

Chapitre 11

MECANIQUE ONDULATOIRE

- I. Les ondes de Louis de Broglie**
- II. La diffraction des électrons**
- III. L'équation de Schrödinger**
- IV. Propriétés de la fonction d'onde**
- V. Applications de la mécanique ondulatoire**
- VI. Principe d'incertitude de Heisenberg**

I. Les ondes de Louis de Broglie

En 1924, Louis de Broglie émet l'hypothèse selon laquelle on peut attribuer aux particules matérielles des propriétés analogues à celle d'une onde. Autrement dit, la matière peut également avoir un comportement ondulatoire. De Broglie supposa que la longueur d'onde λ associée à une particule est liée à sa quantité de mouvement $p = m v$ par la relation

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1)$$

où $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ est la constante de Planck. Selon cette hypothèse, on peut associer à la matière une onde appelée « **onde de matière** ».

On remarque que l'équation (1) est également valable pour un photon, car
$$p = E/c = h\nu/c = h/\lambda.$$

Exemples

(a) Considérons un électron, qui, initialement au repos, est accéléré par une différence de potentiel de 54 V. L'énergie cinétique acquise par l'électron de charge e accéléré par la différence de potentiel V équivaut à .

$$\frac{1}{2}mv^2 = eV \Rightarrow v = \sqrt{2eV/m}$$

(a) D'après la relation (1), la longueur d'onde De Broglie est

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{\sqrt{2(9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(54 \text{ V})}} = 0.167 \times 10^{-9} \text{ m} = 0.167 \text{ nm}$$

(b) Pour une balle de pistolet de 10 g ayant une vitesse de 400 m/s , la longueur d'onde De Broglie est

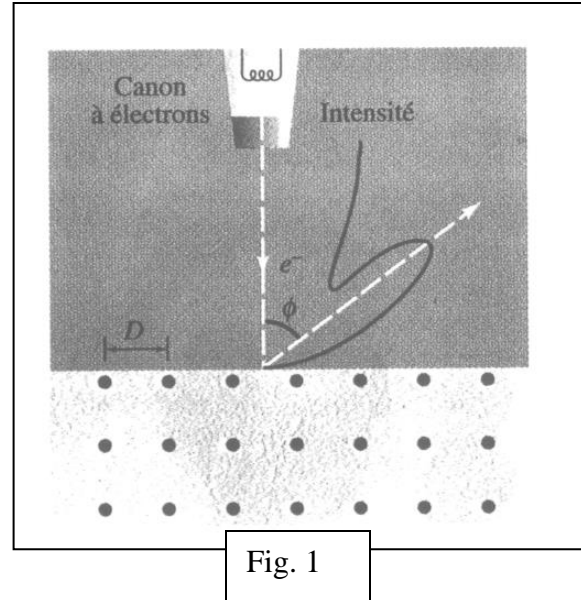
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{(10^{-2} \text{ Kg})(400 \text{ m/s})} = 1.66 \times 10^{-34} \text{ m} !$$

Cette valeur est très inférieure à la dimension d'un noyau unique, qui est voisine de 10^{-14} m . il n'y a donc quasiment aucune chance d'observer un phénomène ondulatoire associé à une longueur aussi petite.

II. La diffraction des électrons

Après l'énoncé de l'hypothèse de Broglie, il est naturel de poser la question suivante : Est-il possible de d'obtenir des phénomènes de nature ondulatoire telle que la diffraction avec particules matérielles ? Pour répondre à cette question, plusieurs expériences furent réalisées. La plus célèbre est celle réalisée en 1926 par Davisson et Germer. Dans cette expérience les particules matérielles sont des électrons, qui sont produits par un filament chauffé, puis accélérés par une différence de potentiel V , et enfin dirigés sur une cible de nickel.

On s'aperçut que les électrons étaient réfléchis principalement dans certaines directions en fonction de leur vitesse. Mais les réflexions observées impliquaient que les électrons avaient interagi avec un réseau d'atomes, tout comme la réflexion des rayons X par des plans atomiques donne une figure de diffraction. Les électrons avaient donc également un comportement ondulatoire !



Remarque : Lorsqu'une particule de masse m et de charge q initialement au repos est accélérée par une différence de potentiel V , son énergie cinétique est donnée par $T = p^2/2m = qV$ (en supposant que le module de sa vitesse est très inférieur à la vitesse de la lumière). Puisque $p = \sqrt{2mqV}$, la relation de Broglie $\lambda = h/p$ prend la forme

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \quad (2)$$

Par exemple, si $V = 150 \text{ Volts}$, la longueur d'onde De Broglie d'un électron est de 0.1 nm environ, ce qui correspond à peu près à l'espace interatomique dans un cristal. En faisant un raisonnement semblable à celui que l'on fait pour les rayons X, on s'aperçoit que les positions angulaires des maxima de diffraction sont données par

$$D \sin \phi = n\lambda \quad (3)$$

où D est la distance séparant les atomes, qui est égale à 0.215 nm dans le cas du nickel. L'un des couples de valeurs expérimentales obtenu était $V = 54$ V et $\phi = 50^\circ$. L'équation (2) prédit $\lambda = 0.167$ nm, alors que l'équation (3) (avec $n = 1$) donne $\lambda = 0.165$ nm. **L'hypothèse de Louis de Broglie** était donc vérifiée de manière concluante !
Toutes les particules élémentaires ont un comportement ondulatoire.

III. L'équation de Schrödinger

Lorsque Erwin Schrödinger entendit parler de l'hypothèse de Broglie, il décida de chercher une équation permettant de décrire ces ondes de matière. Schrödinger s'appuie sur l'équation d'onde classique

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}. \quad (4)$$

La forme d'une onde stationnaire est

$$y(x,t) = \psi(x) \cos(\omega t). \quad (5)$$

En remplaçant y par cette expression dans l'équation d'onde (4), on obtient

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{\omega^2}{v^2} \psi. \quad (6)$$

Nous utilisons la dérivée ordinaire, puisque $\psi(x)$ est fonction uniquement de x . Comme $\omega/v = k = 2\pi/\lambda$ et $p = h/\lambda$, on a

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}. \quad (7)$$

D'après l'expression de l'énergie mécanique d'une particule de masse m plongée dans un potentiel, $E = p^2/2m + U$, ou U est l'énergie potentielle, on voit que $p^2 = 2m(E-U)$. on a donc

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}. \quad (8)$$

L'équation (6) devient ainsi

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (9)$$

Cette équation est l'**équation d'onde de Schrödinger** indépendante du temps à une dimension. La fonction d'onde $\psi(x)$ représente les états *stationnaires* d'un système atomique pour lequel E est constante dans le temps. L'équation d'onde classique donne des modes discrets lorsqu'on applique les *conditions aux limites* :

ψ et $d\psi/dx$ doivent être toutes des fonctions continues.

IV. Propriétés de la fonction d'onde

La fonction d'onde associée à une particule détermine la *probabilité de trouver la particule en une région donnée de l'espace*. Le carré de la fonction d'onde indique la probabilité par unité de volume de trouver une particule.

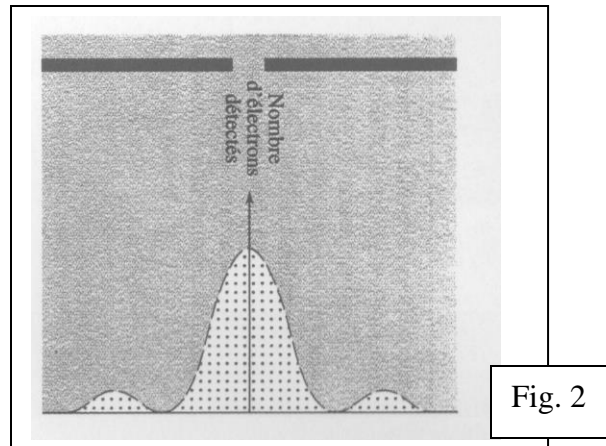
$$|\psi|^2 d\tau = \text{probabilité de trouver la particule à l'intérieur d'un volume } d\tau$$

la grandeur $|\psi|^2$ est appelée **densité de probabilité**. En une dimension, $|\psi|^2 dx$ est proportionnelle à la probabilité de trouver la particule à l'intérieur de l'intervalle compris entre x et $x + dx$. Nous avons plus ou moins de chances d'observer la particule selon que $|\psi|^2$ est grande ou petite à un point donné. La fonction d'onde représente donc une *onde de probabilité* abstraite. Puisque la particule doit se trouver quelque part, la somme de toutes les probabilités sur l'axe des x doit être égale à 1 :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

Une **fonction d'onde** qui satisfait cette condition est dite *normalisée*.

On peut illustrer l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde à l'aide d'une expérience simple dans laquelle un faisceau d'électrons passe par une seule fente (figure 10.7). Le faisceau est si faible qu'un seul électron à la fois passe par la fente. Des détecteurs nombreux et très rapprochés enregistrent exactement où va chaque électron. (Cela équivaut à compter le nombre d'électrons arrivant en chaque point dans un intervalle de temps donné.) La grandeur $|\psi|^2$ nous indique quelle fraction du nombre total est enregistrée à la position x . La figure obtenue paraît initialement aléatoire, mais, lorsque le nombre atteint plusieurs milliers, on observe la figure de diffraction produite par une fente simple, ce qui constitue une confirmation éclatante de du caractère ondulatoire des particules matérielles.



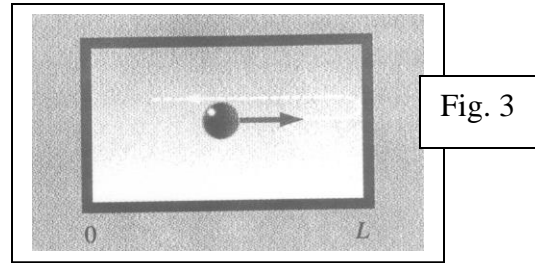
La physique classique et la relativité restreinte partent du principe du *déterminisme* : connaissant la position initiale et la vitesse d'une particule ainsi que toutes les forces agissant sur elle, on peut prédire avec précision quelle sera sa trajectoire. La position exacte de la particule peut être déterminée, du moins en théorie. L'interprétation statistique de la fonction d'onde nous dit qu'en Mécanique ondulatoire, on ne peut

prédire que la *probabilité* d'observer une particule à une position donnée. Il n'est plus possible de prédire exactement où elle sera détectée. La mécanique ondulatoire prédit correctement les valeurs *moyennes* de grandeurs physiques mais pas les résultats des mesures individuelles.

V. Applications de la mécanique ondulatoire

V.1. Particule enfermée dans une boîte

Nous allons voir maintenant comment appliquer ces nouvelles idées au cas d'une particule de masse m qui rebondit d'un côté à l'autre d'une boîte à une dimension de côté L (fig. 3). On suppose que la boîte est impénétrable: l'énergie potentielle est nulle à l'intérieur de la boîte et infinie sur les parois. Cet exemple est quelque peu artificiel, mais il permet d'illustrer quelques idées importantes. Il constitue un premier pas vers la résolution de certains problèmes comme le mouvement d'un électron de conduction dans un métal ou d'un proton emprisonné dans un noyau.



En physique classique, la probabilité de trouver la particule est la même n'importe où entre $x = 0$ et $x = L$. En mécanique ondulatoire, on doit lui attribuer une fonction d'onde. Puisque la particule ne peut pas traverser les parois, $\psi = 0$ pour $x < 0$ et $x > L$. La condition de continuité de la fonction d'onde donne la condition aux limites :

$$\psi = 0 \text{ pour } x = 0 \text{ et } x = L$$

Avec $U = 0$ à l'intérieur de la boîte, l'équation d'onde de Schrödinger devient

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (10)$$

où $k = \sqrt{2mE} / \hbar$. La solution de cette équation est $\psi(x) = A \sin(kx + \phi)$.

D'après la condition aux limites $\psi = 0$ pour $x = 0$, il s'ensuit que $\phi = 0$.

D'après la condition selon laquelle $\psi = 0$ pour $x = L$, on trouve $\sin(kL) = 0$, ce qui signifie que

$$kL = n\pi, \text{ où } n \text{ est un entier.}$$

Ainsi, la fonction d'onde qui vérifie les conditions aux limites a la forme d'une onde stationnaire:

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (11)$$

Puisque $k = 2\pi / \lambda = n\pi / L$, la longueur d'onde de la n^{ième} onde stationnaire est

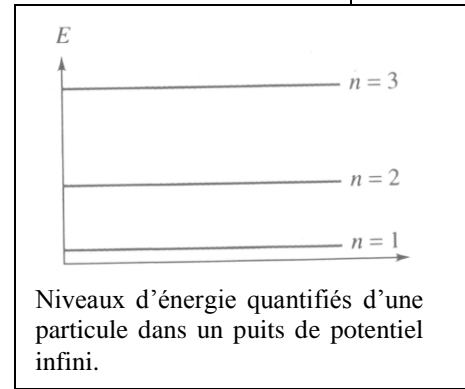
$$\lambda = 2L / n \quad (12)$$

En égalant cette expression à l'équation de Broglie, $\lambda = h / (mv)$, on trouve $v = nh / (2mL)$. **Puisque n ne prend que des valeurs entières, la vitesse est quantifiée. L'énergie de la particule**, qui est purement cinétique, est $mv^2/2$, et **est donc également quantifiée:**

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

Fig. 4

Les conditions aux limites donnent lieu à un ensemble de niveaux d'énergie quantifiée qui sont décrits à la figure 4. On remarque que la particule ne peut pas avoir une énergie nulle. La valeur la plus basse, qui correspond à $n = 1$, est l'énergie du niveau fondamental. Elle est présente pour toute particule confinée dans une région de l'espace et existe même à 0 K, ce qui marque un contraste frappant avec la notion classique selon laquelle tout doit être au repos au zéro absolu.



Les fonctions d'ondes pour les premiers niveaux sont représentées dans les figures 5(a). Les densités de probabilité, qui sont représentées dans les figures 5(b), sont nulles en certains points: la particule ne peut jamais être se trouver en ces points.

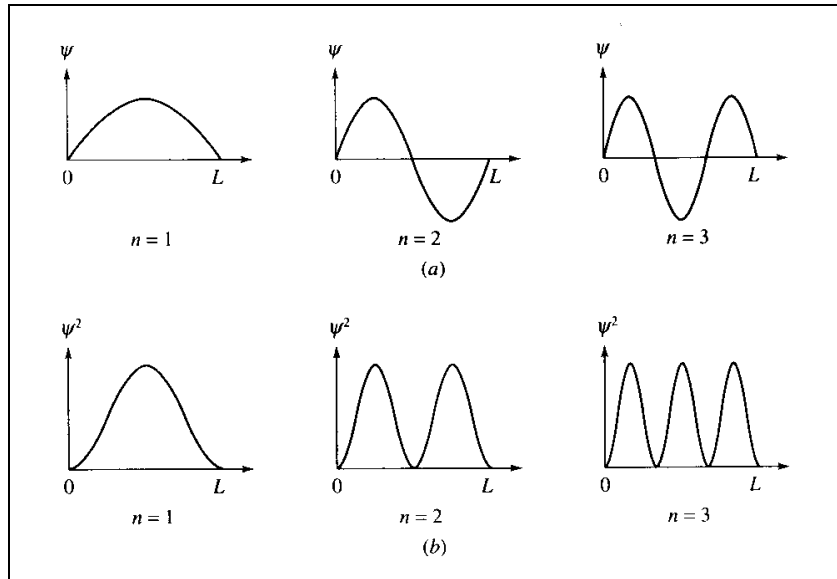


Fig. 5

Exercice 1

Un électron est enfermé dans un puits de potentiel infini de longueur 0,1 nm. (a) Quels sont les trois premiers niveaux d'énergie? (b) Quelle est la longueur d'onde du photon émis lors de la transition de l'électron du niveau $n = 2$ à l'état fondamental?

Solution:

(a) D'après l'équation (13), les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = \frac{n^2 (6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{(8 \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg})(10^{-10} \text{ m})^2} = n^2 (6.03 \times 10^{-18}) \text{ J} = 37.7 n^2 \text{ eV}$$

Les trois premiers niveaux d'énergie sont donc $E_1 = 37,7 \text{ eV}$, $E_2 = 151 \text{ eV}$ et $E_3 = 339 \text{ eV}$.

(b) $hf = hc / \lambda = \Delta E = (151 - 37.7) \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$. On trouve $\lambda = 11 \text{ nm}$.

Exercice 2

Soit un grain de poussière de 10^{-7} kg enfermée dans une boîte de 1 cm.

(a) Quelle est la vitesse minimale possible?

(b) Quel est le nombre quantique n si la vitesse de cette particule a pour module 10^{-3} mm/s ?

Solution:

(a) D'après l'équation (13), l'énergie minimale permise est E_1 . Donc, $mv^2/2 = h^2/(8mL^2)$ d'où l'on tire

$$v = \frac{h}{2mL} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{2 \times 10^{-7} \text{ Kg} \times 10^{-2} \text{ m}} = 3.32 \times 10^{-25} \text{ m/s}$$

Cette vitesse est si faible qu'on peut considérer que le grain de poussière est essentiellement au repos, même au niveau fondamental, ce qui concorde avec les prévisions classiques.

(b) Pour trouver le nombre quantique n , on écrit que l'énergie cinétique est égale à E_n :

$$mv^2/2 = n^2 h^2 / (8mL^2)$$

Lorsqu'on remplace v par 10^{-6} m/s , on trouve $n \approx 10^{18}$. La quantification de l'énergie des transitions de n à $n \pm 1$ n'est pas observable à l'échelle macroscopique. De plus, la fonction d'onde subit de nombreuses oscillations entre $x = 0$ et $x = L$. Les pics et les creux de la fonction de probabilité sont si rapprochés que la probabilité devient uniforme. Cela correspond au résultat classique.

V.2. Puits de potentiel fini

Considérons maintenant une particule à l'intérieur d'un puits de potentiel de profondeur finie U qui s'étend de $x = 0$ à $x = L$. On donne $U=0$ au fond du puits [Fig. 5(a)]. En mécanique classique, si l'énergie de la particule est inférieure à U (c'est-à-dire si $E < U$), la particule ne peut pas pénétrer dans les régions où $x < 0$ et $x > L$. Toutefois, en mécanique quantique, la fonction d'onde ne disparaît pas à l'extérieur des parois du puits.

- Dans la région II, où $U = 0$, l'équation d'onde de Schrödinger s'écrit

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (14)$$

où $k = \sqrt{2mE} / \hbar$. La solution de cette équation est peut se mettre sous la forme suivante

$$\psi_{II}(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx) \quad (15).$$

Mais ψ n'est pas nulle en $x = 0$ et en $x = L$.

- Dans les régions extérieures au puits, $U > E$, et l'équation d'onde peut donc s'écrire sous la forme

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = K^2\psi \quad (16)$$

où $k = \sqrt{2m(U - E)} / \hbar$. La solution générale de cette équation est

$$\psi(x) = A \exp(Kx) + B \exp(-Kx) \quad (17)$$

Dans la région III, ψ doit tendre vers zéro lorsque $x \rightarrow \infty$, et la fonction correspondante s'écrit donc

$$\psi_{III}(x) = B \exp(-Kx) \quad (18)$$

Dans la région I, ψ doit tendre vers zéro lorsque $x \rightarrow -\infty$, et la fonction prend la forme

$$\psi_I(x) = A \exp(Kx) \quad (19)$$

Fig. 6

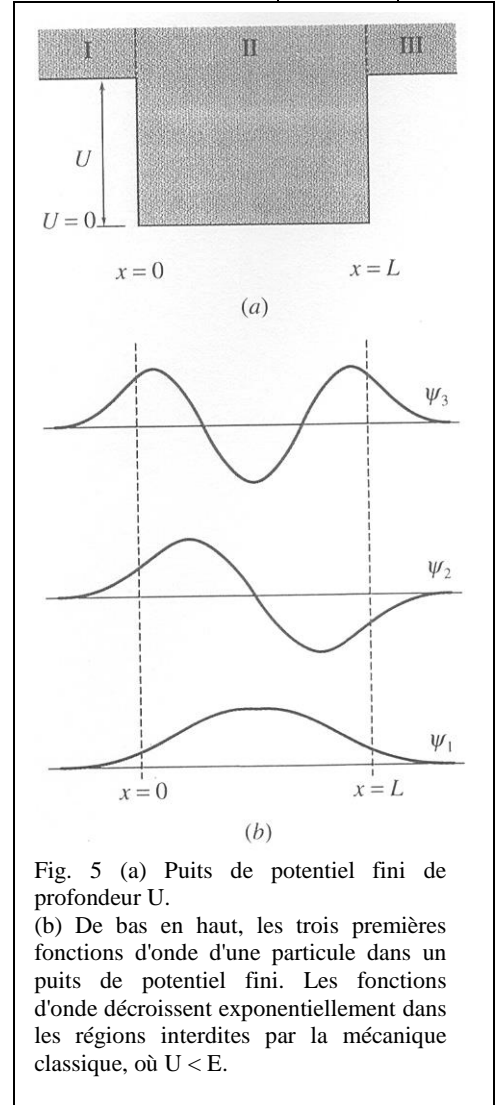


Fig. 5 (a) Puits de potentiel fini de profondeur U .

(b) De bas en haut, les trois premières fonctions d'onde d'une particule dans un puits de potentiel fini. Les fonctions d'onde décroissent exponentiellement dans les régions interdites par la mécanique classique, où $U < E$.

Pour compléter la solution, il faut faire coïncider les fonctions à l'intérieur du puits avec les fonctions à l'extérieur. Autrement dit, nous devons vérifier les conditions aux limites. Par exemple,

$$\text{En } x = 0: \quad \psi_I = \psi_{II} \quad \text{et} \quad \frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \quad (20a)$$

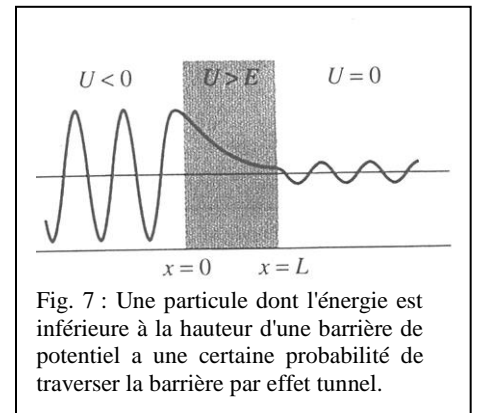
$$\text{En } x = L: \quad \psi_{II} = \psi_{III} \quad \text{et} \quad \frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \quad (20b)$$

Diverses fonctions d'onde sont représentées à la figure 6(b).

Remarque : *Le fait que les fonctions d'onde ne soient pas nulles à l'extérieur du puits signifie qu'il existe une probabilité finie de trouver la particule à l'extérieur du puits, dans la région interdite par la physique classique. Ce résultat surprenant se manifeste dans l'effet tunnel, phénomène que nous examinons ci-dessous.*

V.3. Traversée d'une barrière, effet tunnel

Examinons ce qui se passe lorsqu'une particule d'énergie E rencontre une barrière d'énergie potentielle de hauteur U ($> E$) comme à la figure 7. La fonction d'onde de la particule est sinusoïdale dans la région où $U=0$. En physique classique, la particule serait réfléchiée. Mais, comme nous l'avons vu dans le cas d'un puits de potentiel fini, en mécanique ondulatoire, la fonction d'onde de la particule décroît exponentiellement à l'intérieur de la barrière de potentiel. Si l'épaisseur de la barrière n'est pas trop grande, la fonction d'onde décroissante peut avoir encore une valeur supérieure à zéro de l'autre côté. Dans ce cas, il reste une fonction d'onde sinusoïdale de faible amplitude. Cela signifie qu'il existe une probabilité, petite mais finie, que la particule traverse la barrière par **effet tunnel**! Ce phénomène est observé dans la diode à effet tunnel, dans l'émission de particules α par des noyaux radioactifs et dans les jonctions supraconductrices de Josephson. Il est également utilisé dans le microscope électronique à effet tunnel.



VI. Le principe d'incertitude de Heisenberg

Le fait que les particules de matière aient des caractéristiques ondulatoires modifie fondamentalement notre façon de décrire leurs propriétés physiques. Des grandeurs physiques aussi simples que la position et la quantité de mouvement se retrouvent liées entre elles d'une façon étonnante. Nous avons vu que chaque particule possède une onde associée. D'après l'équation $\lambda = h/p$, pour connaître la valeur de la quantité de mouvement de la particule avec précision, il faut déterminer la longueur d'onde de son

onde associée avec précision. Or, pour calculer la longueur d'onde avec précision, il faut que l'onde soit définie et observable sur plusieurs cycles [Fig. 8(a)]. Dans ce cas, le fait même d'avoir une onde étendue dans l'espace fait en sorte que la position de la particule décrite par cette onde devient incertaine. Par ailleurs, il existe une façon de contraindre une onde à n'occuper que très peu d'espace afin de former ce qu'on nomme un paquet d'ondes. Un tel paquet s'obtient en superposant un très grand nombre d'ondes possédant chacune une longueur d'onde différente de l'autre [Fig. 8(b)]. Si ce paquet correspond à une particule de matière, il est assez facile de déterminer la position de la particule. Malheureusement, dans ce cas, on ne connaît plus la longueur d'onde de la particule (et donc sa quantité de mouvement), puisque le paquet est caractérisé par une multitude de longueurs d'ondes. Selon le principe d'incertitude de Heisenberg, les incertitudes sur la position et la quantité de mouvement sont liées par la relation

$$\Delta x \Delta p \geq h \quad (21)$$

Il est impossible de connaître simultanément la position d'une particule et sa quantité de mouvement avec une précision arbitrairement grande.

Cette impossibilité n'a rien à voir avec les conditions expérimentales ou la précision de l'équipement utilisé; il s'agit d'une restriction fondamentale imposée par la nature. Pour un paquet d'ondes, la relation d'incertitude est une propriété intrinsèque qui ne dépend pas de l'appareil de mesure utilisé. La relation d'incertitude peut être obtenue d'une autre façon. Dans la diffraction des électrons par une fente simple (figure 9), on sait que la position du premier minimum est donnée par

$$\sin \theta = \lambda / a = \lambda / \Delta y \quad (22)$$

Au passage de l'onde de l'électron à travers la fente, l'incertitude sur la position latérale correspond à la largeur Δy de la fente. L'incertitude sur la quantité de mouvement dans la direction y doit être au moins égale à $p \sin \theta$, où θ correspond au premier

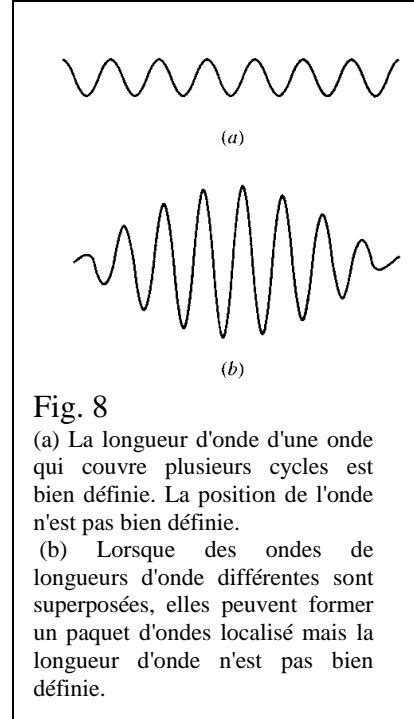


Fig. 8

(a) La longueur d'onde d'une onde qui couvre plusieurs cycles est bien définie. La position de l'onde n'est pas bien définie.

(b) Lorsque des ondes de longueurs d'onde différentes sont superposées, elles peuvent former un paquet d'ondes localisé mais la longueur d'onde n'est pas bien définie.

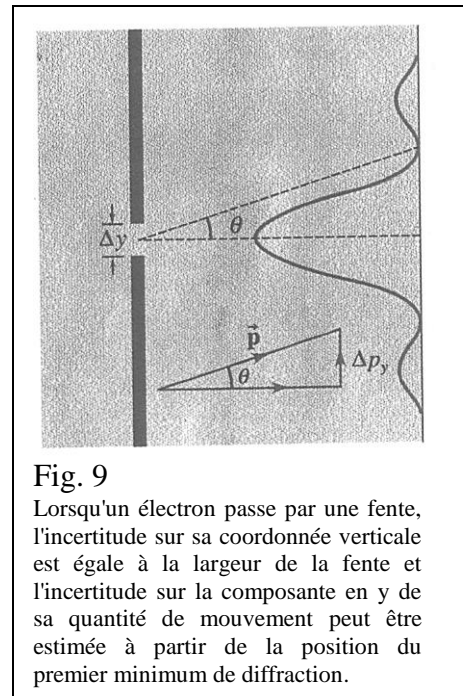


Fig. 9

Lorsqu'un électron passe par une fente, l'incertitude sur sa coordonnée verticale est égale à la largeur de la fente et l'incertitude sur la composante en y de sa quantité de mouvement peut être estimée à partir de la position du premier minimum de diffraction.

minimum. On peut dire que $\Delta p_y > p \sin \theta$. En combinant cette inéquation avec $p = h/\lambda$, on obtient $\Delta x \Delta p > h$. Une fente plus fine permet de déterminer la position de la particule avec une plus grande précision mais donne une figure de diffraction plus large, c'est-à-dire une incertitude plus grande sur la quantité de mouvement transversale.

Exercice

Quelle est l'incertitude minimale sur la position de chacune des particules suivantes si le module de la vitesse est mesuré avec une incertitude de 0,1 % (a) Un électron se déplaçant à la vitesse de 4×10^6 m/s. (b) Une balle de pistolet de 10 g se déplaçant à 400 m/s.

Solution:

(a) L'incertitude sur la quantité de mouvement est

$$\Delta p = m\Delta v = (9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg})(4 \times 10^3 \text{ m/s}) = 3.64 \times 10^{-27} \text{ kg.m/s}$$

D'après la relation d'incertitude de Heisenberg, l'incertitude sur la position est

$$\Delta x \geq \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}}{3.64 \times 10^{-27} \text{ Kg.m/s}} = 0.182 \mu\text{m}$$

(b) Dans ce cas, $\Delta p = m\Delta v = (0.01 \text{ Kg})(0.4 \text{ m/s}) = 4 \times 10^{-3} \text{ kg.m/s}$. L'incertitude sur la position est $\Delta x \geq h/\Delta p = 1.66 \times 10^{-31} \text{ m}$. Cette valeur est inférieure au diamètre du proton. Le principe d'incertitude n'impose pas de limite pratique sur la détermination de la position de la balle.