LP 39 - Aspects ondulatoires de la matière. Notion de fonction d'onde.

11 juin 2021

Antoine Chauchat & Valentin Dorel

Niveau : L2

Bibliographie

✍ , ⟶

Prérequis

- Optique ondulatoire
- Électromagnétisme dans le vide
- Transformée de Fourier
- Notion de photon

Expériences

☕

Table des matières

Introduction

Pendant le 20ème siècle la mécanique quantique s'est développée avec notamment un concept central de dualité onde-corpuscule. Nous avons déjà vu que la loi de Planck avait donné des raisons de considérer un comportement corpusculaire de la lumière. Aujourd'hui nous allons voir à l'inverse pourquoi la matière peut être décrite par une théorie ondulatoire. Définissons déjà matière et onde.

La matière correspond à un objet physique auquel on associe une masse. On a vu en mécanique classique que l'on pouvait décrire le mouvement d'une particule massive grâce au PFD.

Une onde est une perturbation d'une grandeurs physique se propageant de proche en proche. Exemples : onde acoustique, onde électromagnétique. Plus formellement on la représente par un champ scalaire ou vectoriel de $\vec{\mathbf{r}}$ et t suivant une équation d'onde, i.e. une EDP couplant espace et temps.

Objectifs de cette leçon :

- Motiver la vision ondulatoire de la matière
- Déterminer la grandeur pertinente pour cette description ondulatoire de la matière.
- Donner l'équation régissant l'évolution de ces fonctions au cours du temps.

1 Motivations et mise en évidence de l'aspect ondulatoire de la matière

1.1 Historique

Au début du 20ème siècle on commence à associer un comportement corpusculaire à la lumière. Tout d'abord avec Planck en 1900 qui *quantifie* les échanges d'énergie entre lumière et matière. En 1905, relation de Planck-Einstein $E = h\nu$. Cette notion de quantification reviendra dans le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène dont le but est d'expliquer le rayonnement de l'hydrogène. Pour cela il fera l'hypothèse de trajectoires discrétisées de l'électron autour du noyau et que lors du passage d'une trajectoire à une autre il y a absorption/émission d'un quantum d'énergie de fréquence ν et qu'ainsi la variation d'énergie de l'atome vaut $h\nu$. Cependant ce modèle n'est pas parfait, les hypothèses sont dures à justifier et l'électron accéléré devrait rayonner et ainsi perdre de l'énergie ce qui ferait uqe la matière n'est pas stable...

En 1924 Louis De Broglie publie sa thèse dont le but est "unifier la théorie ondulatoire et corpusculaire et mieux comprendre la notion de quanta". Il va faire l'hypothèse, qui sera développée plus tard dans cette leçon, qu'à tout corps massique on peut associer un comportement ondulatoire. Cette hypothèse a permis de mieux justifier le modèle de Bohr.

Cette vision ondulatoire de la matière ne vient pas remplacer ou renier l'aspect corpusculaire. Ce sont deux aspects complémentaires comme on le verra dans la suite.

1.2 Observations expérimentales

On connaît des phénomènes typiquement ondulatoires : la diffraction et les interférences lumineuses par exemple sont des preuves de l'aspect ondulatoire de la lumière. Qu'en est il pour la matière ? On va regarder une petite vidéo (toutes les réfs genre l'article dans la LP de Pauline). On fait l'expérience des fentes d'Young avec des électrons. On envoie des électrons un à un dans le dispositif et on observe leur distribution en sortie. Classiquement on s'attendrait à voir deux taches correspondant à l'image des fentes. D'ailleurs, quelle est la grandeur que l'on mesure finalement ? Du fait du grand nombre d'électrons envoyés et qu'ils sont tous initialement dans le même état, en comptant le nombre d'impact a une position et en le comparant au nombre total d'impact on mesure une *probabilité* d'impact d'un électron. Nous y reviendrons dans la suite. Les électrons impactent l'écran un à un comme des particules. Au début cela semble aléatoire. Au bout d'un certain temps on observe la figure d'interférence que l'on observe en optique. Cela met en évidence la dualité onde-corpuscule des électrons !

On va dans cette leçon chercher la représentation adéquate de l'aspect ondulatoire de la matière. Pour cela on va s'appuyer sur des parallèles avec une théorie ondulatoire que l'on connaît bien : l'électromagnétisme.

	Ondes EM dans le vide	Onde de matière
Caractéristiques ondulatoires	Pulsation ω, longueur d'onde λ	
Grandeur ondulatoire	$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, t)$	
Grandeur mesurée	$I = \lvert E\rvert^2$	
Équation d'onde et rdd	$\Delta\vec{\mathbf{E}} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} = 0$ et $\omega = kc$	

Tab. 1 : Tableau répondant à nos problématiques, que l'on va remplir au fur et à mesure.

On va commencer par chercher les grandeurs physiques décrivant la matière de manière adéquate.

2 Caractéristiques ondulatoires et état d'une particule

2.1 Hypothèse de De Broglie

La longueur d'onde est une caractéristique centrale des ondes, elle apparaît explicitement dans les calculs d'interférence et de diffraction. Par analogie avec la relation de Planck-Einstein, De Broglie a fait l'hypothèse suivante :

> **Hypothèse de De Broglie (1924)** : À tout corps massique peut être associé un comportement ondulatoire caractérisé par $\lambda = \frac{h}{p}$ (ou $\vec{\mathbf{k}} = \frac{\vec{\mathbf{p}}}{\hbar}$ et $E = \hbar\omega$. Avec $\vec{\mathbf{p}}$ et E les caractéristiques de la description corpusculaire. On appelle alors λ_{DB} la longueur d'on de de De Broglie de la particule considérée.

Comment interpréter cette longueur d'onde ? En fait sa valeur va nous permettre de voir si le comportement ondulatoire de la particule va être visible expérimentalement. Par exemple on a vu que l'angle de diffraction à travers une fente de taille a était $\theta = \frac{\lambda}{a}$ et pour des fentes d'Young espacées de b l'interfrange est $\frac{\lambda D}{b}$. Prenons quelques exemples :

- Objet macroscopique : balle de golf, $m = 50\,\text{g}$ et $v = 50\,\text{m/s} \implies \lambda = \frac{6.6\times10^{-34}}{0.05\times50} \sim 1\times10^{-34}\,\text{m}$. Négligeable et jamais observable ! Cohérent avec la mécanique newtonienne qui reste la théorie à employer à l'échelle macroscopique.
- Électrons de l'expérience vue en vidéo : $E = 600\,\text{eV} \implies \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 0.5\,\text{Å}$. Les fentes de l'expérience sont de largeur $a = 62\,\text{nm}$ ainsi on a un angle $\theta = 8\times10^{-4}\,\text{rad}$, les fentes sont séparées de $b = 272\,\text{nm}$, si on observe à $1\,\text{m}$ on aura un interfrange $i = 0.2\,\text{mm}$ ce qui est observable. Le comportement ondulatoire a donc ici une influence très visible sur les résultats de l'expérience.

Ainsi le comportement ondulatoire ne sera visible que pour certains corps dans certaines conditions (il faut une impulsion très faible vu la petitesse de h).

	Ondes EM dans le vide	Onde de matière
Caractéristiques ondulatoires	Pulsation ω, longueur d'onde λ	n $\omega = E/\hbar$, $\lambda_{\text{DB}} = h/p$
Grandeur ondulatoire	$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, t)$	
Grandeur mesurée	$I = \lvert E\rvert^2$	
Équation d'onde et rdd	$\Delta\vec{\mathbf{E}} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} = 0$ et $\omega = kc$	

Tab. 2 : Tableau répondant à nos problématiques, que l'on va remplir au fur et à mesure.

On continue l'analogie, on va maintenant chercher la grandeur ondulatoire associée aux ondes de matière.

2.2 Onde plane de De Broglie

Au vu de l'expérience d'interférences avec les électrons et par analogie avec les ondes électromagnétiques on va décrire les particules par une fonction complexe $\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)$. Ce qui est observée sur l'écran c'est la probabilité de trouver une particule en un point qu'on peut donc noter $\lvert\psi\rvert^2$ par analogie avec les interférences lumineuses oou on observe $I = \lvert E\rvert^2$. On appellera ainsi ψ **l'amplitude de probabilité.**

	Ondes EM dans le vide	Onde de matière
Caractéristiques ondulatoires	Pulsation ω, longueur d'onde λ	n $\omega = E/\hbar$, $\lambda_{\text{DB}} = h/p$
Grandeur ondulatoire	$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, t)$	$\psi(\vec{\mathbf{r}}, t) \in \mathbb{C}$
Grandeur mesurée	$I = \lvert E\rvert^2$	Probabilité $\lvert\psi\rvert^2$
Équation d'onde et rdd	$\Delta\vec{\mathbf{E}} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} = 0$ et $\omega = kc$	

Tab. 3 : Tableau répondant à nos problématiques, que l'on va remplir au fur et à mesure.

En tenant compte de la relation de De Broglie et par analogie avec les OPPM en électromagnétisme on va donner une expression de ψ pour une particule d'énergie E et d'impulsion $\vec{\mathbf{p}}$:

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}, t) = \psi_0 \exp\Big(i(\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}} - \omega t)\Big) = \exp\left(i\frac{\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{r}} - Et}{\hbar}\right) \tag{2.1}$$

C'est *l'onde plane de De Broglie.*

On a vu en électromagnétisme qu'une OPPM a une extension spatiale infinie. On met ainsi le doigt sur une subtilité que l'on reverra en fin de leçon : on ne peut considérer que la position et l'impulsion de ma particule sont parfaitement définis. Ici on a fixé $\vec{\mathbf{p}}$ et la particule se retrouve "délocalisée" dans tout l'espace. On préférera utiliser la notion de paquet d'onde qu'on évoquera par la suite.

On va maintenant formaliser la représentation mathématique de cette description.

2.3 Fonction d'onde

On pose ici les bases mathématiques de la mécanique quantique.

> **Postulat et interprétation de Born (1926)** : La description complète d'une particule de masse m à l'instant $t$se fait au moyen d'une fonction d'onde $\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)$ également appelée *amplitude de probabilité.*
> La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un volume d^3r entourant le point $\vec{\mathbf{r}}$ est :
> $$\mathrm{d}^3P(\vec{\mathbf{r}}) = \lvert\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)\rvert^2 \mathrm{d}^3r \tag{2.2}$$
> On appelle $\lvert\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)\rvert^2$ la *densité de probabilité.*

Quelques propriétés et remarques importantes :

- La fonction d'onde est intrinsèquement complexe, ce n'est pas une astuce de calcul comme en EM.
- ψ est défini à une phase près car cette dernière n'affecte pas la densité de probabilité.
- Normalisation : ψ est de carré sommable et la probabilité de trouver la particule dans tout l'espace vaut 1 ainsi $\int_{\mathbb{R}^3} \lvert\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)\rvert^2 \mathrm{d}^3r = 1$

Concernant ce dernier point on voit que l'onde plane de De Broglie a un problème car non normalisable dans un espace infini. Elle n'est pas la bonne description de l'état d'une particule. Pour cela on utilise un paquet d'onde :

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \phi(\vec{\mathbf{p}}) \exp\left(i\frac{\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{r}} - Et}{\hbar}\right) \mathrm{d}^3p \tag{2.3}$$

Cette formule nous conduit à deux propriétés fondamentales de la mécanique quantique :

- On peut choisir entre deux représentations : la représentation spatiale avec $\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)$ et la représentation dans l'espace des impulsions avec $\phi(\vec{\mathbf{p}})\exp(-iEt/\hbar)$. Ces deux fonctions d'ondes sont liées par la TF. Elles sont dans des espaces différents et sont différentes mais on a conservation de la norme. C'est notamment utile pour le calcul des valeurs moyennes de la position et de l'impulsion, par exemple à une dimension :

$$\langle x\rangle = \int_{\mathbb{R}} x\lvert\psi(x)\rvert^2 \mathrm{d}x \tag{2.4}$$

$$\langle p\rangle = \int_{\mathbb{R}} p\lvert\phi(p)\rvert^2 \mathrm{d}p \tag{2.5}$$

- Les propriétés de la TF lient extension spatiale et impulsionnelle et cela concorde avec *la relation d'incertitude d'Heisenberg :*

> **Relation d'incertitude d'Heisenberg (1927) :** Pour les écarts types sur la position et l'impulsion d'une particule on a $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ de même en y et z.

Ou on a défini à une dimension la variance comme $V_x = \int_{\mathbb{R}} (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x$ et ainsi l'écart type $\Delta x = \sqrt{V_x}$

Reprenons l'exemple de la balle de golf de 50 g, imaginons que je connaisse sa vitesse au mm/s près, alors l'incertitude maximale sur sa position donnée par l'inégalité d'Heisenberg est $\Delta x \sim 1 \times 10^{-30}$ m ce qui est bien inférieur à la taille d'un atome. Ainsi pour des objets macroscopiques la notion de trajectoire a toujours un sens.

Enfin, on peut (pas obligé, passer si manque de temps) vérifier que l'on retrouve la vitesse d'une particule classique libre en calculant la vitesse de groupe du paquet d'onde centré en k_0 : $v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}_{k_0}$. Pour cela on s'aide de la relation de dispersion :

$$E = \frac{p^2}{2m} \implies \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \implies v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{h}{\lambda_{\mathrm{DB0}} m} = v_0 \tag{2.6}$$

3 Équation d'évolution : l'équation de Schrödinger

3.1 Première approche

On considère une particule de masse m, non-relativiste, libre, dans le vide et d'impulsion $\vec{\mathbf{p}} = p\mathbf{x}$. Son énergie (cinétique) est alors :

$$E = \frac{p^2}{2m}. \tag{3.1}$$

On peut lui associer l'onde plane de de Broglie, on considère un mouvement à une dimension.

On cherche quelle équation aux dérivées partielles ce type d'onde satisfait, à partir de la relation de dispersion. On raisonne sur E et p, on pourrait de façon équivalente raisonner sur ω et k.

Comme ψ est de la forme $\psi(x,t) = \psi_0 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}$ alors une dérivée partielle par rapport au temps est équivalente à une multiplication par $-i\frac{E}{\hbar} \equiv \partial_t$ et une dérivée partielle par rapport à la position est équivalente à une multiplication par $i\frac{p}{\hbar} = \partial_x$. L'expression de l'énergie assure donc que

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi,$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi}.$$

	Ondes EM dans le vide	Onde de matière
Caractéristiques ondulatoires	Pulsation ω, longueur d'onde λ	n $\omega = E/\hbar$, $\lambda_{\mathrm{DB}} = h/p$
Grandeur ondulatoire	$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, t)$	Fonction d'onde $\psi(\vec{\mathbf{r}}, t) \in \mathbb{C}$
Grandeur mesurée	$I = \lvert E \rvert^2$	$\mathrm{d}^3 P = \lvert\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)\rvert^2 \mathrm{d}^3 r$
Équation d'onde et rdd	$\Delta\vec{\mathbf{E}} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} = 0$ et $\omega = kc$	

Tab. 4 : Tableau répondant à nos problématiques, que l'on va remplir au fur et à mesure.

3.2 Équation de Schrödinger

On peut généraliser cette équation à trois dimensions d'espace pour obtenir l'équation qui régit l'évolution temporelle des fonctions d'onde, c'est *l'équation de Schrödinger.*

Postulat : Équation de Schrödinger (1925) Pour une particule *libre* de masse m, non relativiste :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{\mathbf{r}},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}},t). \tag{3.2}$$

Pour une particule de masse m, non relativiste, soumise à un potentiel $V(\vec{\mathbf{r}})$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{\mathbf{r}},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\mathbf{r}},t) + V(\vec{\mathbf{r}},t)\psi(\vec{\mathbf{r}},t). \tag{3.3}$$

On se limitera au cas où le potentiel est indépendant du temps. On peut alors compléter notre tableau, et obtenir la Table 5.

	Ondes EM dans le vide	Onde de matière
Caractéristiques ondulatoires	Pulsation ω, longueur d'onde λ	n $\omega = E/\hbar$, $\lambda_{\text{DB}} = h/p$
Grandeur ondulatoire	$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},t)$	$\psi(\vec{\mathbf{r}},t) \in \mathbb{C}$
Grandeur mesurée	$I = \lvert E\rvert^2$	Probabilité $\lvert\psi\rvert^2$
Équation d'onde et rdd	$\Delta\vec{\mathbf{E}} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{\mathbf{E}}}{\partial t^2} = 0$ et $\omega = kc$	Équation de Schrödinger, $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

Tab. 5 : Tableau répondant à nos problématiques, que l'on va remplir au fur et à mesure.

3.3 Remarques et conséquences

L'équation aux dérivées partielles que l'on a exhibée est bien une équation d'ondes, selon la définition donnée en introduction. La fonction d'onde évolue de manière déterministe, seule la mesure est probabiliste. C'est une équation linéaire, on peut donc appliquer le *principe de superposition*. Toute combinaison linéaire de fonctions d'onde est une fonction d'onde. Comme l'onde plane de de Broglie est solution, par linéarité, le paquet d'onde est solution de l'équation de Schrödinger à $V = 0$. C'est la solution générale de l'équation de Schrödinger sans potentiel.

La linéarité permet de revenir sur l'expérience introductive. Si on bouche la fentse de droite, alors l'électron passe par celle de gauche et peut être décrit par une fonction d'onde ψ_{g}. Inversement, s'il passe à droite, il peut être décrit par la fonction d'onde ψ_{d}. En revanche, si les deux fentes sont ouvertes et que l'électron a autant de chances de passer à gauche qu'à droite, alors par principe de superposition, l'électron sera décrite par la fonction d'onde normée $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\text{g}} + \psi_{\text{d}})$. Sa densité de probabilité s'écrit alors

$$\lvert\psi\rvert^2 = \frac{1}{2}\Big(\lvert\psi_{\text{g}}\rvert^2 + \lvert\psi_{\text{d}}\rvert^2 + \psi_{\text{g}}\psi_{\text{d}}^* + \psi_{\text{g}}^*\psi_{\text{d}}\Big). \tag{3.4}$$

Du fait des deux derniers termes, la figure observée est différente de celle obtenue en bouchant alternativement la fente gauche et la fente droite.

3.4 Application

On peut présenter la stabilité de la matière, d'autres LP l'ont fait, une référence pourrait être ✍ Belorizky p. 59 et Le Bellac 1.5.2 p. 35. Pauline a présenté la marche de potentiel.

On considère un potentiel $V(x)$ tel que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0 \\ V_0 & \text{sinon} \end{cases}. \tag{3.5}$$

On cherche des états stationnaires, $\psi(x,t) = \phi(x)\chi(t)$. Alors dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$i\hbar\frac{1}{\chi}\frac{\partial}{\partial t}\chi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi + V(x). \tag{3.6}$$

Le membre de gauche est fonction de t uniquement, celui de droite est membre de x uniquement, ces deux variables sont indépendantes donc ces deux membres sont égaux à une même constante, que l'on note E car elle est homogène à une énergie. On en déduit que

$$\frac{\partial}{\partial t}\chi = -\frac{iE}{\hbar}\chi \quad \text{donc} \quad \chi(t) = \chi_0 \exp\left\{-\frac{E}{\hbar}t\right\}$$

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

Si on regarde les les solutions dans la partie où le potentiel est non nul, et que l'énergie E est inférieure à V_0.

$$\psi''(x) - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \tag{3.7}$$

On pose $\frac{1}{\delta^2} = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} > 0$ donc $\phi(x) = A\exp\left\{\frac{x}{\delta}\right\} + B\exp\left\{-\frac{x}{\delta}\right\}$. La fonction d'onde est a priori non nulle même dans la zone où son énergie est inférieure à celle de la barrière ! En classique on s'attendrait à un rebond de la particule, en quantique c'est différent, il y a une onde évanescente, de longueur caractéristique de pénétration $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$.

Conclusion

On a mis en évidence dans cette leçon la dualité onde-corpuscule qui sont deux aspects complémentaires de la description de l'état d'une particule. On a introduit la notion de fonction d'onde qui permet la description complète de l'état d'une particule ainsi que l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution temporelle de la fonction d'onde.

Ce formalisme permet de décrire des observations expérimentales comme la figure d'interférence observée au début. Il existe des applications déduites de cette théorie. Par exemple dans le cas d'une barrière de potentiel la densité de probabilité est non nulle en sortie de barrière et une particule peut ainsi passer une barrière de potentiel classiquement trop énergétique, c'est *l'effet tunnel* permettant notamment la microscopie à effet tunnel.

4 Questions et commentaires

4.1 Questions

-

4.2 Commentaires

-