantification de l'énergie. Néanmoins, c'est la complémentarité soulignée par Bohr qui permet de décrire la matière et ses mystères.

Commentaires