LP39 - Aspect ondulatoire de la matière, notion de fonction d'onde

Année : 2020-2021
Passage : Pauline Thibault
Correcteurs : Léo Mangeolle et Antoine Essig

Commentaire général

La leçon de Pauline, qui suivait une approche pédagogique et une construction "heuristique" de l'équation de Schrödinger, était bien construite et agréable à suivre. La gestion du temps pourrait être optimisée pour essayer d'en dire un peu plus - on y reviendra ci-dessous.

Commentaires spécifiques

I) Les relations de de Broglie

Il est très bien de contextualiser historiquement les découvertes autour des relations de de Broglie. Il est cependant toujours délicat d'essayer d'y faire coller un exposé pédagogique, forcément linéaire, aboutissant aux relations de de Broglie. En effet, il ne vous aura pas échappé que la genèse de la mécanique quantique est un peu contre-pédagogique, avec d'abord de Broglie qui postule ses relations de correspondance alors que Davisson et Germer n'ont pas encore diffracté des électrons, puis Heisenberg qui postule la mécanique matricielle alors qu'on n'a pas encore résolu l'atome d'hydrogène, puis Schrödinger qui écrit l'équation de Klein-Gordon (relativiste, donc) et qui, dépité parce que ça ne marche pas pour des électrons, se rabat sur la limite classique et résout l'atome d'hydrogène en sachant pertinemment que son équation ne décrit pas vraiment des fermions, puis Davisson et Germer confirment que de Broglie avait visé juste, puis Dirac trouve l'équation qui va bien pour des électrons, puis Pauli montre que la mécanique d'Heisenberg est cohérente avec les équations de Schrödinger et Dirac et qu'on peut l'utiliser pour résoudre l'atome d'hydrogène. Vu d'ici, on aurait pu faire les choses dans un autre ordre. Bref, tout ça pour dire qu'une approche historique ce serait anti-pédagogique et qu'il vaut donc mieux rester dans une progression linéaire et logique, quitte à ne pas coller à la vraie histoire comme elle s'est vraiment déroulée.

Il serait dommage de ne pas mentionner qu'avec la diffraction d'électrons on peut remonter à $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, puisque la figure de diffraction nous donne accès à λ donc à $\mathbf{k}$ et que d'autre part en résolvant le pfd entre les deux grilles qui accélèrent les électrons on peut connaître $\mathbf{p}$. En revanche, pour $E = \hbar\omega$ c'est moins évident à justifier dans cette première partie. Ce qu'on peut à la rigueur se dire c'est que ça marche pour des photons, et donc puisque les photons naissent dans la matière, "il faut bien que la matière qui crée ce photon d'énergie E oscille à la fréquence ω" (c'est un peu fumeux mais on ne va pas non plus résoudre le maser à ammoniac dans cette leçon !).

II) Paquets d'ondes et Heisenberg

Les paquets d'onde sont bien sûr une chose importante, mais il faut peut-être éviter de passer trop de temps à dire à quel point c'est un bond en avant conceptuel qui révolutionne notre conception de la matière etc. En plus, ça peut amener des questions gênantes du jury sur la mesure, la réduction du paquet d'onde etc ; il vaut donc mieux s'en tenir à l'essentiel. Finalement écrire un paquet d'onde c'est juste faire une TF, et pas besoin d'insister sur le fait qu'une onde plane ("de de Broglie") ne marche pas car elle est de probabilité infinie, car ce n'est pas une surprise : en électromag on sait très bien que les ondes planes ont une énergie infinie, ça n'a rien de propre à la méca Q !

Ensuite on écrit les relations d'incertitude. Une question que le jury voudra sûrement vous poser est : s'agit-il d'un principe, d'un théorème ? La bonne réponse est que c'est un théorème. Notez que sa portée est beaucoup plus générale que x et p : pour n'importe quelles observables hermitiennes A, B on a $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|[A, B]|$ (et donc en particulier pour $[p, x] = i\hbar$). Notez que ça marche aussi avec $[A, E] = i\hbar$ par exemple, le champ électrique et le potentiel vecteur de l'électromag (et c'est normal car rappelez-vous que le CEM est constitué d'oscillateurs harmoniques donc E, A et p, x c'est fondamentalement pareil). Il y a aussi les relations d'incertitude temps-énergie, mais c'est un peu particulier car le temps n'est pas une observable hermitienne donc il faut travailler plus salement (et cette relation n'a donc pas le même statut que les autres). Par ailleurs, on peut dire que les relations d'Heisenberg "se comprennent bien" avec les propriétés de la TF, mais on n'a pas besoin que la TF existe pour démontrer les relations de Heisenberg. On peut certes utiliser la TF pour montrer $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, mais les relations d'incertitude restent vraies pour tout espace hermitien avec des vecteurs et un produit scalaire ! C'est vrai en particulier pour l'espace des fonctions L^2 avec le produit $\langle\phi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}x \phi^*(x)\psi(x)$ où la TF intervient, mais ce n'est qu'un cas particulier.

Une question qu'il faut se poser à ce stade de la leçon est : très bien, on a tout un tas de choses quantiques qui semblent n'avoir rien à voir avec la réalité concrète de la physique classique, mais est-ce que si je prends la "limite classique" de toutes ces théories compliquées je retombe sur des choses intuitives comme le pfd (principe de correspondance de Bohr) ? Et c'est bien le cas, par exemple dans le passage sur la vitesse de groupe du paquet d'onde dans le Dalibard - je sais que vous n'avez pas le temps d'en parler mais c'est bon de s'en souvenir quand même. Aussi, quel rapport entre un électron décrit par une onde plane (ou un paquet d'ondes, c'est franchement pareil) et le "vrai" électron "classique" qui se déplace a priori en ligne droite entre le canon et les fentes d'Young ? Ce n'est pas à mentionner bien sûr, mais il serait bon de garder en tête le principe de moindre action, qui donne la limite classique d'un phénomène ondulatoire. C'est vrai en optique, où ce principe de moindre action (ou Maupertuis, ou Fermat) fait le pont entre l'optique ondulatoire et les lois de Descartes ; c'est aussi vrai en mécanique analytique (où on n'est vraiment pas loin de considérer les objets classiques dans un formalisme quantique) ; et c'est vrai aussi en mécanique quantique, du coup. Cf l'article de BUP 22735 par exemple (ou Aslangul).

Concernant la "structuration émotionnelle" de la leçon, il faut voir que cette partie, qui est d'autant plus centrale dans la leçon qu'elle est explicitement dans le titre, ne doit pas donner l'impression d'être juste du formalisme. On peut être tenté de la rendre artificiellement plus "wouaouh" en rabâchant à quel point c'est incroyable de représenter une particule par une onde, mais honnêtement ça risque de ne pas prendre et de faire mauvaise impression - c'est une problématique difficile et je n'ai pas la réponse. Déjà, revenir sur les fentes d'Young c'est une bonne idée, ça permet de donner un aspect concret à la fonction d'onde : même si on ne fait pas de calcul avec à ce stade, au moins on dissipe un peu l'impression de "blabla" que cette partie II pourrait donner. L'ordre de grandeur avec Heisenberg aussi permet de remplir un peu cet objectif. Mais toute bonne idée pour rendre cette partie II concrète est bonne à prendre !

III) L'équation de Schrödinger

La "dérivation heuristique" de l'équation à partir des relations de de Broglie et des ondes planes n'a pas mis les correcteurs d'accord. Ce qui est sûr, c'est qu'il serait très dommage de conclure la leçon sur "bon bah voilà on a l'équation, maintenant on pourrait faire des trucs stylés avec, sauf qu'on n'a pas le temps". Il faut se ménager du temps pour l'appliquer dans un cas simple, par exemple la marche de potentiel (éventuellement en partie sur transparent). Il serait aussi très intéressant de réussir à parler d'ondes évanescentes, pour pouvoir ouvrir sur l'effet tunnel (qui, pour rappel, n'est pas une spécificité de la méca Q, mais ça reste cool - en particulier, le fait que les MET fonctionnent est une preuve que la matière se comporte de manière ondulatoire).

Il vaut mieux ne pas tenter de remarques en dérapage incontrôlé sur l'évolution temporelle, le déterminisme, l'irréversibilité. L'existence et l'unicité d'une équation aux dérivées partielles dépendent beaucoup des conditions aux limites (spatialement et temporellement), on ne peut donc pas conclure grand'chose juste en regardant l'équation. Le fait qu'il y a une dérivée première en temps ne dit rien non plus sur l'irréversibilité (contrairement à l'équation de diffusion, il y a un i devant le ∂_t qui rétablit la symétrie par renversement du temps).

Une question évoquée pendant l'entretien : pourquoi on cherche toujours des solutions sous la forme d'ondes stationnaires, $\psi(x,t) = \phi(x)\chi(t)$? Une réponse "mathématique", c'est que l'algèbre (= l'espace vectoriel ici) des fonctions à variables séparées est dense dans l'ensemble des fonctions continues, et donc, on peut se ramener à chercher une solution stationnaire à l'équation sans perte de généralité. Une réponse physique, c'est qu'on regarde toujours des systèmes avec une extension spatiale et temporelle finie, et donc la décomposition en ondes planes (légitime puisqu'on regarde une équation linéaire) fait naturellement apparaître des solutions sous forme d'ondes stationnaires.

Le fait que l'équation de Schrödinger n'arrive qu'en partie III est un peu déstabilisant mais peut-être qu'on n'a pas vraiment le choix. Il faut aussi noter que cette partie est la seule où on peut faire un vrai beau calcul pour impressionner le jury, il faut donc absolument se ménager du temps ici. Pour cela, il faut réduire le temps passé sur les parties I et II - plus facile à dire qu'à faire, mais le jury sera aussi sensible à votre capacité à synthétiser sans trop perdre en pédagogie et sans que le message que vous voulez faire passer se perde pendant l'opération de compression. Bon courage !

Commentaire post-LP

Après la leçon, on s'est aussi interrogé sur l'étalement de la fonction d'onde, et son interprétation. Déjà il faut bien se dire que ça n'a rien à voir avec l'étalement d'un paquet de matière gouverné par l'équation de diffusion (à cause du i devant le ∂_t, toujours) - l'équation de Schrödinger ne décrit pas un étalement irréversible. D'ailleurs la dispersion du paquet d'onde n'interdit pas qu'à un moment le paquet se focalise plutôt que de s'étaler ; ce que ça dit plutôt, c'est que le paquet d'onde ne peut pas rester focalisé indéfiniment : loin dans le futur il finira par s'étaler (et aussi, loin dans le passé il était déjà étalé - c'est plus compliqué à voir, il faut se servir du fait que si Schrödinger décrit $\psi(t)$, Schrödinger avec $t \leftrightarrow -t$ décrit $\psi^*(t)$).

Cela nous interroge aussi sur le fait qu'une particule soit bien ponctuelle. Là c'est un problème difficile, mais l'expérience des fentes d'Young nous montre bien que même si la fonction d'onde d'un électron libre est étalée en forme de sinus cardinal, au moment où l'électron touche l'écran il forme un point d'impact bien net et ponctuel. Instantanément (?), la fonction d'onde qui était étalée se refocalise en un point, avec une probabilité donnée par $|\phi(P)|^2$ - ce qui montre que cet étalement (qui est peut-être davantage celui de la probabilité que celui de la particule, du coup ? - en gros est-ce qu'on peut parler de particule s'il n'y a pas de mesure ?) n'était pas du tout irréversible. En gros, on touche là au problème de la mesure et de la réduction du paquet d'onde. Je ne crois pas qu'il existe à ce jour de réponse entièrement satisfaisante au problème de la mesure de toute façon. Quoi qu'il en soit, il serait étonnant que le jury vous interroge trop longtemps là-dessus, parce qu'il n'y a pas de réponse claire dans l'état actuel de nos connaissances, et une discussion "type café du commerce" ne permet pas vraiment d'évaluer les compétences des candidats.

Enfin, une pirouette pour s'en sortir est que de toute façon, cet étalement ne concerne que les paquets d'onde libres, ce qui ne court pas les rues. La plupart du temps, les fonctions d'onde qu'on regarde sont celles de particules piégées dans un potentiel, qui forment des états liés décrits par des ondes stationnaires ; on a donc généralement des oscillations périodiques et pas du tout un étalement - cf la molécule d'ammoniac par exemple.

FIGURE 1 – Le dessous des cartes : la genèse de la mécanique quantique, de 1923 à 1929 (A. Uderzo).