

LP 39 : Aspects ondulatoires de la matière, notion de fonction d'onde

Armel JOUAN, Géraud DUPUY

Ebauche de plan - Niveau : L2

Prérequis

- Optique ondulatoire (diffraction, interférences)
- Physique des ondes
- Aspects corpusculaires de la lumière

Introduction : Problème de l'origine de la quantification dans la matière.

1 Comportement ondulatoire de la matière

1.1 Hypothèse de De Broglie

- Hypothèse du comportement ondulatoire de particules matérielles
- Introduction de la longueur d'onde de De Broglie
- Exemple d'une pomme tombant d'un arbre et d'un électron non relativiste accéléré par une DDP (calcul de λ en fonction de V). Comparer à une grandeur caractéristique à chaque fois pour juger du caractère ondulatoire.
- ([1] p.43) Calculer la longueur d'onde de De Broglie d'un électron accéléré par une tension V . Moins négligeable

1.2 Diffraction d'électrons

- Présenter l'expérience historique de Davisson et Germer (1927)
- Expérience de diffraction d'électrons sur du graphène (1) [Basdevant p.32]
- Montrer que le phénomène est complètement analogue à celui de la diffraction de rayons X, et que les figures de diffraction sont identiques si on ajuste V tel que $\lambda_{DB, e^-} = \lambda_X$. Notamment l'évolution des rayons en fonction de la vitesse (grâce à la tension)

Transition : On a mis en évidence un comportement ondulatoire : peut-on alors écrire une équation d'onde ?

1.3 Equation de Schrödinger

- L'énergie cinétique d'une particule peut s'écrire comme $E = \frac{p^2}{2m}$
- De plus, la particule quantique vérifie $E = \hbar\omega$ et $\vec{p} = \hbar\vec{k}$
- On a donc $\hbar\omega = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$
- On a donc $\hbar\omega - \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m} = 0$
- Ça ressemble furieusement à une OPPH tout de même $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$
- On remarque que $i\frac{\partial\psi}{\partial t} \leftrightarrow \omega\psi$ et $\Delta\psi \leftrightarrow -k^2\psi$
- On retrouve l'équation de Schrödinger sur une particule libre $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$
- On peut facilement généraliser cette expression au cas où on a un potentiel extérieur. Il suffit de rajouter ce terme dans l'énergie

Transition : donnons un sens à cette fonction ψ introduite dans l'équation de Schrödinger.

2 Interprétation probabiliste et notion de fonction d'onde

2.1 Interprétation probabiliste de la diffraction d'électrons

- Décrire l'expérience de la diffraction par une double fente (2), montrer une animation/vidéo
- Observations :

- Pour chaque électron, on retrouve **un point** d’impact : on retrouve bien la nature corpusculaire
- Point d’impact **aléatoire** pour chaque électron
- Pour un grand nombre d’électrons (préparés dans le même état), on voit se dessiner une figure analogue à la figure d’interférences qu’on obtiendrait en optique, à savoir une **distribution de probabilité** $P(z) \propto I(z)_{\lambda_X = \frac{h}{p}}$
- Le phénomène est donc de nature probabiliste.
- Si on bouche l’une des fentes (ie. on impose le passage des électrons par l’autre fente), on obtient une distribution centrée sur cette fente, et la distribution obtenue par la diffraction par les deux fentes ne correspond pas à la somme des distributions obtenues pour chacune des fentes isolées. Ce résultat est contraire au comportement classique.
- **Conclusions :**
 - La notion de trajectoire classique n’est plus pertinente pour décrire le phénomène : on lui substitue la propagation de l’onde associée à la particule.
 - **En MQ, la mesure perturbe le système** : si l’on cherche à savoir par quel trou passent les électrons, ceux-ci ne peuvent plus interférer par la suite et on n’a alors plus la figure d’interférences.

Transition : Analogie avec l’optique : on somme les amplitudes pour obtenir les interférences, et on prend le module au carré pour obtenir l’intensité/la densité de probabilité.

2.2 Notion de fonction d’onde

- La description d’une particule se fait donc par le biais de la fonction d’onde ψ qu’on relie au caractère probabiliste
- Lien avec la densité de probabilité, condition de normalisation, dimension de la fonction d’onde

Transition : Pour une OPPH (telle qu’on l’avait formulée pour obtenir l’équation de Schrödinger), la condition de normalisation n’est pas vérifiée : cette forme de fonction d’onde ne peut pas représenter une particule. Il faut donc (comme en physique des ondes) trouver un autre formalisme.

3 Paquet d'onde libre

3.1 Définition

- Remarquer que l'équation de Schrödinger est linéaire: Ppe de superposition
- Définition du paquet d'onde. Par analogie avec un cours sur les ondes, on résoud le pb en intégrant des ondes planes pour se donner un paquet d'onde

Cohen p.23 $\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega \cdot t)} d^3\vec{k}$. Solution de l'Eq de Sch

- On a $g(\vec{k})$ éventuellement complexe, et qui représente le poids de chaque onde
- A 1D, on a $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{i(k \cdot x - \omega \cdot t)} dk$

3.2 Evolution temporelle

- On déroule les équations par analogie avec un cours sur les ondes.
- On étudie la propagation libre, on sait qu'on a une relation de dispersion en: $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$
- On a donc une vitesse de phase de $v_\phi = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2m}}$. On a un caractère dispersif. Etalement du paquet d'onde au cours de la propagation
- On a également une vitesse de groupe de $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_o}$. On considère une distribution $|g(k)|^2$ très piquée. on a dès lors $\Delta k \ll k_o$, et donc $d(k^2) = 2k_o dk$. On a donc $\frac{2\hbar k_o dk}{2m} = d\omega$. On obtient finalement $v_g = \frac{\hbar k_o}{m}$. En notant $p_{moy} = \hbar k_o$. On retrouve bien le cas classique $v_g = \frac{p_{moy}}{m}$

3.3 Relation d'indétermination de Heisenberg

- Valeur moyenne de la position $\langle x \rangle = \int x |\psi(\vec{r}, t)|^2 dx$
- Ecart type en position $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$
- On admettra que d'après les propriétés du paquet d'onde, on a $\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$, soit $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
- Limitation intrinsèque sur la détermination simultanée de la position et l'impulsion
- Limitation nulle à la limite $\hbar = 0$, phénomène purement quantique
- Application à l'onde plane (Cohen p.46): k parfaitement connu. Indétermination sur p nulle, donc extension spatiale infinie, et densité de probabilité identique partout

- Pomme de Newton, on se donne une masse de 100g, une vitesse 6.3 m/s. On se donne un Δx de 1mm, on voit qu'on a toute la précision qu'on veut pour Δp (10^{-31} kg.m/s)

Conclusion

Ouvrir sur le caractère très bien prouvé malgré l'aspect peu intuitif, les applications foisonnantes. Ou alors plus fondamentalement sur le formalisme matriciel de Heisenberg.

Bibliographie

- [1] Cohen, Mécanique quantique 1
- [2] Basdevant, Dalibard, Mécanique quantique
- [3] CR LP39 Cassandra
- [4] Epreuve A 2015 Microscopies 4.1 "Caractère ondulatoire des électrons"
- [5] Correction de la leçon à Lyon pour les remarques :
http://www.etienne-thibierge.fr/agreg/LP42_2013_corr.pdf

Animations, ressources

- (1) Expérience de diffraction des électrons : cf MP26
- (2) Animation/vidéo de la diffraction d'électrons contrôlée à double fente