

LP39 - Aspect ondulatoire de la lumière. Notion de fonction d'onde

29 juin 2020

Laura Guislain & Pascal Wang

Niveau :

Commentaires du jury

Bibliographie

↗ *MQ I*, Aslangul

→ compléments

Prérequis

➤ prérequis

Expériences

☞ Biréfringence du quartz

Table des matières

1 Aspect ondulatoire de la matière	3
1.1 L'hypothèse et la longueur d'onde de de Broglie	3
1.2 Mise en évidence expérimentale	3
1.3 Régime classique ou quantique ?	5
2 Description quantique de la matière	6
2.1 Fentes d'Young, aspect probabiliste	6
2.2 Notion de fonction d'onde	7
3 Dynamique de la fonction d'onde	8
3.1 Équation de Schrödinger	8
3.2 Paquet d'onde	9
3.3 Inégalités de Heisenberg	10
4 Questions de Corentin	15

Placement

: L2, c'est leur premier cours de quantique après la TS (on oublie le mini chp d'intro qui se fait en PCSI) Après le cours d'optique et le cours sur les ondes.

Préparation

Ressources : doc de la diffraction d'électrons <http://materiel-physique.ens-lyon.fr/BDD/job/BDD/Notices/N093-006.pdf>, eduscol <http://eduscol.education.fr/physique-chimie>, simulation python pour les interférences https://www.ac-paris.fr/portail/jcms/p2_842539/formation-de-franges-d-interferences-particules-par-particules-details=true

Biblio : Dalibard, Basdevant, Sanz, Le Bellac, Aslangul.

Passage : Se souvenir qu'il faut insister sur la pédagogie, faire sentir le besoin du changement de paradigme, comparer à la méca newtonienne et à l'électromagnétisme.

Questions : définition de l'opérateur p ($p = -i\hbar\vec{\nabla}$), condition de régularité de fonction d'onde (continuité et continuité de la dérivée)

Autres exemples d'interférométrie que les fentes de Young :

- interférométrie Mach-Zehnder
- interférences à filets d'atomes : des atomes dans un condensat de Bose sont lâchés et forment un filet atomique. Des atomes d'un même condensat sont lâchés à des altitudes différents formant ainsi deux filets qui interfèrent. (voir le cours Co-hérence quantique, J.Dalibard)
- Interférométrie Ramsey : interférences entre deux chemins dans l'espace des énergies d'un seul atome (à deux niveaux par exemple) et non dans l'espace physique (voir le livre et cours de Haroche)

Compléments Laura

Liens :

- <https://toutestquantique.fr/dualite/> animation fente de Young MQ
- Notice diffraction par des électrons : <http://materiel-physique.ens-lyon.fr/BDD/job/BDD/Notices/N093-006.pdf>
- https://www.ac-paris.fr/portail/jcms/p2_842539/formation-de-franges-d-interferences-particules-par-particules-details=true
- https://cache.media.eduscol.education.fr/file/PC/88/0/Dualite_onde-particule_222880.pdf Fichier eduscol
- Video https://www.youtube.com/watch?v=ZUI3lhRje_0 l'équipe de Tonomura en 1989

Introduction

Historique de la distinction matière-rayonnement À la fin du XIXème siècle, les lois de la physique s'intègrent dans un édifice théorique général qui distingue la matière du rayonnement électromagnétique. On fait un tableau qui résume le paragraphe suivant D'une part, les particules ou corpuscules sont décrites par $(\vec{r}, \vec{p})$ et dont la dynamique est donnée par la 2e loi de Newton. D'autre part, le rayonnement électromagnétique est décrit par des champs continus, fonction de l'espace et du temps ($\vec{E}(\vec{r}, t)$ par ex), dont la dynamique donnée par les équations de Maxwell.

Caractère corpusculaire du photon. Dans une leçon précédente, on a vu que cette vision classique a été bouleversée par la nécessité d'introduire la notion de photons : le rayonnement électromagnétique possède aussi un caractère corpusculaire. (aussi, stabilité de la matière).

Problématique L'inverse est-il possible ? La matière peut-elle se comporter comme une onde ? Comment la décrire dans le cadre de la mécanique quantique ?

1 Aspect ondulatoire de la matière

1.1 L'hypothèse et la longueur d'onde de de Broglie

Rappel sur le photon Dans une leçon précédente, on a vu les propriétés du photon, notamment sa quantité de mouvement $p = E/c = h\lambda$, avec h la constante de Planck. Cette relation lie une grandeur ondulatoire à une grandeur corpusculaire/mécanique.

L'hypothèse de De Broglie L'hypothèse de De Broglie (1923) est que la relation énoncée $p = E/c = h\lambda$ est valable pour toutes les particules. On définit alors la longueur d'onde de De Broglie $\lambda_{DB} = h/p$. Pour une particule non relativiste, $\lambda_{DB} = h/mv$. Cette hypothèse est très farfelue à l'époque. Elle a été présentée dans le cadre de son doctorant. Le jury ne sachant quoi penser, a demandé l'avis à Einstein, qui a trouvé ce point de vue éclairant, à une époque où la mécanique quantique était très mystérieuse.

↓ Si cette hypothèse est correcte, on devrait pouvoir observer avec des particules des propriétés caractéristiques des ondes comme les interférences et la diffraction.

1.2 Mise en évidence expérimentale

Expérience de Davisson et Germer Historiquement, la première expérience qui a montré le caractère ondulatoire de la matière prévu par De Broglie est l'expérience de Davisson et Germer (1927).

Jet d'électrons Elle consiste à envoyer sur un cristal de nickel des électrons extraits d'un filament de tungstène chauffé, par excitation thermique, qui sont ensuite accélérés par une différence de potentiel. *The electron gun was a heated tungsten filament that released thermally excited electrons which were then accelerated through an electric potential difference, giving them a certain amount of kinetic energy, towards the nickel crystal. To avoid collisions of the electrons with other atoms on their way towards the surface, the experiment was conducted in a vacuum chamber.*

Bonus : émission thermoélectronique L'origine physique de l'effet thermoélectronique est la suivante. Les électrons sont confinés au sein du métal constituant le filament et doivent recevoir une énergie W_s pour en sortir ; W_s est de l'ordre de quelques eV, c'est-à-dire 50 à 100 fois $k_B T$ à l'ambiante. D'un autre côté, en raison de l'agitation thermique, la vitesse (l'énergie) d'un électron donné fluctue rapidement au cours du temps et est distribuée suivant une certaine loi statistique. Il existe à tout instant des électrons dont l'énergie est grande : ce sont ceux qui, brièvement et de façon transitoire, se situent dans la queue haute énergie de la distribution. C'est en profitant sans tarder d'une telle fluctuation spontanée qu'un électron peut sortir du métal (il s'agit, presque au sens propre, d'une évaporation de la mer de Fermi). Cette chance de sortie est bien sûr d'autant plus grande que la température est élevée ; comme les probabilités à haute énergie ont une dépendance à peu près exponentielle par rapport à la température ($\simeq Ae^{-E/k_B T}$), une petite variation de température (d'un facteur 3 ou 4) donne des variations très importantes du taux d'émission thermoélectronique. À l'ambiante, le nombre d'électrons ainsi émis est ridiculement petit ; à 2000K une température typique pour un filament (tout comme le corps noir, c'est à une telle température que le filament apparaît à peu près blanc brillant), ce taux devient assez grand - même si seules les queues de distribution sont efficaces - pour donner un courant mesurable.

Mesure de la figure de diffraction, cavité de Faraday To measure the number of electrons that were scattered at different angles, a faraday cup electron detector that could be moved on an arc path about the crystal was used. The detector was designed to accept only elastically scattered electrons. *Le principe de la cavité de Faraday est le suivant : when a beam or packet of ions hits the metal, it gains a small net charge while the ions are neutralized. The metal can then be discharged to measure a small current proportional to the number of impinging ions. The Faraday cup is essentially part of a circuit where ions are the charge carriers in vacuum and it is the interface to the solid metal where electrons act as the charge carriers (as in most circuits). By measuring the electric current (the number of electrons flowing through the circuit per second) in the metal part of the circuit, the number of charges being carried by the ions in the vacuum part of the circuit can be determined.*

Figure de diffraction observée, ordre de grandeur On observe des faisceaux diffractés bien définis et la figure de diffraction est semblable, au sens géométrique, à celle obtenue par diffraction rayons X sur le même cristal. **ODG:** électrons 60 à 80 eV pour Davisson (en diffusion vers l'arrière), soit 4 000 km/s. **ODG:** E=100 eV correspond à $\lambda_{dB} \sim 0.1$ nm donc à la distance interatomique du cristal de Nickel. Comme en optique, la diffraction est notable car la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que la taille des structures. *Germer utilisait des électrons de $10^4 - 10^5$ eV en transmission à travers des feuilles minces de mica.*

On observe que les électrons sont diffractés par la cible principalement dans une direction privilégiée, qui est prévue par la relation de Bragg, à condition de considérer que la longueur-d'onde des électrons est donnée par la relation de de Broglie. Cette expérience prouve donc que les électrons ont un comportement ondulatoire, comme la lumière ou les rayons X. Elle permet aussi de vérifier quantitativement la validité de la relation de de Broglie.

Application à la cristallographie

Expérience de Debye et Scherrer - diffraction d'électrons sur graphite

🔗 Notice Lyon <http://materiel-physique.ens-lyon.fr/BDD/job/BDD/Notices/N093-006.pdf>

Montage La cathode est chauffée, ce qui permet d'émettre des électrons thermiquement. **ODG:** tension de chauffage 6V, tension d'accélération 3 kV. Ces électrons sont accélérés par une différence de potentiel par un réseau de graphite polycristallin. On montre la vidéo : <https://youtu.be/IYnU4T3jbgA?t=151>. Si les électrons étaient purement des particules, on s'attendrait à ce que certains soient arrêtés par les atomes de carbone du graphite et d'autres passent à travers le cristal.

Résultat Mais on observe des anneaux brillants et sombres, qui indiquent de la diffraction. Comme le graphite est polycristallin, les liaisons entre les feuillets sont brisées et leur orientation est aléatoire, ce qui produit une figure de diffraction en cônes. On observe des anneaux de diffraction qui correspondent à l'impact des électrons sur une plaque fluorescente.

Déviation par un aimant En approchant un aimant du faisceau diffracté, on observe la déviation du faisceau prouvant qu'il est composé de particules chargées, ici des électrons et non des photons.

Influence de la tension Si on augmente la tension d'accélération, la longueur d'onde diminue, la diffraction est donc moins marquée : le rayon des anneaux diminue : ils se ratatinent au centre.

Exploitation En mesurant le diamètre des anneaux et en connaissant la distance entre les plans réticulaires correspondants, on remonte à la longueur d'onde des électrons. 🌹 **Les distances interplanaires mesurées ne sont pas la distance interfeuillets qui est beaucoup plus grande que la longueur d'onde (cf. schéma)** Le dispositif étudié, schématisé en figure 7.6, présente une anode et une cathode entre lesquelles les électrons produits par un filament chauffant sont accélérés, ce qui permet d'avoir un faisceau quasi-monocinétique et donc quasi-monochromatique. Si on note E_c l'énergie cinétique des électrons, U la tension accélératrice, e la charge et m la masse de l'électron, on a :

$$E_c = eU = \frac{p^2}{2m}$$

Ainsi, la longueur d'onde des électrons correspondante est :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$$

Pour $U = 1\text{kV}$, on a $\lambda = 39\text{pm}$, ce qui est bien inférieur à la distance interatomique. Le faisceau électronique est ensuite focalisé à l'aide d'une électrode spécifique, puis envoyé sur une poudre de graphite. Celle-ci diffracte la

lumière dans des directions bien précises par rapport au faisceau incident, données par la loi de Bragg :

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

d désigne la distance entre deux plans réticulaires, et θ l'angle de déviation par rapport au faisceau incident. L'objet diffractant étant une poudre, on observe une figure de diffraction composée d'anneaux. En faisant l'approximation des petits angles, le diamètre D des cercles est donné par la relation :

$$\lambda = d \frac{D}{2L}$$

D'où :

$$\frac{1}{D} = d \frac{\sqrt{2me}}{2hL} \sqrt{U}$$

Expérimentalement, on mesure donc le diamètre des cercles de diffraction pour différentes tensions accélératrices U .

Application numérique Tracer $1/D$ en fonction de $\frac{\sqrt{2meU}}{2hL}$. On attend une pente égale à d . On observe deux anneaux qui correspondent aux deux premières familles de plans réticulaires du graphène dont les valeurs tabulées sont $d_1 = 213\text{pm}$ et $d_2 = 123\text{pm}$ (on a géométriquement un rapport $\sqrt{3}$ entre les deux). Les autres familles de plans réticulaires donnent des anneaux trop petits et qui sont confondus avec la tâche centrale (la distance interréticulaire entre deux plans de graphène est de 671pm).

Bonus : ordres supérieurs The intensity of higher order interference rings is much lower than that of first order rings. Thus, for example, the second order ring of d_1 is difficult to identify and the expected fourth order ring of d_1 simply cannot be seen. The third order ring of d_1 is easy to see because graphite always has two lattice planes together, spaced apart by a distance of $d_1/3$. In the sixth ring, the first order of ring of d_4 clearly coincides with the second order one of d_2 .

On utilise aussi des neutrons pour sonder la structure des cristaux, notamment leur propriétés magnétiques.

On a vu que dans certaines expériences, les particules ont un comportement ondulatoire. Pourquoi n'observe-t-on pas de tel phénomènes pour les objets macroscopiques ?

1.3 Régime classique ou quantique ?

Critère Le critère est analogue à l'optique ondulatoire. Si la longueur d'onde est très petite devant la taille caractéristique du système, on n'observe pas de diffraction.

Pour les ondes de matière, c'est analogue.

ODG:

- Un homme de 80 kg courant à 5 m/s au travers d'une porte de 1m. $\lambda_{DB} = 10^{-36}m$. Régime classique.
- Une balle de fusil de 10 g allant à 350 m/s dans le canon de 1 cm de diamètre $\lambda_{DB} = 10^{-35}m$. Régime classique.
- Un électron accéléré par une différence de potentiel de 3kV envoyé sur une poudre de graphite de distance interatomique 1 angstrom : $\lambda_{DB} = 10^{-11}m$. Régime quantique.
- Pour H_2 à 300K, $\bar{\lambda} = 0.2\text{\AA}$ et $\bar{d} = 35\text{\AA}$ donc on considère H_2 comme classique.
- Pour un gaz d'électrons, dans les cntp, qui peut intervenir dans la modélisation des métaux, $\bar{\lambda} = 12\text{\AA}$ et $\bar{d} = 1\text{\AA}$. La longueur d'onde de De Broglie est plus grande car l'électron est plus léger. Le gaz d'électrons est donc quantique, même à température ambiante !

Bonus : record d'interférences Une équipe a réussi à faire interférer des molécules d'oligoporphyrines, composées de plus de 2,000 atomes : <https://www.nature.com/articles/s41567-019-0663-9>. Pour cela, il faut refroidir pour diminuer la vitesse d'agitation thermique et augmenter la longueur d'onde de De Broglie.

Ainsi il y a bien une dualité onde-particule pour la matière selon l'hypothèse de de Broglie. Mais c'est une onde de quoi ? La vision newtonienne de la matière devant être abandonnée pour la matière quantique, nous allons nous servir de l'exemple des fentes d'Young pour introduire la description quantique et notamment la notion d'amplitude de probabilité et d'onde de probabilité.



2 Description quantique de la matière

2.1 Fentes d'Young, aspect probabiliste

✍ papier en PJ, Thibierge.

De même qu'on a vu une expérience de diffraction, il est possible de réaliser des expériences d'interférence.

Description de l'expérience de fentes de Young (Shimizu) On présente l'expérience de (Shimizu et al. 1992) [en commentant le schéma](#). Ils ont réalisé une expérience d'interférences avec des atomes de néon dans un dispositif de fentes d'Young. Un nuage de quelques millions d'atomes de néon est d'abord capturé dans une cellule à vide ("vacuum enclosure") puis refroidi à 2,5 mK dans un piège magnéto-optique ("trap"). La taille du piège est de l'ordre de 1 mm. Les lasers formant le piège sont alors éteints, ce qui libère les atomes sans vitesse initiale. On peut alors les considérer en chute libre. Le piège est situé $d = 76$ mm au dessus de deux fentes séparées d'une distance $a = 6\mu\text{m}$ ("double slit"). La largeur d'une fente est de $2\mu\text{m}$. Un écran MCP ("microchannel plate detector") est placé à une distance $D = 113\text{mm}$ sous la double fente et détecte les atomes de Néon avec une résolution de l'ordre de $20\mu\text{m}$. L'écran MCP enregistre l'impact de chaque atome, un impact étant représenté par un point.

Résultats On montre la vidéo : https://www.youtube.com/watch?v=ZUI31hRje_0 de l'expérience de Tonomura, qui utilise un dispositif similaire 📺 Ce n'est pas la même expérience que celle du schéma, c'est juste pour avoir une vision "temporelle". Les électrons arrivent 1 par 1, comme on peut s'y attendre pour des particules. Mais quand on détecte un nombre suffisant d'impacts, on voit que ces impacts se distribuent suivant un système de franges semblable à celui obtenu dans le cas des interférences lumineuses ou acoustiques : des zones sombres (beaucoup d'impacts donc flux d'atomes intense), parallèles à la direction des fentes, alternent avec des zones claires (peu ou pas d'impacts donc flux d'atomes faible).

Interprétation probabiliste La position de l'impact d'une particule a manifestement un caractère aléatoire. Des conditions initiales semblables conduisent à des résultats différents. En chaque position x , on peut associer une probabilité qu'un électron arrive $p(x)$. Si on attend pour enregistrer un nombre statistique d'impacts, on peut identifier la fréquence statistique et la densité de probabilité $p(x)$. On définit $p_1(x)$ et $p_2(x)$ les densités de probabilités qu'on obtiendrait si une seule des fentes étaient ouvertes. On les dessine : [ça fait deux bosses](#). On observe qu'on n'obtient pas une combinaison linéaire (ou même une fonction quelconque) de p_1 et p_2 . La description classique est mise à mal.

Notion d'amplitude de probabilité Pour proposer une description quantique, on s'inspire des interférences en optique, acoustique etc. En fait, la figure d'interférence est la même qu'en optique, où l'intensité $I(x)$ est analogue de $p(x)$. L'interfrange qui utilise la longueur d'onde de De Broglie. On se souvient qu'en optique, on ne somme pas les intensités mais les amplitudes des champs. On introduit alors l'amplitude de probabilité $A_i(x)$ tel que $|A_i(x)|^2$. Comme en optique, elle est définie à une phase globale près.

Interprétation L'atome de néon est en chute libre, ce qui impose qu'il se déplace vers le bas, mais se propage dans le dispositif comme une onde. En particulier, il passe par les deux fentes à la fois, les deux ondes issues des deux fentes interférant ensuite. Enfin, lorsque l'atome de néon arrive au niveau de l'écran, son comportement redevient de type corpusculaire et il est détecté en un seul point de l'écran. La probabilité de détecter l'atome en un point est donnée par l'aspect ondulatoire, et redonne en moyenne la figure d'interférences. Lorsque les deux fentes sont ouvertes, la densité de probabilité est alors $p(x) = |A_1(x) + A_2(x)|^2$. Le calcul est analogue à celui des fentes de Young.

Application numérique La chute libre se fait sur une hauteur $D + d \sim 200\text{mm}$ ce qui donne comme vitesse théorique de chute libre

$$v_{\text{th}} = \sqrt{2g(D + d)} \sim 2.0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

La relation de de Broglie permet de relier la longueur d'onde λ à la quantité de mouvement $p = mv$ par

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

En utilisant la masse molaire $M(\text{Ne}) = 20.17\text{g/mol}$ pour déterminer la masse d'un atome de néon, on trouve

$$\lambda = \frac{hN_A}{vM} \sim 9.910^{-9}\text{m}$$

D'après les données de l'expérience, $a = 6\mu\text{m}$ et $D = 113\text{mm}$. On s'attend donc à un interfrange i ,

$$i = \frac{\lambda D}{a} = 0.18\text{mm}$$

On lit sur la figure (sur le bas de la figure, la légende précisant que le dispositif est défectueux sur ce qui donne la partie haute) la valeur de l'interfrange $i = 0,2\text{mm}$. Ainsi, la longueur d'onde calculée s'interprète bien en raisonnant sur une particule en chute libre : c'est une autre signature de la dualité onde-corpuscule.

Message

Le **caractère corpusculaire** se manifeste lors de la **détection des atomes** : chaque atome produit un impact ponctuel, comme le ferait une particule classique. L'**aspect ondulatoire** se manifeste lui dans la **répartition des différents impacts sur l'écran**, qui forme une figure d'interférences caractéristique d'un phénomène ondulatoire.

On somme les amplitudes, pas les intensités. Dans cette description en amplitude, la particule est une onde délocalisée dans l'espace. La trajectoire d'un électron n'a pas de sens, lorsque deux possibilités s'offrent à l'électron, il faut abandonner l'idée que l'électron passe soit par le bas, soit par le haut. Comme une onde électromagnétique ne passe ni par une fente ou l'autre des bifentes de Young.



On va formaliser le raisonnement précédent avec la notion de fonction d'onde.

2.2 Notion de fonction d'onde

L'amplitude de probabilité introduite précédente se formalise en un objet, appelé fonction d'onde.

[on suit Basdevant]

Postulat de la fonction d'onde Une particule de masse m dans l'espace à l'instant t est complètement décrite par une fonction d'onde complexe $\psi(\vec{r}, t)$.

Interprétation probabiliste La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans le volume $d^3\vec{r}$ est $dP(\vec{r}) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$. C'est une description **probabiliste non classique car on travaille avec des amplitudes de probabilité et non pas des probabilités**. On insiste : ψ est à valeurs complexes, et s'appelle également l'amplitude de probabilité complexe. Aucun appareil de mesure ne peut y accéder directement, on peut seulement accéder à $dP(\vec{r})$. *C'est Schrödinger qui avait donné le sigle ψ à la fonction d'onde. Il se trompait quant à son interprétation physique. Max Born, fin 1926— début 1927, donna l'interprétation correcte de ψ comme amplitude de probabilité en analysant des expériences de diffusion d'électrons sur des noyaux.*

Propriétés

- La fonction d'onde d'une particule contient l'ensemble des informations sur cette particule. En terme "d'information", elle est donc analogue à $\vec{r}$ et $\vec{p}$ en mécanique newtonienne.
- Normalisation : La fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ est aussi appelée l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point $\vec{r}$. Elle est de carré sommable et normalisée à un. En notant $\mathcal{D}$ le domaine de l'espace accessible à la particule, la probabilité totale de trouver la particule en un point quelconque de $\mathcal{D}$ est égale à 1

$$\int_{\mathcal{D}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$$

- Dimension $L^{3/2}$ en 3D.
- Définie à un facteur de phase près.

Principe de superposition

Toute combinaison linéaire de fonctions d'onde est également fonction d'onde possible.

Il s'agit là du principe central de la théorie quantique. L'additivité des amplitudes de probabilité est à la base des phénomènes d'interférences. Reprenons l'expérience d'interférences par trous d'Young. En procédant par analogie avec les phénomènes d'interférences habituels, nous pouvons expliquer le phénomène si la condition suivante est satisfaite. Nous envoyons une onde de Broglie sur l'écran percé de deux fentes. Supposons que nous connaissions l'onde diffractée à droite par la fente S_1 , c'est-à-dire la fonction d'onde $\psi_1(\vec{r}_C, t)$ en tout point $\vec{r}_C$ de l'écran de détection lorsque seule

la fente S_1 est ouverte. De même, supposons que nous connaissions la fonction d'onde $\psi_2(\mathbf{r}_C, t)$ diffractée par la fente S_2 seule. On rendra compte du phénomène d'interférence à condition que, lorsque les deux fentes sont ouvertes, la fonction d'onde sur l'écran soit la somme de ces deux fonctions d'onde :

$$\psi(\mathbf{r}_C, t) \propto \psi_1(\mathbf{r}_C, t) + \psi_2(\mathbf{r}_C, t)$$

Si cette condition est satisfaite, les ondes de de Broglie rendront effectivement compte de l'expérience d'interférences décrite au chapitre précédent.

Principe de superposition et structure d'espace vectoriel Le principe de superposition impose une forme particulière de l'équation d'onde que satisfont les fonctions d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$, et que nous verrons ci-dessous. Cette équation doit être linéaire de façon que le principe de superposition soit satisfait à tout instant. En généralisant la mécanique ondulatoire à d'autres systèmes que le point matériel, nous verrons que cette propriété est plus importante que la notion de fonction d'onde elle-même. En termes mathématiques, elle signifie que la famille des fonctions d'onde d'un système donné forme un espace vectoriel. L'ensemble des fonctions d'ondes forme un espace vectoriel (et même plus : un espace de Hilbert).

Exemple de l'onde plane L'onde plane est une onde de de Broglie. Reprenons l'expérience d'interférences des atomes. L'idée la plus simple consiste à supposer que des particules monocinétiques, de vitesse $\mathbf{v}$ et d'impulsion $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, libres dans l'espace, sont décrites par une fonction d'onde voisine d'une onde plane monochromatique de la forme :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

où ψ_0 est une constante. Pour ces ondes planes, la longueur d'onde $\lambda = h/p$ et, de façon équivalente, le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ satisfont les relations :

$$\lambda = h/p \quad \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$$

comme prévu par Louis de Broglie. En appliquant les arguments habituels qui expliquent les interférences acoustiques ou lumineuses, cela doit permettre d'expliquer les observations expérimentales.

Une expérience d'interférences (fentes d'Young ou diffraction par un cristal) ne donne pas la pulsation de cette onde. Le facteur de phase $e^{-i\omega t}$ se factorise dans l'amplitude et le signal mesuré ne dépend pas de la valeur de ω . Le bon choix, compris par Louis de Broglie en 1923, consiste à relier cette pulsation à l'énergie de la particule de la même façon que pour les photons d'Einstein, c'est-à-dire : $\hbar\omega = E$ avec pour une particule libre $E = \mathbf{p}^2/2m$. On obtient ainsi ce qu'on nomme des ondes de de Broglie :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar} \quad \text{avec} \quad E = \mathbf{p}^2/2m$$

Conclusion : en mécanique quantique, on a remplacé deux vecteurs $(\vec{r}, \vec{p})$ par un champ scalaire $\psi(\vec{r}, t)$.

Physique des ondes Tout ce qui est quantique n'est pas forcément nouveau. On peut notamment réinvestir des notions de physique des ondes : paquet d'ondes, relation de dispersion (puisque le principe de superposition s'applique), vitesse de phase, groupe.

↓ *Après avoir caractériser la fonction d'onde caractérisant une particule quantique (équivalent mécanique de $\vec{r}$ et $\vec{p}$), on cherche à connaître son évolution dans le temps et l'espace (équivalent du PFD).*

3 Dynamique de la fonction d'onde

[on suit Basdevant aussi]

3.1 Équation de Schrödinger

Equation de Schrödinger L'équation de Schrödinger (1925, PN 1933) est un postulat, qui est en bon accord avec l'expérience, dans un cadre non-relativiste. On donne l'équation complète avec potentiel. Si la particule est soumise à un potentiel V , la fonction d'onde satisfait l'équation aux dérivées partielles :

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

Justification On la justifie à partir de l'hypothèse de De Broglie, qui est une relation de dispersion sur les ondes de matière $E = \hbar\omega = \mathbf{p}^2/2m + V = \hbar^2 \mathbf{k}^2/2m + V$, dont l'équation différentielle linéaire correspondante est l'équation

de Schrödinger. La justification de l'équation de Schrödinger réside dans ses conséquences. Comme nous le verrons dans les chapitres suivants, elle donne des résultats en parfait accord avec l'expérience (tant que les vitesses sont bien inférieures à la vitesse de la lumière, c'est-à-dire dans l'approximation non-relativiste).

Propriétés

- Linéarité. C'est en accord avec le principe de superposition pour les fonctions d'onde. Comme la superposition en électromagnétisme.
- Premier ordre en temps donc déterministe (on connaît la fonction d'onde en chaque instant et en chaque point si on nous donne une condition initiale), comme la deuxième loi de Newton que l'équation de Schrödinger généralise.
- Ainsi les expériences ont des résultats aléatoires, mais la distribution de probabilité a une évolution déterministe.
- EDP donc il faut des conditions limite : parler de la continuité de ψ et celle de sa dérivée pour un saut fini de V (admettre ?)
- Nombre complexe i : théorie intrinsèquement complexe, pas comme en électricité ou en optique.
- Réversibilité. Elle ressemble à une équation de diffusion, qui est irréversible, avec un coefficient de diffusion complexe. Mais le i donne que l'évolution est réversible $t \rightarrow -t$ donne $\psi \rightarrow \psi^*$.

Alternative : application à la particule libre pour interpréter l'énergie cinétique. On trouve la relation de dispersion on retrouve les ondes de De Broglie. *En réalité, le programme admet l'équation de Schrödinger puis retrouve les états stationnaires en ondes planes, mais je trouve que cette façon d'amener l'équation est plus pédagogique car elle permet de développer l'analogie à partir d'une équation d'onde connue.*

Bonus : conservation de la norme La fonction d'onde reste normée. En effet, en dérivant la norme, on arrive à

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r &= \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3r + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi d^3r \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\int \psi^* \Delta \psi d^3r - \int \Delta \psi^* \psi d^3r \right) = 0 \end{aligned}$$

où nous supposons implicitement qu'une intégration par parties est faite à la dernière étape et que ψ et ψ^* s'annulent à l'infini.

Bonus : densité de courant de probabilité densité courant de probabilité pour l'onde plane, équation de conservation comme en hydrodynamique. [aslangul]

↓ *Les ondes planes sont des outils mathématiques pour les fonctions d'ondes. Elles ne sont pas normalisables et ne peuvent ainsi pas représenter l'état d'une particule*

3.2 Paquet d'onde

Cadre : particule dans le vide On se place dans le vide, la relation de dispersion est $\hbar k^2/2m = p^2/2m = \hbar\omega$.

Normalisation de l'onde plane Problème de la non-normalisabilité de l'onde plane. On forme un paquet d'onde en faisant une sommation continue, en écrivant le paquet d'onde $\varphi(x, t)$ sous la forme

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) \exp(ikx - i\omega(k)t)$$

Relation de dispersion On rappelle $\omega = \hbar k^2/2m$ donc $v_\phi = \hbar k/2m$ et $v_g = \hbar k/m = 2v_\phi$.

Étalement du paquet d'onde

On sort le code python : l'étalement est lent à voir, il faut parler pendant.

Représentation en impulsion En utilisant $p = \hbar k$, on peut le réécrire  il faut choisir si on se place à 1D ou 3D...

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \varphi(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

ou $\varphi(\mathbf{p}, t)$ est la transformée de Fourier de $\psi(\mathbf{r}, t)$ Comme pour une particule libre, $|\varphi(\mathbf{p}, t)|^2$ est la densité de probabilité pour la distribution des impulsions à l'instant t . En fait on a défini la fonction d'onde dans l'espace des positions, on aurait pu le faire dans l'espace des impulsions. On passe de l'un à l'autre avec la TF.

Dispersion, vers l'inégalité de Heisenberg L'allure qualitative de $|A(k)|^2$ et celle de $|\varphi(x, 0)|^2$ sont représentées sur le diaporama. La fonction $|A(k)|^2$ est centrée à $k \simeq \bar{k}$ avec une largeur Δk . On va faire le lien avec la transformée de Fourier et introduire l'inégalité de Heisenberg

↓ Comme on l'a vu avec l'expérience des trous d'Young pour des électrons, on doit renoncer à la notion de trajectoire.

3.3 Inégalités de Heisenberg

Inégalités de Heisenberg Les énoncer comme propriétés de la TF. L'inégalité de Heisenberg est une propriété intrinsèque de la description quantique de tout système. Elle n'a rien à voir avec une quelconque incertitude de la mesure elle-même ou de la précision de l'instrument. C'est une autre preuve que la MQ sort du cadre de la mécanique classique Newtonienne, déterministe.

En vertu de l'analyse de Fourier, quelle que soit la fonction d'onde, on a les inégalités :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \quad , \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2 \quad , \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$$

Ces relations sont appelées relations d'incertitude de Heisenberg. Les relations d'incertitude sont saturées, c'est-à-dire $\Delta x \Delta p_x = \hbar/2$, si et seulement si la fonction d'onde est une gaussienne. Comme nous le verrons, les relations d'incertitude restent vraies quand la particule est soumise à des forces.

Quel est le contenu physique de ces relations? Préparons $2N$ particules de façon identique, toutes dans l'état $\psi(\mathbf{r})$, avec $N \gg 1$ (voir la figure 2.3). Pour N d'entre elles, nous mesurons la position. Nous obtenons une certaine distribution de résultats, avec une valeur moyenne $\mathbf{r}_0$ et des dispersions Δx , Δy et Δz . Pour les N autres, nous mesurons l'impulsion et obtenons une valeur moyenne $\mathbf{p}_0$ et des dispersions Δp_x , Δp_y et Δp_z . Les relations d'incertitude de Heisenberg nous disent que pour N suffisamment grand, on trouve nécessairement les inégalités de Heisenberg et cela quel que soit $\psi(\mathbf{r})$, c'est-à-dire quelle que soit la façon dont le système a été préparé.

Ces inégalités sont des propriétés intrinsèques de la description quantique de tout système. Elles n'ont rien à voir avec une quelconque incertitude de la mesure elle-même, ou avec la précision des instruments de mesure. Elles signifient qu'une « particule » ne peut pas être conçue comme simultanément localisée en position et en impulsion au-delà de la limite des inégalités de Heisenberg. Le point de départ de la mécanique classique, où l'état de la particule est décrit par la donnée simultanée de sa position et de son impulsion, est en contradiction avec les relations d'incertitude.

Ordre de grandeur, régime classique La limite classique est celle où Δx et Δp_x sont tous les deux beaucoup plus petits que la précision des instruments de mesure. Étant donné la valeur de $\hbar \sim 10^{-34}$ Js, c'est de loin le cas le plus fréquent lors d'observations macroscopiques. Considérons un objet de masse $m = 1$ gramme, un appareil qui donne la position avec une précision de 10^{-15} m (diamètre d'un noyau) et la vitesse avec une précision de 10^{-15} ms⁻¹ (appareil assez performant!). Ces précisions sont insuffisantes pour détecter les incertitudes quantiques. Quand, dorénavant, nous parlerons de limite classique, c'est ce sens précis que nous entendrons : Δx et Δp_x faibles, mais satisfaisant néanmoins l'inégalité de Heisenberg.

Cas des ondes planes Une onde plane obéit, à la limite, aux relations d'incertitude. En effet, elle correspond à une impulsion bien définie, $\Delta p_x = 0$, mais elle est complètement délocalisée dans l'espace, $\Delta x = \infty$.

Applications aux interférences  Le Bellac p27 On peut interpréter l'expérience de diffraction, que la présence même de la fente de largeur Δx impose à la fonction d'onde une dispersion en position de Δx . Cela se traduit en impulsion par une dispersion $\Delta p_x \sim \hbar/\Delta x$. Avec θ l'angle engendré par la dispersion Δp_x , on a $\theta = \Delta p_x/p = \hbar/\Delta x/(h/\lambda) = \lambda/\Delta x$ comme en diffraction classique. Einstein avait proposé un dispositif pour déterminer la trajectoire du neutron : passe-t-il par la fente supérieure ou inférieure? La réponse de Bohr fut la suivante : si l'écran E_0 reçoit une impulsion δp_x que l'on peut mesurer, alors cela veut dire que l'impulsion initiale Δp_x de l'écran était très inférieure à δp_x et sa position initiale déterminée au mieux avec une précision de l'ordre de $\hbar/\Delta p_x$. Cette imprécision

dans la position de la source suffit à faire disparaître la figure d'interférences. Tous les dispositifs imaginés pour déterminer la trajectoire du neutron sont, soit efficaces, mais dans ce cas il n'y a pas d'interférences, soit inefficaces, et dans ce cas les interférences persistent, mais on ne sait pas par quelle fente est passé le neutron. La figure d'interférences se brouille au fur et à mesure que le dispositif devient de plus en plus efficace. Mais ce qui est crucial est la possibilité d'étiqueter la trajectoire. On peut imaginer et même réaliser expérimentalement des dispositifs qui étiquettent les trajectoires sans perturber en quoi que ce soit les degrés de liberté observés, et cet étiquetage suffit à détruire les interférences.

Application à la stabilité de la matière L'instabilité classique provient du fait qu'une charge (l'électron) accélérée émet un rayonnement, perd de l'énergie et spirale sur le noyau. Les relations d'incertitude lèvent une incohérence fondamentale et incontournable de la physique classique : le problème de la stabilité de la matière. Considérons le cas très simple de l'atome d'hydrogène : un électron, placé dans le potentiel coulombien du proton $V(r) = -q^2/4\pi\epsilon_0 r$. Supposons l'orbite circulaire, de rayon r . La condition d'équilibre mécanique s'écrit $m_e v^2/r = q^2/4\pi\epsilon_0 r^2$ et l'énergie de l'électron est donc :

$$E = \frac{p^2}{2m_e} + V(r) = -\frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Cette énergie n'est pas bornée inférieurement ; plus le rayon décroît, plus l'énergie diminue. Or, l'électron, dans son mouvement circulaire, est accéléré. La conséquence des équations de Maxwell est qu'il rayonne et perd donc de l'énergie. Par conséquent, du point de vue classique, la matière est instable : l'électron devrait rayonner en permanence et s'effondrer sur le noyau.

Les relations d'incertitude nous préservent de ce sort catastrophique et lèvent cette incohérence. Soit $\langle r \rangle$ la distance moyenne de l'électron au proton, qui mesure l'incertitude sur la position de l'électron (le noyau est considéré comme fixe). L'énergie coulombienne est de l'ordre de $q^2/4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle$. En utilisant l'inégalité de Heisenberg, l'énergie cinétique est $E_c = \langle p^2 \rangle / 2m_e \geq \hbar^2 / 2m_e \langle r \rangle^2$. Par conséquent, l'énergie totale est supérieure à :

$$E = E_c + E_p \geq \frac{\hbar^2}{2m_e \langle r \rangle^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle}$$

Cette expression est bornée inférieurement. Son minimum est obtenu pour $\langle r \rangle = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (m_e q^2) \sim 0,5310^{-10} \text{m}$, ce qui mène à :

$$E_{\min} = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13,6 \text{eV}$$

Ce résultat est fondamental. Les relations d'incertitude placent une borne inférieure à la distance moyenne de l'électron et du proton comme à leur énergie potentielle et à leur énergie de liaison, et expliquent la stabilité de la matière.

L'argument ci-dessus n'est pas rigoureux. Avec d'autres formes des relations d'incertitude, notamment que pour tout système $\langle p^2 \rangle \geq \hbar^2 \langle 1/r \rangle^2$. En appliquant ce résultat à $\langle E \rangle = \langle p^2 \rangle / 2m_e - (q^2/4\pi\epsilon_0) \langle 1/r \rangle$ on rend l'argument complètement rigoureux : $\langle 1/r \rangle$ est borné supérieurement.

Bonus : La relation d'incertitude $\langle 1/r \rangle \langle p^2 \rangle$. L'hamiltonien de l'atome d'hydrogène est $H = \hat{p}^2/2m - e^2/\hat{r}$ et l'énergie de son niveau fondamental s'écrit $E_0 = -me^4/(2\hbar^2)$ (voir chapitre 11). On a donc pour tout $|\psi\rangle$

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} - e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \geq -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

On trouve de nouveau une inégalité pour un trinôme du second degré, en l'occurrence dans la variable me^2 . On en déduit :

$$\langle p^2 \rangle \geq \hbar^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2$$

Application aux ordres de grandeur Si l'inégalité de Heisenberg est la forme rigoureuse des relations d'incertitude, qui sont saturées si la fonction d'onde est une gaussienne, il est utile de retenir le fait suivant. Quelle que soit la forme du potentiel $V(\mathbf{r})$, pour des systèmes quantiques de faible énergie (peu excités), on aura toujours :

$$\Delta x \Delta p_x \sim \gamma \hbar$$

où le facteur géométrique γ est de l'ordre de 1. Cela permet de calculer très simplement l'ordre de grandeur des vitesses et énergies de nombreux systèmes physiques à partir de leur taille.

Application : énergie de liaison des noyaux En première approximation, un noyau comportant A nucléons (protons + neutrons peut être considéré comme une sphère de dimension $r_0 A^{1/3}$, avec $r_0 \sim 1,2 \cdot 10^{-15} \text{m}$. On peut considérer - en raison du principe de Pauli que chaque nucléon est, dans le noyau, confiné dans une sphère de rayon r_0 . Puisque $\Delta x \sim r_0$, on doit avoir $\Delta p \sim \hbar/r_0$, ce qui correspond à une impulsion $\sim 140 \text{MeV}/c$. Ces nombres sont tout à fait compatibles avec les valeurs expérimentales (on mesure typiquement $200 \text{MeV}/c$). L'énergie cinétique moyenne

d'un nucléon est $E_c = \Delta p^2 / 2m_p$, où m_p est la masse du proton (ou du neutron), ce qui donne $E_c \sim 10\text{MeV}$. Puisque les nucléons sont liés dans le noyau, leur énergie potentielle (négative) est supérieure en valeur absolue à E_c , soit $|\langle V \rangle| \geq 10\text{MeV}$, et l'énergie de liaison ($V + E_c$) est également de l'ordre de quelques MeV. C'est bien l'ordre de grandeur mesuré : pour des noyaux pas trop petits ($A \geq 20$), on observe que l'énergie de liaison par nucléon est grosso modo constante de l'ordre de 8MeV

Bonus : tentative de contournement de Heisenberg Si je place une fente et que je la rétrécis autant que je veux j'ai un Δx tout petit si je place ensuite une seconde fente très fermée je sélectionne un Δp_x très petit, est ce que ça contredit Heisenberg ? La deuxième fente va faire diffracter une deuxième fois, à la sortie, on a Δp_x grand, sans contredire Heisenberg.

Conclusion

Ouverture : Ouvrir sur les autres effets ondulatoires que l'on pourra observer, notamment l'existence d'ondes évanescentes : on pourra voir des particules "traverser" des barrières de potentiel classiquement inaccessibles, il s'agit de l'effet tunnel.

Alternative : Limitations de la fonction d'onde (spin, phys stat), nécessité d'un formalisme plus poussé (spinors et matrices densités).

Compléments/Questions

Questions

- **Condition sur fonction d'onde (continuité et continuité de la dérivée)**
- Pourquoi dans fentes d'Young, si on bouche une fente on retrouve figure classique? (problème de la mesure).
- Limite classique? Question exotique sur un autre domaine de la physique ondulatoire où il y a une limite classique.
- Question sur ODG que j'avais fait sur inégalité de Heisenberg pour électrons et goutte d'eau.
- Définition des moyennes? Opérateur p ?
- Avec quelles autres particules a-t-on déjà fait l'expérience des fentes d'Young? Comment a-t-on fait pour réussir à le faire avec des particules de plus en plus grosse? Il y a-t-il une notion de déphasage comme en optique? C'est quoi le facteur limitant qui historiquement a fait qu'on a mis longtemps avant de voir des interférences en optique?
- Pour l'ODG de la longueur d'onde de De Broglie pour un humain, s'il reste immobile, alors elle devient infinie et il devient quantique; comment lever ce paradoxe? Vitesse thermique.
- En optique, on a des objets pour manipuler les ondes (miroirs, lentilles ...) y a-t-il des équivalents pour les ondes de matières et comment les réalisent-on?
- Pouvez-vous écrire une équation de diffusion? Pourquoi est-elle irréversible? Mais alors Schrödinger aussi est irréversible?
- Qu'est-ce qu'apporte Heisenberg dans le cas d'une particule dans un puits de potentiel comparé à la mécanique classique? (il attendait l'énergie du fondamental et que la particule ne puisse être au repos).
- Si l'évolution de la fonction d'onde est entièrement donnée par Schrödinger, est-on sûr qu'elle restera toujours normée? Comment peut-on le montrer?
- Vous avez montré Heisenberg à partir des propriétés des TF, comment peut-on le montrer autrement?" Commutateurs.
- Vous avez parlé de ψ_1 et ψ_2 comme étant les fonctions d'onde des particules passées par chacune des fentes. Pourtant vous avez indiqué qu'on ne pouvait pas savoir par où étaient passées les particules. Est-ce correct de parler de ψ_1 et ψ_2 ? Faut-il sommer ces deux fonctions d'onde pour avoir des interférences sur l'écran? ($\psi_1 + \psi_2$ = fonction d'onde quand la fente 2 (1) est fermée. On somme pour avoir des interférences.)
- Comment expliquez-vous à un élève que lorsqu'on ajoute un détecteur de position les interférences disparaissent? (On travaille à une échelle très réduite. Les détecteurs perturbent donc le système étudié.) Quel est l'impact sur la fonction d'onde? Après la mesure de position, dans quel état se trouve le système?
- Comment expliquez-vous à un élève que la particule n'a pas de trajectoire propre contrairement à la mécanique classique?
- Pouvez-vous me parler de la loi de Malus avec des ondes de matière?
- Qu'est-ce qu'une particule libre? Que devient l'équation de Schrödinger pour une telle particule?
- Que pouvez-vous me dire des problèmes de cohérence spatiale et temporelle si on poursuit l'analogie avec l'optique? couplage avec l'environnement
- Question bizarre : si je place une fente et que je la rétrécis autant que je veux j'ai un Δx tout petit si je place ensuite une seconde fente très fermée je sélectionne un Δp_x très petit, est-ce que ça contredit Heisenberg? La deuxième fente va faire diffracter une deuxième fois, à la sortie, on a Δp_x grand, sans contredire Heisenberg.
- Comment faire interférer des atomes (refroidir)?
- Quelles sont les plus grosses particules que l'on a fait interférer? 2000 atomes.

- Donner les modifications à apporter pour la résolution d'un problème pour un système de particules ? (modification de la fonction d'onde, ex pour une molécule polyélectronique ; modif du Hamiltonien en prenant en compte les interactions) Donner les plus grosses particules avec lesquelles on a fait des interférences ? Pour l'expérience des fentes d'Young, on voit la figure se dessiner selon la position sur l'écran., exemple d'expériences de figures de diffraction dans le domaine des impulsions ? (Mach et Zehnder, en prenant un atome à deux niveaux, impulsion laser modifie l'impulsion de l'atome et on fait interférer en sortie, je ne savais pas répondre) Comment faire des interférences d'atomes ? (il faut les refroidir, écrire la longueur d'onde de de Broglie et dire qu'il faut mv faible, refroidissement laser)
- D'où vient le caractère complexe de la fonction d'onde ? Vous dites qu'en optique ondulatoire on factorise les états stationnaires en fonctions à valeurs réelles alors qu'en mécanique quantique on le fait avec des fonctions à valeurs complexes. Pourquoi fait-on cela ? Comment le paquet d'onde se propage-t-il ? Quelle est la différence avec un train d'onde. Décrivez l'expérience de Davisson et Germer. Vous avez dit que de Broglie a émis son hypothèse pour le cas d'un système isolé, mais comment se fait ce qu'on puisse la vérifier vu que le système ne sera plus isolé en le mesurant ?
- Principe de correspondance, importance de la mesure en MQ, interférences atomiques : pourquoi n'ont-elles été obtenues que récemment ?
- Quel est le rôle de la diffraction dans l'expérience d'Young ? Ordre de grandeur ? Et avec les grandeurs sur les électrons que vous avez considérés ? Est-ce réaliste ? Comment choisit-on la taille de la fente et pourquoi ? Date de De Broglie ainsi que des différentes expériences que vous avez présentées ? Quel a été la démarche de De Broglie ? Pourquoi avoir présenté De Broglie après ? Dans l'expérience de la diffraction sur le graphite, pourquoi voit-on les anneaux ? Pourquoi ne voit-on que le premier ordre ? Pourquoi voit-on deux anneaux ? Pourquoi les ondes se réfléchissent avec le même angle en sortie ? Comment vous l'expliqueriez devant une classe ?
- Comment feriez-vous pour montrer $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$ pour le photon dans une classe ? Avez-vous fait une démonstration de Schrödinger ? Pourriez-vous expliquer votre démarche et pourquoi l'avoir fait comme cela ? Quelles sont les conditions pour avoir des interférences avec des électrons ? L'électron passe par les deux fentes... et si je mesure par où il passe ? Pourriez-vous l'expliquer à une classe facilement ? Réexpliquer l'étalement du paquet d'onde. Il s'étale comme une statistique comme par exemple maxwell Boltzmann ? Et avec des atomes ? Peut-on avoir des longueurs d'ondes très grande avec des électrons ? Si non, qu'est-ce qui limite ? Pourriez-vous expliquer la quantification ? Quand le confinement est-il important ? Avez-vous une interprétation physique de la vitesse de phase pour les ondes de matière ?
- Expériences qui ressemblent au puits infini ? Quel type d'interaction cela peut modéliser ? C'est le cas d'une particule confinée dans une boîte. Exemple : nucléons dans le noyau par l'interaction forte, ou encore quantum dot : une boîte quantique ou point quantique, aussi connu sous son appellation anglophone de quantum dot, est une nanostructure de semi-conducteurs, elle se comporte comme un puits de potentiel qui confine les électrons (et les trous) dans les trois dimensions de l'espace, dans une région d'une taille de l'ordre de la longueur d'onde des électrons (longueur d'onde de De Broglie), soit quelques dizaines de nanomètres dans un semi-conducteur. Ce confinement donne aux boîtes quantiques des propriétés proches de celles d'un atome, raison pour laquelle les boîtes quantiques sont parfois qualifiées "d'atomes artificiels".
- Qu'est-ce qui n'est pas pris en compte dans un modèle 1D par rapport à un modèle 3D ? On ne peut pas prendre en compte de moment cinétique.
- Quel problème la MQ résout pour un électron autour du noyau ? Le problème de la stabilité de la matière : une charge accélérée doit rayonner et donc perdre de l'énergie. Ce n'est pas le cas.
- Comment justifier que les CL dans le puits infini c'est $\psi = 0$ hors du puits ? $V = \infty$ donc $\psi = 0$ dans l'équation de Schrödinger pour que ψ'' soit fini.
- Différence entre indétermination et incertitude ? L'indétermination est intrinsèque. L'incertitude est liée au processus de mesure.
- L'équation de Schrödinger permet-elle de retrouver la longueur d'onde de de Broglie ? Analyse dimensionnelle ou mieux : la formule de la longueur d'onde de de Broglie est la relation de dispersion de l'équation de Schrödinger pour un électron libre $V = 0$. $\omega(k) = \hbar k^2/2m$ avec $\hbar\omega = E = p^2/2m$, on a $\hbar = pk$ qui est la relation de De Broglie.
- L'équation de Schrödinger décrit-elle un photon ? Non, la relation de dispersion d'un photon est $E = \hbar\omega = pc$. C'est l'équation de Klein-Gordon.
- Autre représentation de la fonction d'onde ? Représentation impulsion avec la transformée de Fourier.

- Qu'est-ce qui fixe l'épaisseur des anneaux ? (i) C'est la dispersion des vitesses des électrons. A chaque vitesse et ordre est associée un angle de diffraction → plusieurs vitesses, plusieurs angles, c'est comme la L'agitation thermique du cristal compte ? (ii) Le paramètre de maille peut varier à cause de l'agitation thermique.

Commentaires

Lien entre les sous-parties, faire des bilans. 7

Insister sur le parallèle du photon, on a proposé un modèle corpusculaire d'un rayonnement EM. Pourquoi pas l'inverse ?

Si on balance Schrödinger, il faut montrer qu'on retrouve $E = p^2/2m$ pour une particule libre, qu'on retrouve ce qu'on a dit avant. Ou interpréter : schrödinger comme la traduction de l'énergie mécanique.

On peut partir du photon : on a $E = \hbar\omega$ dans les deux cas. Le nombre de photons $N \propto |E|^2$ comme la densité de probabilité $\propto |\psi|^2$.

A l'envers : on a des CL dans le puits infini. On a vu dans d'autres domaines, les CL imposent une discrétisation des modes. Comme dans la corde de Melde, on cherche des modes propres stationnaires. Insister qu'on cherche des modes stationnaires comme base à cause des CL et ensuite présenter schrödinger stationnaire.

Parle de la particule libre.

Cel : contre-intuitif mais comportements trouvés dans d'autres domaines de la physique.

NB : l'inégalité de Heisenberg permet d'expliquer la stabilité de la matière : l'énergie est bornée inférieurement.

4 Questions de Corentin

Retour sur le calcul de la vitesse de groupe : bornes intégrale, condition sur fonction d'onde (continuité et continuité de la dérivée),

Pourquoi dans fentes d'Young, si on bouche une fente on retrouve figure classique ?

Définition des moyennes ?

Vous avez parlé de ψ_1 et ψ_2 comme étant les fonctions d'onde des particules passées par chacune des fentes. Pourtant vous avez indiqué qu'on ne pouvait pas savoir par où étaient passées les particules. Est-ce correct de parler de ψ_1 et ψ_2 ? Faut-il sommer ces deux fonctions d'onde pour avoir des interférences sur l'écran ?

Comment expliquez-vous à un élève que lorsqu'on ajoute un détecteur de position les interférences disparaissent ? Quel est l'impact sur la fonction d'onde ? Après la mesure de position, dans quel état se trouve le système ?

Comment expliquez-vous à un élève que la particule n'a pas de trajectoire propre contrairement à la mécanique classique ? - Pouvez-vous me parler de la loi de Malus avec des ondes de matière ?

Qu'est-ce qu'une particule libre ? Que devient l'équation de Schrödinger pour une telle particule ?

Comment expliquer que la particule « passe par les deux fentes » ? Que pouvez vous me dire des problèmes de cohérence spatiale et temporelle si on poursuit l'analogie avec l'optique ?

si je place une fente et que je la rétrécis autant que je veux j'ai un Δx tout petit si je place ensuite une seconde fente très fermée je sélectionne un Δp_x très petit, est ce que ça contredit Heisenberg ?

Comment faire interférer des atomes (refroidir) ? Quelles sont les plus grosses particules que l'on a fait interférer ? (il faut les refroidir, écrire la longueur d'onde de de Broglie et dire qu'il faut mv faible, refroidissement laser

Avec quelles autres particules a-t-on déjà fait l'expérience des fentes d'Young ?

C'est quoi le facteur limitant qui historiquement a fait qu'on a mis longtemps avant de voir des interférences en optique ?

Pour l'ODG de la longueur d'onde de De Broglie pour un humain, s'il reste immobile, alors elle devient infinie et il devient quantique ; comment lever ce paradoxe ?

En optique, on a des objets pour manipuler les ondes (miroirs, lentilles ...) y a-t-il des équivalents pour les ondes de matières et comment les réalisent-on ?

Pouvez vous écrire une équation de diffusion ? Pourquoi est-elle irréversible ? Mais alors Schrödinger aussi est irréversible ?

Qu'est ce qu'apporte Heisenberg dans le cas d'une particule dans un puit de potentiel comparé à la méca classique ?

Si l'évolution de la fonction d'onde est entièrement donnée par Schrödinger, est-on sûr qu'elle restera toujours normée ? Comment peut-on le montrer ?

Vous avez montré Heisenberg à partir des propriétés des TF, comment peut-on le montrer autrement ?

Equation de Schrödinger : est-ce toujours une équation d'onde ? ça peut être un hamiltonien qui décrit un spin

Dans quels cas peut-on considérer une énergie négative ? En choisissant l'origine des énergies.

Schéma interférences des électrons : où sont les interférences ? Quelle est la direction des franges ?

Message à transmettre/ écueil ?

Deux minutes pour expliquer la MQ à quelqu'un dans la rue ? Comportement des corps infiniment petits. Modèle que l'expérience n'a pas mis en défaut.

C'est quoi un laplacien ? Sens physique ? Anomalie locale, écart à la moyenne locale.

La longueur d'onde d'un photon est modifiée avec l'indice du milieu, comment ça se passe pour un électron ?

Tu as dit que la longueur d'onde du neutron est bien plus grande que son rayon, comment on mesure son rayon alors ? Par diffusion. Il faut préciser dans quelle situation car la taille d'une particule est définie par la taille de son paquet d'onde qui dépend de nombreux paramètres. A priori, on cherche à connaître la taille du neutron dans un noyau.

Pourquoi plusieurs anneaux pour la figure de diffraction des électrons ? Pourquoi des anneaux ? Si on prend un cristal anisotrope, qu'est-ce qu'on voit ?

Tu as décrit la fonction d'onde comme une fonction de l'espace et du temps, est-ce qu'on pourrait choisir d'autres paramètres ?

Définition impulsion ?

Est-ce que la définition d'un état stationnaire est vraiment un produit d'une fonction de l'espace et d'une fonction du temps ?

Manips avec paquets d'onde ?

Que se passe-t-il pour le paquet d'onde avec des photons ? pas de masse pour le photon donc pas d'étalement dans le vide.

Plan

Prérequis : notion de photon, optique géométrique optique ondulatoire (diffraction, interférence)

Introduction. Pour comprendre cette idée contre-intuitive, on remonte dans le temps, en 1900 on explique que les transferts d'énergie se font par quantités discrètes, les quanta d'énergie. En 1905, effet photoélectrique qui met en avant la caractéristique corpusculaire de la matière. Séparation entre les corpuscules qui obéissent à la Citation Heisenberg. Saut : Louis de Broglie. Formalisme ondulatoire de la MQ.

I) Analogie entre mécanique et optique. a) La longueur d'onde de De Broglie. $\lambda = h/p$ **ODG**: Un homme qui marche. $10^{-35}m$ **ODG**: Electron qui va à 10^6 m/s. 1 Angstrom. Très petit dans les échelles macroscopiques. Comme en optique géométrique, lorsque la longueur d'onde est très petite devant les variations du milieu, on peut oublier le caractère ondulatoire. On peut donc oublier le caractère ondulatoire de l'homme qui marche mais pour un électron c'est comparable aux longueurs caractéristiques microscopiques.

b) Mise en évidence expérimentale. Expérience de Davisson et Germer. On reproduit la manip en remplaçant le Nickel par le graphite. On explique comment marche le tube : gaz ionisé par un filament chauffe, électrons accélérés par une différence de potentiel. On montre les anneaux et on présente le calcul. Loi de Bragg : condition d'interférences constructives. Présentation de la manip quantitative en préparation, on remonte au paramètre de maille du graphite. Pour l'expérience de Davisson et Germer, ils ont confirmé la formule de De Broglie.

On revient à l'optique : les interférences. Expérience de Tonomura (1989). Schéma : analogue optique du biprisme de Fresnel. Vidéo : impacts ponctuels qui mettent en évidence un comportement corpusculaire, comportement aléatoire car on a préparé les électrons dans le même état. Quand on a beaucoup d'impact, on voit la figure d'interférence.

Si on cache une des voies, on voit une tache. Quand on ouvre les deux, on ne voit pas la somme des taches.

Conclusion : lorsque deux possibilités s'offrent à l'électron, il faut abandonner l'idée que l'électron passe soit par le bas, soit par le haut. Comme une onde électromagnétique ne passe ni par une fente ou l'autre des bifentes de Young.

c) Inégalité de Heisenberg (1927). Enoncé. **ODG**: Homme qui marche $\Delta p = 0.1m/s$ (à 10%) $\rightarrow \Delta x$ minuscule. On peut associer une trajectoire **ODG**: Electron Δp à 10%. Δx de l'ordre de ? On ne peut plus associer de trajectoire à l'électron. Comme en traitement du signal.

II) Fonction d'onde. a) Postulat. A toute particule, on associe une fonction d'onde $\psi(x, t) \in \mathbb{C}$ qui contient toute l'information sur le système. On se place à 1D par simplicité.

b) Interprétation de Born. C'est le module au carré qui a un sens physique $|\psi(x, t)|^2 dx$ est la probabilité de trouver la particule entre x et $x + dx$. Condition de normalisation $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$.

Comment évolue la fonction d'onde, quelle équation la régit ? Analogue du PFD qui donne l'évolution des particules mais pour la fonction d'onde ? Equation de Schrödinger.

c) Equation de Schrödinger. On l'écrit.

- EDP ordre 1 en temps, 2 en espace.
- nombre complexe i : théorie intrinsèquement complexe, pas comme en électricité ou en optique.
- déterministe.
- réversible. Elle ressemble à une équation de diffusion, qui est irréversible, avec un coefficient de diffusion complexe. Mais le i donne que l'évolution est réversible $t \rightarrow -t$ donne $\psi \rightarrow \psi^*$.
- linéarité, comme la superposition en optique

Retour sur les interférences. Si on ferme l'ouverture du bas, on associe ϕ_1 qui vérifie Schrödinger et les conditions limites correspondantes, idem si on ferme l'ouverture du haut, ψ_2 . Si les deux sont ouvertes $\psi \propto \psi_1 + \psi_2$ (pour la normalisation) vérifie l'équation de Schrödinger et respecte les nouvelles conditions aux limites.

Difficile à résoudre analytiquement pour des potentiels quelconques. Mais pour des formes simples, c'est possible, c'est ce qu'on va faire.

III) Applications. a) Etats stationnaires. On injecte une onde stationnaire dans l'équation de Schrödinger. Nommer la constante E . La partie temporelle se résout, on trouve une fonction oscillante à la pulsation $E/\hbar$. Avec la formule de Planck-Einstein, E s'interprète comme une énergie. Pour la partie spatiale, c'est l'équation de Schrödinger stationnaire à écrire et encadrer.

b) Puits infini. Dessin, condition aux limites (continuité de ψ). Résolution, k et E . Dire que $E > 0$ sinon pas de solution non nulle.

Analogie avec corde de Melde : le confinement crée des modes discrets. Ici, le confinement donne une discrétisation des états propres et donc des niveaux d'énergie, qui sont plus espacés quand le puits est serré. (insister dessus). C'est une conséquence de l'inégalité de Heisenberg.

Ouverture : atome d'hydrogène, orbitales atomiques de chimie.