LP 39: Aspects ondulatoire de la matière. Notion de fonction d'onde.

15 décembre 2017

Florence Pollet & Oliver Tolfts

Un policier à Heisenberg :
-"Vous êtes fou ?! Vous avez une idée de la vitesse à laquelle vous roulliez ? ?"
-"Non, mais je sais exactement où j'étais !"
O. Tolfts

Niveau : L2

Commentaires du jury

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

- *Physique quantique*, **Badevant et Dalibard** ⟶ Il y a tout.
- *Mécanique Quantique 1, DeBoeck*, **Aslangul** ⟶ Introduction historique intéressante (bien qu'hardcore). Ce livre me fait peur.

Pré-requis

- Propagation d'onde
- Optique ondulatoire et interférences
- Aspect corpusculaire de la lumière

Expériences

- Diffraction d'électrons par un cristal de graphite.
- Animation : Interférence d'électrons par des fentes d'Young. (CD Dalibard)

Table des matières

Introduction

Au début du XXeme siècle deux grandes branches de la physique étaient développées notamment l'électromagnétisme (aspect ondulatoire) et la mécanique (aspect corpusculaire). Ces deux théories distinctes permettaient de décrire quasiment tous les phénomènes observés jusque là. Cependant quelques questions fondamentales, par exemple sur la stabilité de la matière restaient sans explications satisfaisantes. Nous allons voir au cours de cette leçon comment l'introduction de la mécanique quantique a pu apporter une réponse à ces questions. Cette théorie récente est une véritable révolution conceptuelle, elle fait un parallèle entre les deux branches distinctes qu'étaient l'électromagnétisme et la mécanique. Les idées introduites semblent très contre-intuitives et de nombreux physiciens sont restés septiques avant de s'incliner devant la mise en évidence expérimentale des prédictions quantiques proposées par De Broglie. Nous verrons dans un premier temps les étapes historiques et la démarche qui a été réalisée pour arriver à une telle révolution conceptuelle. Puis nous formaliserons cette nouvelle théorie et regarderons quelques exemples d'applications parlants.

1 Aspect historique

1.1 Mise en évidence du problème

Au vingtième siècle, certaines observations ne peuvent pas être expliquées par les théories physiques de l'époque. En effet les récentes découvertes de la nature de la matière (électrons, noyaux atomiques, modèle planétaire) posent problème : si l'électron gravite autour du noyau, alors il rayonne et perd ainsi de l'énergie. Il devrait ainsi ralentir et s'écraser sur le noyau ! La mécanique newtonienne n'est pas suffisante pour décrire le mouvement de l'électron et prévoir la stabilité de la matière.

Planck et Einstein ont l'intuition qu'il existe une quantification de l'énergie et tentent d'appliquer cela à la lumière en introduisant la notion de photons (c'est le retour à une vision corpusculaire de la lumière). A partir de l'observation expérimentale de spectres de raies, Niels Bohr postule qu'un électron gravitant autour d'un noyau atomique ne peut atteindre que certaines valeurs d'énergies. Il rejoint ainsi l'idée de quantification de Planck et d'Einstein pour la lumière mais n'apporte pas d'explications conceptuelles à cette quantification.

Louis De Broglie postule en 1923 que l'on peut associer à toute particule une onde dite **onde de matière**. Il lui donne les caractéristiques suivantes :

$$\lambda = \frac{h}{|\overrightarrow{p}|} \text{ avec } \overrightarrow{p} = m\overrightarrow{v} \text{ et h la constante de Planck } h = 6,626.10^{-34} J.s$$

Ici, De Broglie postule en quelque sorte la réciproque de l'hypothèse d'Einstein et de Planck. (onde ↔ corpuscule)

Cette vision ondulatoire de la matière permet d'expliquer la quantification de l'énergie en considérant que les orbites accessibles sont celles correspondant à des conditions aux limites autorisant des ondes stationnaires (comme la corde de Melde). Cette nouvelle description de la matière pourrait ainsi expliquer la quantification des niveaux d'énergie accessibles pour un électron que Bohr avait soulignée.

On est en mesure de se demander pourquoi une telle perception du monde ne nous est pas apparue plus tôt, voici quelques ordres de grandeurs explicatifs :

- homme : un homme marche à une vitesse de l'ordre de $1 m.s^{-1}$ et possède une masse de l'ordre de $10^2 kg$. La longueur d'onde de De Broglie (longueur d'onde de l'onde de matière associée à l'homme) vaut approximativement $\Lambda_{\text{homme}} = \frac{h}{|\overrightarrow{p}|} \approx 10^{-36} m$. Elle est très faible devant la taille des objets qui l'entourent. Les effets dus à cette nouvelle description d'un système n'apportent presque aucune correction par rapport au modèle classique. On dit que l'homme a un comportement classique.

- électron accéléré : on accélère un électron avec une différence de potentiel U=1kV, ce qui lui confère une impulsion $p = \sqrt{2meU} \approx 10^{-23} kg.m.s^{-1}$. La longueur d'onde de De Broglie de l'électron est $\lambda \approx 60 pm$. On peut trouver des objets de cet ordre de grandeur pour lesquels l'électron aura un comportement dit quantique.

> *L'hypothèse de De Broglie est pour l'instant purement théorique et laisse de nombreux physiciens sceptiques concernant cette dualité ondes-corpuscules pour la matière. Elle sera confirmée par plusieurs expériences dans les années suivantes, notamment grâce à l'expérience de diffraction d'électrons par un cristal de graphite.*

1.2 Mise en évidence expérimentale : à la recherche d'une nouvelle théorie.

Diffraction d'électrons par un cristal de graphite.

Livre(s) utilisé(s) : tous les livres de la BU — Temps nécessaire à l'expérience $\propto$ 5min

Canon à électrons. On observe par fluorescence des anneaux de diffraction. Attention il y a plusieurs anneaux, correspondant chacun à des distances interplanaires différentes dans le graphite. On considère ici le premier anneau dû à la diffraction par des plans distants de $d_1 = 213pm$. On peut vérifier que la longueur d'onde associée à la diffraction correspond à la longueur d'onde de De Broglie de l'électron : $\lambda = d\frac{R}{L}$.

Cette expérience justifie la nouvelle description proposée par De Broglie : la matière peut-être vu comme une onde. Pour formaliser cette nouvelle théorie, on procède de la manière suivante :

Trouver une représentation mathématique de l'état d'un système En optique ondulatoire, une onde est décrite par son champs électrique $\overrightarrow{E}$.

Déterminer les lois d'évolution d'un système Ce lois doivent permettre de prévoir l'état du système à un instant $t_2 > t_1$, connaissant l'état du système à t_1. En optique ondulatoire ce sont les équations de Maxwell.

Trouver les grandeurs mesurables C'est à dire faire le lien entre la représentation mathématique du système et ce que nos appareils de mesures sont capables de détecter. Dans le cas de l'optique ondulatoire c'est l'éclairement associé à une onde lumineuse que l'on mesure.

Tableau récapitulatif de l'analogie entre la lumière et des particules quantiques.

Optique ondulatoire	Mécanique quantique
λ	$\lambda = \frac{h}{p}$
$\overrightarrow{E}$	
$\overrightarrow{E}^2$	
Équations de Maxwell	

Toute théorie physique repose sur des postulats. Par exemple pour la mécanique Newtonienne le **principe d'inertie**. Ces postulats découlent d'observations et ne peuvent pas être démontrés. La justification de ces postulats tient de leurs conséquences : ils semblent être vérifiés par l'expérience. Voyons quel sont les postulats de la mécanique quantique.

2 Formalisation d'une nouvelle théorie

2.1 Fonction d'onde

Principe :
La description complète de l'état d'une particule dans l'espace à un instant donné se fait au moyen d'une fonction nommée fonction d'onde Ψ. C'est une fonction complexe qui dépend de l'espace et du temps.
La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un volume $d^3\overrightarrow{r}$ entourant le point $\overrightarrow{r}$ est :

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

C'est une révolution conceptuelle. Discussion sur le principe :

- Ψ est une amplitude de probabilité. C'est la représentation mathématique de l'état de notre système. La grandeur à laquelle nous avons accès est la position de la particule et à sa vitesse qui sont des fonctions de $|\Psi|^2$. Ces grandeurs sont respectivement les analogues du champs électrique et de sa norme au carré dans le cas de l'optique ondulatoire. (voir tableau comparatif optique/quantique)

- La fonction d'onde Ψ est définie à un facteur de phase $e^{i\theta}$ près.
- La probabilité pour que la particule se trouve dans l'ensemble du volume qui lui est accessible vaut par définition 1. Cette conditions est appelée condition de normalisation :

$$\int_V |\Psi(\overrightarrow{r},t)|^2 d\overrightarrow{r} = 1$$

  Ceci implique que la fonction soit de carrée sommable.
- Une particule quantique n'est pas localisée dans l'espace. Pourtant un observateur effectuant la mesure de la position de la particule trouve des coordonnées, où se trouve effectivement la particule. Déterminisme ?

Principe de superposition : Si Ψ_1 et Ψ_2 sont des fonctions d'ondes pouvant toutes deux décrire l'état d'une même particule, alors $\alpha\Psi_1 + \beta\Psi_2$ est également une fonction d'onde pouvant décrire l'état de cette particule.

- α et β sont des coefficients complexes.
- Cette nouvelle fonction d'onde doit tout de même satisfaire la condition de normalisation.
- Cela justifie également l'analogie entre la lumière et les particules quantiques : Ψ est l'analogue de $\overrightarrow{E}$ (grandeur sommable).

2.2 Dynamique de la fonction d'onde

Principe fondamental : l'équation de Schrödinger
La dynamique de la fonction d'onde d'une particule placée dans un potentiel V$(\overrightarrow{r},t)$ est régie par l'équation suivante :

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

Coté maths : l'équation de Schrödinger est linéaire. C'est une équation différentielle d'ordre 1 par rapport au temps, ce qui signifie qu'il suffit de connaître l'état Ψ de la particule à un instant t_0 pour déterminer l'état Ψ de la particule à tout instant ! C'est une évolution déterministe. (A ne pas confondre avec la perte de déterminisme sur la position des électrons).

L'équation d'onde dans le vide et sans potentiel peut être intuitée en analysant les résultats que De Broglie avait postulé. Les relations de De Broglie donnent l'équation de dispersion suivante pour les ondes de matières :

$$E = \hbar\omega = \underbrace{\frac{\overrightarrow{p}^2}{2m}}_{\text{énergie cinétique}} \underbrace{=}_{\lambda=\frac{h}{|\overrightarrow{p}|}} \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$
$$\text{soit } \hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

En insérant la structure d'onde plane dans l'équation de Schrödinger (pour un potentiel nul) on trouve ainsi que Ψ est solution de celle-ci. Il y a deux façons de voir les choses : on postule les même hypothèses que De Broglie et on montre ainsi que l'équation de Schödinger est la bonne description de la dynamique d'une particule quantique ou bien on postule que l'équation de Schrödinger est la bonne description de la dynamique d'une particule quantique et on démontre les hypothèses de De Broglie.

Toutefois, nous éviterons de considérer des ondes planes pour les fonctions d'ondes car elles ne sont pas normalisables et ne peuvent ainsi pas représenter l'état d'une particule. On décrira une particule par un paquet d'onde.

Si la particule est plongée dans un potentiel V$(\overrightarrow{r})$, son énergie est : $E = \hbar\omega + V(\overrightarrow{r})$. On trouve ainsi le terme $V(\overrightarrow{r},t)\Psi(\overrightarrow{r},t)$ de l'équation de Schrödinger.
L'équation de Schrödinger permet de montrer que la condition de normalisation est respectée à tout instant :

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi(\overrightarrow{r},t)|^2 d\overrightarrow{r} = \int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}d\overrightarrow{r} + \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi d\overrightarrow{r} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\int\Psi^*\Delta\Psi d\overrightarrow{r} - \int\Delta\Psi^*\Psi d\overrightarrow{r}\right) = 0$$

(Il faut faire une intégration par partie et supposer que Ψ et $\Psi*$ sont nulles à l'infini.

3 Test

3.1 Interférences d'ondes de matière

Animation : interférences d'ondes de matières.

✍ Livre utilisé : Dallibard et Basdevant (Cd fournis avec le livre)(envoyé à l'agreg)

⏲ Temps nécessaire pour la présentation (en comptant la discussion) $\propto$ 10min

Enfaite, il y à une animation sur internet qui est mieux, c'est ça qu'on utilise. Il faut vérifier qu'on y ai accès aux oraux mais on peut trouve le site à partir des ressources accessibles. (http ://gilbert.gastebois.pagesperso-orange.fr/java/quantique/quantique.htm)

L'animation simule un jet d'électrons accéléré sur une bi-fente d'Young. Elle permet :

- de faire varier la longueur d'onde de De Broglie des électrons (en faisant varier la vitesse des électrons).
- de faire varier les caractéristiques de la bi-fente.
- d'observer d'une part les collisions d'électrons (de façons ponctuelle) sur l'écran et d'autre part le nombre de chocs effectués en fonction de la position sur l'écran.
- de montrer l'influence de la détection de l'électron lors du passage par les fentes (ajout de détecteurs).

NB : Faut avoir essayer de le faire fonctionner pendant l'année, la version de java est "obsolète" sur la majeure partie des ordinateurs de l'école. (un type à passer 2h à la faire fonctionner le jour de son oral)

Discussion :

- On détecte bel et bien les collisions des électrons contre l'écran : la vision corpusculaire d'une particule quantique est nécessaire à sa description.
- On observe que certaines zones reçoivent plus d'impact que d'autres, alors que les électrons sont issus des mêmes conditions initiales. L'interprétation probabiliste de la position des électrons est donc pertinente. En effectuant l'expérience pour un très grand nombre d'électrons on peut avoir accès à la répartition statistique de la position des impacts sur l'écran.
- On observe que le nombre de chocs reçus en fonction de la position "ressemble" à une tache d'interférence caractéristique de l'expérience des bi-fentes d'Young. En effet, si la particule passe par la fente de droite, alors l'état de la particule peut être décrit par une certaine fonction d'onde Ψ_1. Mais si la particule passe par la fente de gauche, alors son état peut être décrit par une fonction d'onde différente Ψ_2. Laquelle choisir pour décrire l'état de notre système si l'on ne sait par quelle fente est passée la particule ? Aucune. L'état de la particule est désormais décrit par une superposition de ces deux états (combinaison linéaire des fonctions d'ondes). Ainsi, comme pour la lumière, les deux fonctions d'ondes (initialement identiques au niveau des fentes) vont se déphaser et pourront ainsi interférer. C'est car il y a cette interférence entre ces deux états hypothétique qu'il n'y a pas équiprobabilité de la position des impacts des électrons sur l'écran.
- On pourrait penser que l'apparition de zones préférentielles d'impact est due à des interactions entre les électrons après les fentes. Cette hypothèse n'est pas envisageable car le phénomène est toujours observable même si on envoie les électrons un par un.
- Si on détecte par quelle fente la particule est passée, la figure d'interférence disparaît ! En effet, si l'on sait par quelle fente est passée l'électron alors la probabilité pour que celui-ci soit passé par l'autre fente est nulle. La fonction d'onde pouvant décrire l'état du système si la particule était passée par l'autre fente n'est donc plus une fonction d'onde possible et il n'y à plus interférences des états : tout se passe comme si il n'y avait qu'une seule fente, on observe uniquement un phénomène de diffraction.

On met ainsi en évidence un problème propre à la mécanique quantique. Quand on effectue une mesure on collapse l'état du système.

3.2 Problèmes intrinsèques de la mesure

- On peut mesurer uniquement la position de la particule et sa vitesse (son impulsion), mais jamais la fonction d'onde. Après la mesure on **détermine** donc la position exacte de la particule, on perd l'aspect **probabiliste**. La fonction d'onde est donc profondément modifiée par la mesure.
- Une particule est décrite par un paquet d'onde dont on peut déterminer l'extension spatiale et la localisation. D'un point de vue probabiliste on peut définir une position moyenne de la particule et son écart quadratique suivant une des coordonnées :

$$< \overrightarrow{r} > = \int \overrightarrow{r} |\Psi(\overrightarrow{r})|^2 d\overrightarrow{r} \tag{1}$$

$$(\Delta x)^2 = < x^2 > - < x >^2 \tag{2}$$

Plus l'écart quadratique est faible, meilleure est la localisation de la particule. Cet écart n'est pas du à la précision de nos mesures mais provient de la description quantique de la particule.

- Des propriétés de la transformée de Fourier permettent de montrer la relation d'incertitudes d'Heisenberg :

$$\boxed{\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}}$$

Cette relation intrinsèque signifie qu'on ne peut pas avoir à la fois une information très précise sur la position et l'impulsion d'une particule. En méca classique ça ne nous perturbe pas trop, nos outils de mesure ne sont de toute façon pas assez précis. Même lorsqu'on peut avoir $\Delta x \simeq 10^{-10}$m (taille d'un atome) cette inégalité nous contraindrait à avoir une précision sur notre mesure $\Delta p > 10^{-20}$m/s ce qui est bien inférieur à nos capacités de mesure.

- On peut justifier la stabilité de la matière à partir de cette relation d'incertitude :

On considère un électron orbitant autour d'un proton, il est dans un potentiel $V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ et a une énergie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$.
Son énergie totale est : $E = E_c + V(r)$

On considère l'approximation $\Delta x \simeq r_0$ et $\Delta p \simeq p_0$. Donc $\Delta p > \frac{\hbar}{2r_0}$.

D'où : $E > \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$

L'énergie est donc bornée inférieurement, le minimum étant atteint pour $r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \simeq 10^{-10}$m pour laquelle $E = -\frac{m}{2\hbar^2}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0})^2 \simeq -13.6$ eV (On retrouve la constante de Rildberg ! Youpi tout est cohérent !)

Conclusion

Durant cette leçon nous avons mis en évidence les limites de la description classique et formalisé les principes de base de la mécanique quantique. Notre perception intuitive du monde semble en désaccord avec les principes quantiques (description probabiliste, perturbation introduite par la mesure) mais cette théorie apporte des explications cohérentes aux phénomènes observés. Cette nouvelle description permet de mieux comprendre les phénomènes à l'échelle microscopique/atomique.
L'application de la mécanique quantique à d'autres systèmes complexes repose néanmoins sur d'autres principes que nous pourront voir lors de leçons futures.

Questions, commentaires