LP42 Aspects ondulatoires de la matière. Notion de fonction d'onde.

Correcteurs : Adrien Licari [1] et Etienne Thibierge [2]

Leçon présentée le jeudi 21 février 2013

Extraits des rapports du jury

Je vous rappelle que le préambule des rapports de l'épreuve de leçon présente les attentes et exigences du jury. Je vous encourage vivement à le lire.

2010 : Cette leçon peut être l'occasion d'introduire simplement l'équation de Schrödinger. La signification physique des différents termes de l'équation de Schrödinger n'est pas toujours connue. Le jury constate qu'un nombre significatif de candidats confondent équation aux valeurs propres et équation de Schrödinger. Enfin, les candidats sont invités à s'interroger sur les aspects dimensionnels de la fonction d'onde et sur sa signification physique précise.

2008 : La justification physique des relations de continuité aux interfaces est trop souvent éludée.

2007 : Cette leçon, qui correspond aux cours introductifs de mécanique quantique de la plupart des manuels, doit permettre d'introduire la longueur d'onde associée à une particule, l'aspect probabiliste des phénomènes quantiques, les observables position et quantité de mouvement, l'inégalité de Heisenberg et l'équation de Schrödinger.

Commentaires généraux

La leçon présentée répond globalement aux attentes sur le sujet. Le temps imparti a été bien respecté et bien géré, en mettant de côté la fin du plan prévu pour conclure dans les temps. En revanche un certain nombre d'erreurs plus ou moins graves ont émaillé la leçon, c'est dommage.

On peut regretter qu'un temps conséquent ait été passé (perdu) à discuter des points peu pertinents : aspect corpusculaire du rayonnement, expérience de Frank et Hertz, fentes d'Young avec des particules classiques. Le temps ainsi libéré pourrait être réinvesti dans une discussion plus approfondie des inégalités d'Heisenberg et l'interprétation heuristique de la stabilité de la matière, et de faire le lien entre la vitesse de groupe du paquet d'onde et la vitesse classique de la particule.

Retour sur la leçon présentée

I) Nature ondulatoire de la matière

1/ Dualité onde-corpuscule de la lumière

Trop de temps a été passé sur cette partie. Faisant l'objet d'une leçon séparée, elle est à inclure dans les prérequis, et il suffit de rappeler *rapidement* les principaux résultats.

2/ Expérience de Frank et Hertz

Trop de temps a été passé sur cette partie. De plus, la discussion de l'expérience est hors sujet par rapport au reste de la leçon, car elle ne fait appel ni aux ondes de matière, ni à la fonction d'onde. Cette expérience est fondamentale pour prouver la quantification de l'énergie dans la matière, et elle trouverait sa place dans la leçon dédiée, mais malgré toute son importance historique je pense qu'elle ne rentre pas dans le cadre de cette leçon. Si jamais vous tenez à la présenter malgré tout, il faut alors la relier au modèle de Bohr avec un discours centré sur les aspects ondulatoires.

Il est néanmoins intéressant de mettre en évidence expérimentalement les ondes de matière. Une expérience plus appropriée, d'importance historique, est l'expérience de Davisson et Germer. Elle est discutée par Basdevant, et l'ENS possède un montage de diffraction d'électrons permettant de la réaliser.

3/ Ondes de de Bröglie

Cette partie a été bien présentée, avec force ordres de grandeur, qui sont attendus. On peut parler du grain de poussière de Cohen Tannoudji, mais il n'est pas interdit d'être un peu plus original (longueur d'onde d'une bactérie, d'un composant de micro-électronique, ...).

II) Description quantique de la matière

1/ Expérience de pensée

Trop de temps a été passé à décrire l'expérience avec le fusil (sur lequel on s'abstiendra de toute blague douteuse). Étant intuitive, la courbe de probabilité classique $P_{1+2} = P_1 + P_2$ peut être amenée beaucoup plus vite.

Les expériences de fentes d'Young ont été réalisées pour de vrai (cf. Basdevant), il est donc intéressant de présenter ces résultats. Pour la culture, les interférences ont été observées avec des atomes, des électrons dans le vide et des molécules, jusqu'aux fullerènes (molécules de C_{60}). On a également observé des interférences entre électrons dans les solides, mais dans une géométrie type interféromètre de Mach Zehnder.

Le CD de Manuel Joffre fourni avec le Basdevant contient beaucoup d'animations intéressantes, dont en particulier la construction progressive de la figure d'interférences des fentes d'Young. N'hésitez pas à la projeter !

1. adrien.licari@ens-lyon.fr
2. etienne.thibierge@ens-lyon.fr, http://perso.ens-lyon.fr/etienne.thibierge

L'aspect probabiliste n'est pas très bien amené, il est intrinsèquement lié au processus de détection. Ce qui est probabiliste est le résultat d'une « mesure », ici la possibilité de voir l'atome quelque part, que ce soit sur l'écran ou près d'une fente. Il faut connaître le postulat de réduction du paquet d'onde pour pouvoir répondre aux questions sur ce sujet.

2/ Notion de fonction d'onde

Il faut davantage mettre en avant le fait que la description quantique exige de remplacer six variables lagrangiennes $\overrightarrow{r}$ et $\overrightarrow{p}$ par un champ scalaire $\psi(\overrightarrow{r},t)$.

La dimension (au sens de l'unité) de la fonction d'onde doit absolument être mentionnée. Elle vient immédiatement de sa signification probabiliste, une probabilité n'ayant pas d'unité. On peut considérer qu'elle dépend du problème considéré, selon le nombre de directions de l'espace pertinentes (1d à 3d). Tout dépend de la façon dont on écrit la probabilité.

Le principe de superposition peut être postulé, mais il faudra alors le relier à la linéarité de l'équation de Schrödinger. Une autre possibilité est de le déduire de ladite linéarité, et donc de le présenter plus tard.

Pour ceux qui souhaiteraient utiliser le Feynman, attention à ne pas s'emmêler les pinceaux. Les amplitudes de probabilité définies par Feynman sont affectées à des trajectoires classiques, et à la probabilité qu'elles soient empruntées par la particule. Cette définition conduit au formalisme de l'intégrale de chemin (que vous n'avez bien sûr pas à connaître). Au contraire, la fonction d'onde est une amplitude de probabilité de présence, liée à un processus de détection de la particule. Ces deux définitions sont donc différentes.

III) Dynamique de la fonction d'onde

1/ Equation de diffusion

L'équation de Schrödinger **n'est pas** une équation de diffusion. L'opération de renversement du temps pour des fonctions complexes est non triviale, et exige de remplacer t par $-t$ mais aussi les nombres complexes par leurs conjugués. Ce n'est pas simple à intuiter, mais c'est indispensable pour avoir des résultats cohérents lorsqu'on travaille avec un champ magnétique. Par conséquent, l'équation de Schrödinger est invariante par renversement du temps, ce qui n'est pas le cas d'une équation de diffusion. Ceux qui veulent plus de précision peuvent regarder le chapitre sur les symétries d'Aslangul[3].

La signification physique des différents termes est attendue, et a été bien donnée.

2/ Paquets d'onde

La nécessité de la construction du paquet d'onde est à amener à partir du caractère non normalisable de l'onde plane, et sa validité avec la linéarité de l'équation de Schrödinger. Peu de mots valent bien des longs discours :)

Il serait intéressant dans cette partie de montrer qu'une particule décrite par un paquet d'ondes centré sur k_0 a une vitesse de groupe $v_g = \hbar k_0/m$, correspondant à ce qu'on attend en mécanique classique $v = p_0/m$. Cela permet de reconnecter la description quantique à une description classique.

3/ Principe d'incertitude de Heisenberg

L'énoncé donné de l'inégalité de Heisenberg est au mieux mal écrit, au pire faux. Il y a une inégalité par composante : $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$, *etc.* Si on veut écrire une inégalité plus globale, elle s'écrit alors $\Delta\overrightarrow{r}\cdot\Delta\overrightarrow{p} \geq 3\hbar/2$.

L'application à la stabilité de la matière est intéressante, c'est dommage de ne pas l'avoir présentée. Le poly fait référence au Basdevant, cette application est aussi très bien présentée par Cohen Tannoudji.

Questions

Les questions servent *d'abord* à éclaircir les points peu clairs de la leçon, puis *ensuite* à tester vos connaissances plus largement. Voilà quelques notions sur des points qui pourraient être discutés lors des questions.

L'approche en fonction d'onde ne peut pas décrire toute la mécanique quantique. Le spin nécessite d'utiliser des spineurs, qui sont pour un spin 1/2 des vecteurs à deux composantes, chaque composante pouvant s'interpréter comme une fonction d'onde pour une polarisation de spin. Le lien entre la mécanique quantique et la physique statistique ne peut pas non plus se faire seulement à l'aide des fonctions d'ondes, et recquiert l'introduction des matrices densité.

L'équation de Schrödinger n'est valable que pour des particules non-relativistes. Pour des particules relativistes, elle est remplacée par l'équation de Klein-Gordon pour des bosons et par l'équation de Dirac pour des fermions.

La fonction d'onde peut se définir dans le formalisme de Dirac comme étant $\psi(\overrightarrow{r},t) = \langle\overrightarrow{r}|\Psi(t)\rangle$. Ici $|\Psi(t)\rangle$ est le vecteur état du système à l'instant t, et $|\overrightarrow{r}\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur position : $\hat{\overrightarrow{R}}|\overrightarrow{r}\rangle = \overrightarrow{r}\,|\overrightarrow{r}\rangle$.

L'image de Schrödinger où les états dépendent du temps mais pas les observables n'est pas la seule façon de décrire l'évolution temporelle en mécanique quantique. L'image d'Heisenberg prend le parti inverse : l'état du système ne dépend pas du temps, mais les observables si. Il existe aussi une version intermédiaire, appelée image d'interaction.

Au delà de la vision qualitative de la vitesse du groupe du paquet d'onde, le lien entre mécanique quantique et mécanique classique est formalisé par le théorème d'Ehrenfest. Ce théorème permet d'aboutir à une équation régissant le comportement des valeurs moyennes quantiques au cours du temps, équation que l'on retrouve en mécanique analytique.

La condition de quantification du modèle de Bohr ($\sigma_z = n\hbar$ avec n entier) peut se retrouver en exprimant une condition d'interférences constructives des ondes de

3. Vous pouvez télécharger gratuitement une ancienne version des cours de Claude Aslangul, antérieure à ses livres mais déjà très dense : `http://gujegou.free.fr/quantique_licence.pdf` et `quantique_maitrise.pdf`. Le passage intéressant se situe pp. 75 et suivantes du PDF de maîtrise.

de Bröglie avec elles-même. Vous devez savoir décrire le modèle de Bohr. Il est discuté dans presque tous les livres de mécanique quantique. J'aime particulièrement la présentation qu'en donne J.P. Faroux en annexe de son livre *Mécanique I* (livre de prépa, pas de mécanique quantique).

Le principe de superposition des fonctions d'ondes est loin d'être anodin. Il signifie que l'état d'un système peut être une combinaison linéaire d'autres états. Cette étrangeté quantique conduit entre autre à l'intrication, phénomène quantique par excellence. Le chat de Schrödinger est aussi dans une combinaison linéaire d'états.

Conclusion

La démarche suivie dans la leçon, très classique, permet de traiter le sujet correctement. Vous pouvez donc baser votre leçon sur celle qui a été présentée, en compactant le début de leçon pour mieux discuter la fin.

Bien évidemment, ce n'est pas la seule approche possible. Comme toutes les expériences discutées ont été réalisées, une présentation plus orientée résultats expérimentaux qu'expériences de pensée historiques est pertinente également. Cela pourrait apporter une touche d'originalité à votre leçon.

Si vous avez d'autres questions, nous restons à votre disposition par mail, en TP ou dans de futures séances de correction.