Titre : ASPECTS ONDULATOIRES DE LA MATIERE, NOTION DE FONCTION D'ONDE

Présentée par : Richard WILD **Rapport écrit par** : Camille MERIDJA

Correcteur : Jean HARE **Date** : 03/02/2020

Bibliographie de la leçon :			
Titre	**Auteurs**	**Éditeur**	**Année**
Mecanique quantique	**Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë**		
Mécanique quantique	**Basdevant, Dalibard**		
Mécanique quantique	**Aslangul**		
Tout en un Dunod PC	**Salamito, Sanz**		

Plan détaillé

Niveau choisi pour la leçon : CPGE
Pré-requis :

- Notion de photon
- Fentes d'Young
- Notions qualitatives sur la transformée de Fourier

Intro : Objectif de la leçon : généraliser la notion de dualité onde-corpuscule pour la matière + décrire une nouvelle formulation de la dynamique de celle-ci

1 minute

I) Onde associée à une particule
A) Historique (sur slides)
-Corps noir : deux lois du rayonnement connue à la fin du XIXème siècle, catastrophe ultraviolette, introduction de h
- 1905 Effet photoélectrique : effets de seuil, idée du quantum d'énergie par Einstein
-1922 Effet Compton : phénomène en faveur de l'interprétation corpusculaire d'Einstein.pour le photon $E = pc = \frac{h\nu}{\lambda}, p = \frac{h}{\backslash lambda}$

- 1923 Contribution de De Broglie : la lumière et à la fois onde et particule,➔généralisation à une onde de matière : $\lambda_{dB} = p = \frac{h}{mv}$
En fait non, son approche était essentiellement relativiste : si il y a une vibration temporelle (Planck Einstein) alors dans un auye référentiel, il doit y avoir une vibration spatialle + lein rzlativiste entre E et p.
Ordre de grandeur pour un e à $v = \frac{c}{100}$, $\lambda_{dB} \sim 0.1$ nm

Vérification expérimentale : 1927, Davison et Germer, diffrection des e- par un cristal de nicjel.

6min30s

B) Confirmation expérimentale : les fentes d'Young
1991 Expérience de Shimizu (video dans les ressources du site)
Analogie avec les fentes d'Young en optique :

$$i = \lambda D / a$$

avec D distance des fentes à l'écran (satisfaisant Fraunhofer) et a écart des fentes.
En fait l'analogie n'est que qualitative, car les atomes sont en chute libre (calcul plus compliqué)
5min

La question que le bon sens classique se pose est « par quelle fente l'atome est-il passé ». Mais il n'est pas possible répondre sans faire disparaître les franges: il faut abandonner la notion de trajectoire et pour cela introduire un nouveauformalisme.

C) Interprétation probabiliste
Onde phase de de Broglie est renommée « fonction d'onde », notée Ψ
Interprétation probabiliste de la fonction d'onde par Max Born :
amplitude de densité de probabilité de présence $dP = |\Psi|^2 \, d\tau$, et normalisation $\int |\Psi|^2 \, d\tau$=1

Retour sur les fentes d'Young : on justifiera dans la deuxième partie que l'on peut écrire la fonction d'onde d'un électron comme la somme de Ψ_1 et Ψ_2 des fonctions d'onde associées au passage par l'une ou l'autre des fentes :

$$|\Psi|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{\Psi_1\Psi_2^* + \Psi_2\Psi_1^*}_{\text{termes d'interférence}}$$

Faire le lien avec la relation de Fresnel en optique (??)
6 min 30s

II) Dynamique des fonctions d'onde
A) Equation de Schrödinger
La fonction d'onde $\Psi(M, (\quad)$d'une particule quantique de masse m interagissant avec ~~son environnement~~ un potentiel extérieur $V(M,t)$ est décrite l'équation Schrödinger, que l'on introduit comme un postulat.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi$$

Propriétés :

- $i \rightarrow \Psi$ est complexe
- linéarité → théorème de superposition (validation de la somme faite pour les fentes d'Young)
- dérivée première en temps → Une seule constante d'intégration : si l'on connaît la fonction d'onde dans tout l'espace à un instant donné on la connaît à tout instant, déterminisme.
- Ressemble à une équation de diffusion, mais en diffère par le i qui assure la réversibilité Réversibilité ? Oui. (« Justification » en faisant t→ -t et en remarquant que l'on obtient l'équation vérifiée par Ψ^* (qui a le même contenu physique que Ψ (??)

5 min 30s

B) Recherche de solution : états stationnaires

Hypothèse : V independant du temps

Etablissement de l'équation de Schrödinger indépendante du temps par séparation des variables :

$$\Psi(x,t) = f(x)g(t) \;\Rightarrow\; -\frac{\hbar^2}{2m\,f}\frac{d^2f}{dx^2} + V = i\hbar\frac{dg}{dt} = \text{Cste} = \text{E}$$

$$\text{D'où } \Psi(x,t) = f(x)\,e^{-iEt/\hbar} \qquad \text{avec } -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}f}{dx^2} + V(x,t)\,f = E\,f$$

Comme la Cste est l'énergie, on identifie le premier terme à l'énergie cinétique et on en déduit $p = -o\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

6 min 20s

C) Particule libre $V = 0 \;\Rightarrow\; -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}f}{dx^2} = E\,f \;\Rightarrow$

Les solutions sont des ondes planes $\backslash Psi(a,t) = A\,e^{\pm ikx - i\omega t}$ avec $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \hbar\omega$

qui donne une de la relation de dispersion, de vitesse de phase $v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$

(commentaire ? vitesse de groupe !)

Problème majeur : $\frac{dP}{d\tau} = |A|^2$ donc non normalisables !

Mais peuvent être utilisées comme base., pour construire un paquet d'ondes

$$\Psi(x,t = \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\,e^{i(kx-\omega t)}\,dk$$

Si centré autour de k_0 , un développement limité de $\omega(k)$ donne

$$\Psi(x,t = e^{i(k_0x-\omega_0t)}\int_{-\infty}^{\infty} g(k)\,e^{i\left(kx-\frac{\hbar k}{m}t\right)}\,dk \quad \textbf{(Très faux)}$$

Introduction non justifiée et non commentée de la vitesse de groupe $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$, vitesse de déplacement de l'enveloppe du paquet d'onde.

A partir des propriétés de la transformée de Fourier, on voit que le paquet d'onde est d'autant plus localisé en x qu'il est étendu en k et inversement

Tentative erronée d'en déduire l'indétermination de Heisenberg $\Delta x.\Delta k \geq \frac{\hbar^2}{2}$

(évidemment c'est $\frac{\hbar}{2}$. Mais l'inégalité de Heisenberg est une propriété non triviale de la transformée de Fourier)

9min 50s

Conclusion : Afin d'expliquer les effets quantiques de la matière il faut abandonner la notion de trajectoire d'une particule localisée pour une description en onde de probabilité. Les effets ondulatoires produisent notamment un spectre énergétique discret pour les états liés d'une particule, et autorisent un effet tunnel sans équivalent classique pour la matière.

Durée totale : 38min30s

Questions posées par l'enseignant

-Quand vous parlez de l'effet photoélectrique vous pouvez préciser ce que vous entendez par « plus énergétique » ?
L'ambiguïté dans le discours était de parler d'un rayonnement plus « énergétique » pour exprimer que l'énergie hbar w était plus élevée, là où ce terme ferait a priori plutôt référence à une intensité plus élevée pour l'auditoire.
-D'où vient l'idée de De Brolgie et sa formule ?
Formalisme quadrivectoriel, si l'on veut pouvoir écrire l'énergie $\hbar\omega$ on doit pouvoir associer au 4-vecteur impulsion un 4-vecteur phase de l'onde de matière (w/c, k)
- p = mv c'est toujours vrai ?
Non, si la particule est relativiste p=γmv et λ=h/ γmv
-Vous avez fait un dessin du cas classique des électrons passant au travers des fentes d'Young, pourquoi votre dessin était idiot ?
Il faut faire apparaître, même dans le cas classique, une zone de recouvrement entre les faisceaux issus des deux fentes de façon à ce qu'ils puissent interférer quand on branche la cohérence.
-Qu'est ce qui se passe si on tente de faire des mesures en sortie de fente ?
On fait disparaitre les interférences dès que la mesure est assez précise pour dire quel trou a été emprunté.
-Vous avez parlé de la richesse du fait que le fonction d'onde soit complexe, précisez. Analogie avec l'acoustique ?
Voir annexe du poly
-Dans la formule des fentes d'Young vous avez parlé de la relation de Fresnel, qu'est-ce que c'est ?
-Vous pouvez « justifier » l'équation de Schrödinger ? Pourquoi p = $-i\hbar$ grad ?
-Pourquoi dire que la particule interagit avec son environnement pour dire qu'il y a un potentiel *V* est une très mauvaise formulation ?
Cela laisse entendre que, par interaction avec l'environnement, on perd notre état quantique pur pour un mélange statistique d'états quantiques bien décrit par le formalisme de l'opérateur densité, il faut simplement dire que la particule est soumise à un potentiel V.
-Vous pouvez réexpliquer votre justification de la réversibilité de Schrödinger ?
-Vous vous êtes emmêlé dans votre développement de w(k), vous pouvez reprendre un peu ?

Commentaires donnés par l'enseignant

Attention à éviter les anachronismes historiques (par exemple parler du postulat de Born avant l'équation de Schrödinger)

Il faut donner des éléments de « justification » de l'équation de Schrödinger, tout en gardant clairement le fait que c'est un postulat

Il faut introduire et justifier la relation p = hbar/i grad, sûrement avant Schrödinger

Il peut être judicieux de présenter le vecteur densité de courant de probabilité

Eviter de passer 1/3 de la leçon sur l'équation de Schrödinger : le titre de la leçon insiste sur la fonction d'onde, pas sur l'équation de Schrödinger

La justification de la réversibilité de l'équation de Schrödinger ne me convainc pas et n'est à mon avis pas attendue.

Faire attention à ne pas trop extrapoler les liens entre l'indétermination de Heisenberg et la transformée de Fourier

Partie réservée au correcteur

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

A mon avis, cette leçon, bien que de bonne facture dans l'ensemble, souffre d'un grave problème de plan, ce qui nuit à la logique de l'ensemble. Il faut assurément différer l'équation de Schrödinger dans la dernière partie de la leçon.

De plus on peut étudier la particule libre, les ondes planes et les paquets d'onde à partir des seules relations $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar$k.

Dans ce cadre on peut introduire
p est représenté par $-i\hbar\, \partial/\partial x$ et E par $+i\hbar\, \partial/\partial t$Ce qui devrait ensuite faire apparaitre l'équation de Schrödinger un peu plus « naturelle »

Ensuite l'inégalité de Heisenberg est une propriété générale de la transformée de Fourier (ou du paquet d'onde) indépendamment de l'équation d'évolution. Notamment il ne faut pas
- la déduire trop imprudemment de la formule (lorsqu'elle est correcte) du paquet d'onde, qui donnerait plutôt une inégalité dans l'autre sens.
- la confondre avec l'étalement du paquet d'onde, qui est commun à tous les problèmes de propagation en milieu dispersif

Pour ce dernier point, on pourrit supposer que le résultat est connu, ou alors il faut de faire bien soigneusement et commenter le fait que la vitesse de phase est bizarre mais que l'on est rassuré avec la vitesse de groupe qui redonne ma vitesse classique $v = p/m$.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Je pense que les éléments essentiels sont présents dans cette leçon, hormis peut-être la représentation impulsion et le courant de probabilité.

Le principal point délicat est l'inégalité de Heisenberg, que l'on peut introduire dans sa généralité et éventuelle établir dans le cas minimal où $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p \rangle = 0$, et à condition que l'on ait montré au préalable que $xp - px = i\hbar$.

Évidemment, si on veut introduire le courant de probabilité, il faut le faire après l'équation de Schrödinger.

Enfin, pour ceux qui sont très à l'aise, on peut - soit monter la façon dont Schrödinger a établi son équation (avec l'équation de d'Alembert), - soit monter que la limite des coutres longueurs d'onde redonne l'équation de Hamilton-Jacobi à des termes en $\hbar$^2 près – soit parler de complémentarité pour aller plus min que le terme parfois équivoque de « dualité onde-corspuscule ».

Expériences possibles (pas au programme de l'agrégation docteur)

Si on ne se contente pas de l'expérience filmée de Shimizu, on peut monter l'expérience de diffraction des électrons par une poudre de graphite.

Bibliographie conseillée

La bibliographie suggérée est la bonne, on pourrait ajouter la lecture (avant l'oral) des cours de Feynman sur le sujet