

Titre : Q2 Aspects ondulatoires de la matière

Présentée par : KIRSCH Alfred

Rapport écrit par : THEMEZE Guillaume

Correcteur : Hare Jean

Date : 01/03/2021

Bibliographie

Titre	Auteurs	Éditeur
Tout-en-un Physique PSI-PSI* Ne jamais utiliser ce livre pour la MQ, Il y en a plein d'autres qui contiennent moins d'erreurs ou approximations grossières	Stéphane Cardini, Elisabeth Ehrhard ,	Dunod

Plan détaillé

(indiquer parties, sous-parties, 1 ou 2 phrases d'explications par sous-partie, et références)

Niveau choisi pour la leçon : CPGE

Pré-requis :

- Optique ondulatoire
- Equation de dispersion en physique des ondes

Introduction (Temps 1'50'')

I- Interférences d'ondes de matières et fonction d'onde

I – A) Expérience introductive

On explique les résultats de l'expérience : F. Shimizu, K. Shimizu, H. Takuma ; "Double-slit Interference with ultracold metastable neon atoms" ; Physical Review A ; 1992.

- Impacts ponctuels : modélisation matérielle corpusculaire
- Densité de probabilité associée à la répartition des impacts

(Temps 5'50'')

Densité de probabilité - Analogie avec l'optique : Intensité

I – B) Fonction d'onde

On énonce

- la fonction d'onde (Complexe)
- La probabilité de trouver la particule dans un volume V à l'instant t
- La condition de Normalisation

(Temps 10'00'')

- Le postulat de superposition (et refaire l'analogie avec l'optique Fresnel)

Comment connaitre son évolution ? (Temps 13'00'')

II – Equation de Schrödinger libre

II – A) Raisonnement énergétique

- Energie libre d'une particule (certes mais encore)
- Relation de Broglie

(Temps 16'50'')

- Relation d'Einstein - Relation de dispersion de Broglie

(Temps 20'30'') Quelle est l'équation différentielle liée à cette dispersion ?

Raisonnement pour arriver à l'équation de Schrödinger d'une particule libre.

II – B) Paquet d'onde de matière

On modélise mathématiquement la fonction d'onde pour un paquet d'onde (autour du vecteur d'onde k_0). On utilise un développement au premier ordre en $(k - k_0)$ de la pulsation ω . Exprimer la densité de probabilité. Relever la vitesse de groupe de la propagation du paquet d'onde.

II – C) Retour à l'expérience introductive

On explique l'interférence de la fonction d'onde pour introduire la longueur d'onde de De Broglie.

III – Equation de Schrödinger

III – A) Avec potentiel

On généralise le raisonnement fait en II – A pour avoir l'équation de Schrödinger à potentiel. Les ondes planes ne sont plus solution

III – B) Ondes stationnaires de matière

On cherche une solution stationnaire et on arrive à l'Equation de Schrödinger stationnaire. La physique est dans V le potentiel.

III – C) Atome d'hydrogène

On retrouve les valeurs autorisées de l'énergie E . Exprimer l'inégalité d'Heisenberg.

Questions posées par l'enseignant (avec réponses)

(l'étudiant liste les questions posées, ainsi que les réponses données par l'enseignant. Si certaines réponses manquent, l'enseignant pourra compléter le document)

Partie I – A)

- La définition de l'énergie en EM est liée au vecteur de Poynting ? Quelle précaution mathématique faut-il prendre pour la définition du vecteur de Poynting ?

$\underline{a} \cdot \underline{b} \neq \underline{a}^* \cdot \underline{b}$ autrement dit le remplacement d'un signal réel par un signal complexe qu'on appelle le signal analytique ne marche que quand on fait une opération linéaire et ne marche pas quand on fait une opération bilinéaire en particulier pour le vecteur de Poynting ou la densité d'énergie. On fait donc une valeur moyenne temporelle pour le lien entre le vecteur de Poynting et la densité d'énergie

- Réexprimer l'intensité avec l'intensité complexe pour faire l'analogie entre optique et mécanique quantique ?

$I = \langle \underline{S} \cdot \underline{e}^* \rangle$ attention à la valeur moyenne et que c'est complexe

- Justifier que la fonction d'onde Ψ doit être complexe.

i) Ψ doit contenir toute la physique de l'état quantique considéré. Donc l'Eq S doit être du premier ordre par rapport au temps, et le caractère complexe vient de ce que l'on veut conserver la norme (avec des exponentielles complexes) et assurer la microréversibilité. Sans le i dans l'Eq de S, on obtiendrait une équation de diffusion qui n'est PAS réversible.

ii) Cette deuxième raison est plus générale car ne repose pas sur la forme de l'équation. En EM on a deux champs couplés \vec{E} et \vec{B} . En acoustique aussi la pression et la vitesse. On a une propagation ondulatoire grâce au couplage de ces deux quantités. Ici le fait que Ψ est complexe il y en a 2 en une. La partie imaginaire et la partie réelle sont couplées et permettent donc la propagation de l'onde.

- Qu'est ce qui se passerait si on ne mettait pas le i dans l'Eq de S ?

Ce serait plutôt une équation de diffusion. Ça modéliserait mal ce que l'on observe.

Partie I – B

- La façon d'introduire V dans l'Eq S n'est pas trop rapide. On peut la faire d'un point de vue ondulatoire ?

À partir de l'équation de d'Alembert on peut avoir l'équation de Helmholtz. La phase de la solution est l'action, calculée non par le lagrangien, mais par la définition hamiltonienne $S = \int p dq - H dt$. Schrödinger a deviné son équation à partir de l'équation de d'Alembert, mais elle permet de retrouver celle de Hamilton-Jacobi.

- Vous avez introduit une onde plane et par identification vous avez déduit qu'il y a un terme en ω qui est la dérivée par rapport au temps et un terme en k qui est la dérivée

par rapport à l'espace. On a ça pour une onde plane, comment on montre que ça marche pour une superposition d'onde plane c'est à dire un paquet d'onde quelconque.

L'équation de Schrödinger est linéaire et dont on modélise mathématiquement un paquet d'onde général et on peut décomposer une onde plane et qu'il vérifie toujours l'équation de Schrödinger.

En équations (cf poly JH §II.2.2) considérons une fonction d'onde $\psi(x)$ qui est une superposition d'ondes planes (appelée « paquets d'ondes ») avec un poids $g(p)$ soit :

$$\psi(x) = \int g(p) \exp(i(kx - \omega t)) dp = \int g(p) \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp$$

où la seconde égalité résulte des relations de Planck-Einstein $E = \hbar\omega$ et de de Broglie $p = \hbar k$, qui n'ont de sens strict que pour les ondes planes dans l'intégrale. En dérivant sous le signe somme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar} \int p g(p) \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \int p^2 g(p) \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp \\ \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \int E g(p) \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp = -\frac{i}{\hbar} \int \left(\frac{p^2}{2m} + V(x)\right) g(p) \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp \end{aligned}$$

Et en reportant la première dans la seconde (et après multiplication par $i\hbar$) :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \int p^2 g(p) dp + V(x) \int g(p) \exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$

Partie II – B

- Vous avez un paragraphe dans la partie II – B “Paquet d'onde de matière. Vous étudiez ce qui normalement à était déjà vue, vue le près-requis “Equation de dispersion en physique des ondes” vous avez sûrement étudié la propagation d'un paquet d'onde. Quelle est la raison de la refaire de ce contexte ?

Il n'est pas indispensable de refaire cette étude, mais par contre il faut interpréter la vitesse de groupe du paquet d'onde en rapport avec la vitesse classique (elles coïncident)

- Quand on a ça en générale quel autre phénomène on peut montrer ?

La dispersion

- Il s'étale forcément ?

Oui car ici on a pris le cas libre. La réponse correcte est NON ! (Micro-réversibilité)

La dispersion résulte ce que les ondes « bleues » (coté des fréquences spatiales k supérieures à la valeur moyenne) se propagent plus vite que les ondes « rouges », puisque la vitesse de groupe est proportionnelle à k . On peut donc préparer un paquet d'onde « convergent » en mettant les fréquences élevées en retard par rapport au fréquences plus basses.

Pour les calculs il faut utiliser les équations de Ehrenfest –(cf poly JH §IV.4.6 et 6).3 ou bien en abrégé, en utilisant $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{\langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p}^2 \rangle = 0, \quad \frac{d}{dt} \frac{\langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle}{m} = \frac{2\langle \hat{p}^2 \rangle}{m^2}$$

On constate que $\langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle$ est une fonction affine du temps, et on peut choisir l'origine des temps à l'instant où il s'annule, et on a alors :

$$\langle \hat{p}^2 \rangle(t) = \langle \hat{p}^2 \rangle(0), \quad \langle \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \rangle = \frac{2\langle \hat{p}^2 \rangle}{m^2} t \quad \text{et} \quad \langle \hat{x}^2 \rangle(t) = \langle \hat{x}^2 \rangle(0) + \frac{\langle \hat{p}^2 \rangle}{m^2} t^2$$

Les mêmes équation sont valables pour les écarts de p et de x à leur valeur moyenne¹ On obtient donc :

$$\Delta p^2(t) = \langle \delta \hat{p}^2 \rangle = \Delta p^2(0), \quad \Delta x^2(t) = \langle \delta \hat{x}^2 \rangle = \Delta x^2(0) + \frac{\Delta p^2}{m^2} t^2$$

à condition que la covariance $\langle \delta \hat{x} \cdot \delta \hat{p} + \delta \hat{p} \cdot \delta \hat{x} \rangle$ soit nulle pour $t = 0$, c'est à dire qu'il n'y ait aucune corrélation entre les positions et les impulsions. Si on part de cet état, (ou d'un état ultérieur) on n'observe que l'élargissement. Si au contraire on part d'un état antérieur, où la covariance est négative, on observe d'abord une contraction, suivie par un élargissement aux temps longs.

¹ Pour le monter, le plus simple est de se placer dans le référentiel galiléen où $\langle \hat{p} \rangle = 0$ et $\langle \hat{x} \rangle(0) = 0$. Sinon on peut refaire le calcul en remplaçant partout les opérateurs \hat{x} par $\delta \hat{x} = \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle$ et \hat{p} par $\delta \hat{p} = \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle$.

Comment il s'étale ? Comment le trouver par la méthode usuelle ?

On peut tenter $\Delta x(t) = \Delta x(0) \sqrt{1 - (t/\tau)^2}$ Ce qui ressemble au résultat mais est clairement absurde, et ne donne pas d'information sur τ ...

Il faut pousser à l'ordre 2 le développement limité de $\omega(k)$ en $\delta k = (k - k_0)$ ~~Et faire un TF spatial d'un paquet d'onde de vecteur d'onde autour de k_0 et calculer la densité de probabilité de présence $\rho(x,t)$ et identifier les termes~~ (noter que le terme d'ordre 1 est nul par définition même de l'argument de phase stationnaire).

On obtient, en notant $\tilde{\psi}(k)$ la transformée de Fourier (en k) et supposant qu'elle n'oscille pas (courbe en cloche)

$$\psi(x) = \int \tilde{\psi}(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \approx e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \int \tilde{\psi}(k) e^{i\delta k (x - v_g t)} e^{-i\hbar \delta k^2 t / 2m} dk$$

Aux temps courts, le terme quadratique en δk est négligeable et on retrouve le fait que le paquet d'onde se déplace sans déformation à la vitesse $v_g = \hbar k_0 / m$. Pour des temps plus longs, ce terme quadratique a pour effet de remplacer $\tilde{\psi}(k)$ par $\tilde{\psi}(k) e^{-i\hbar \delta k^2 t / 2m}$ qui oscille de plus en plus vite, quand t croît, et sa largeur effective autour de k_0 est réduite par brouillage de ces oscillations². La largeur de $\tilde{\psi}(k)$ étant ainsi réduite, celle de $\psi(x)$ doit augmenter. Le temps caractéristique τ où cela débute est celui où les phases $\delta k (x - v_g t)$ et $\hbar \delta k^2 t / 2m$ sont du même ordre de grandeur, ce qui se produit approximativement lorsque $\hbar \Delta k \frac{t}{m} \sim \Delta x(0)$ soit $\tau = \Delta x(0) / (\frac{\Delta p}{m})$. Finalement, on a, en ajoutant les variances³ :

$$\Delta x^2(t) = \Delta x^2(0) + \left(\frac{\Delta p}{m} t \right)^2 = \Delta x^2(0) \left(1 + \left(\frac{\Delta p}{\Delta x(0) m} t \right)^2 \right) \Rightarrow \Delta x(t) = \Delta x(0) \sqrt{1 + \left(\frac{t}{\tau} \right)^2}$$

Dans le seul cas d'un paquet minimal à l'instant initial, $\Delta p \sim \hbar / \Delta x(0)$ et donc $\tau = m \Delta x^2(0) / \hbar$

Dans le cadre de l'expérience vous avez parlé d'onde secondaire. On optique les ondes secondaires n'existent que dans le cas Huygens-Fresnel. Qu'est-ce qu'il faudrait mettre dans le déphasage s'il fallait considérer le champ de pesanteur ?

Il faudrait intégrer les déphasages successifs sur chacune des couches.

Oui mais la réponse complète est due Feynman dans les années 50. Il faut mettre dans la phase l'action classique $S/\hbar = \int L(x, v) dt / \hbar = (\int p dx - H dt) / \hbar$ qui a bonne la bonne structure utilisée depuis le début. Ici on aura donc un terme additionnel en $-mgz dt$.

Partie III – B

- Comment justifier l'équation en partie III – B, c'est à dire que si on veut séparer le temps et l'espace on cette Equation de Schrödinger stationnaire.

On part de l'EQ S et on injecte la forme $\phi(r) * g(t)$, on fait la méthode des séparations des variables en considérant que g et ϕ ne sont pas identiquement nulles. On arrive en divisant par $\phi(r) * g(t)$, à deux fonctions égales mais avec des variables différentes (de l'espace et du temps) donc constante. On arrive pour ϕ et g à des équations différentielles du second ordre et après résolution on sélectionne les solutions les plus physiques.

- En le faisant on arrive à $\hbar g'/g = -\hbar^2/(2m) \Delta \phi / \phi + V$, expliquer l'importance de i ?

Sinon on arriverait à des solutions qui s'aplatissent ou explosent, des exponentielles réelles. De plus on veut des solutions qui conservent la densité de probabilité par exemple il ne faudrait pas avoir d'exponentiel réel.

² On peut noter que ce terme de phase en δk^2 est exactement analogue à celui en k^2 qui apparaît dans le propagateur de Fresnel, et peut donc être interprété en termes de diffraction.

³ On utilise ici aussi le fait que les valeurs de x et celle de p sont non corrélées à l'instant initial

Commentaires lors de la correction de la leçon

(l'étudiant note les commentaires relatifs au contenu de la leçon : niveau, sujets abordés, enchaînement, réponses aux questions, etc. **L'enseignant** relit, et rectifie si besoin)

- La tolérance sur le temps est de 20 ou 30 secondes de plus. Si le jury on dit qu'il faut conclure alors il faut le faire. Si on est court de quelques minutes alors le jury vous dirait à la fin de la leçon que vous pouvez disposer de ce temps si vous voulez compléter ou reprendre un point de détail. (Alors il vaut mieux prévoir d'être cours de quelques minutes...)
- Pour énoncer l'expérience, dire expérience de l'université de Tokyo de 1992 suffit, pas besoin de perdre le temps d'énoncer tous les noms des expérimentateurs, qui n'apporte guère d'information ni au jury, ni aux futurs élèves (par contre sur le transparent, cela doit apparaître très clairement). Il faut aussi insister sur le fait que les atomes de néon n'ont pas de vitesse initiale au départ (Alfred l'a dit), c'est la raison pour laquelle on doit utiliser des atomes froids.
- Faire attention à faire différence entre produit tensoriel et produit cartésien.

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.) :

La partie introductive avec la vidéo de Shiizy&Co est une bonne idée

La suite du plan adopté est acceptable, mais sujette à discussion. Il me semble que ce n'est pas la meilleure idée de passer autant de temps sur l'équation de Schrödinger. Ou alors il faut prendre le temps de la discuter/justifier en détail (sans oublier que c'est tout de même un postulat et que les diverses justifications ne sont pas des preuves), sans aller chercher des applications aussi « avancées ».

Je suggèrerais plutôt de discuter (à la place) trois autres choses fondamentales : la représentation impulsion, les inégalités de Heisenberg (version spatiale et approche qualitative seulement), et la conservation locale de la probabilité avec le courant (nécessite l'équation de Schrödinger). Éliminer alors les parties III.B et III.C.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates :

Qu'on le traite ou pas (question de choix et de temps, personnellement je ne ferai pas ce calcul ici) il faut réviser en détail la description de la dispersion pour un paquet d'onde, et dans la leçon il faut énoncer les résultats relatifs à l'élargissement (ne pas se contenter de la vitesse de groupe) en prenant bien les précautions nécessaires détaillées dans les réponse question.

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur) :

On peut montrer la diffraction de électrons par une poudre de graphite, si on comprend assez bien la manip.

Il n'y en a pas vraiment d'autres, mais la vidéo et Shimizu&co permet de développer le côté expérimental sans perdre de temps (et de mettre en évidence l'aspect « dualité onde-corpuscule »).

Bibliographie conseillée :