

IV – INTRODUCTION AU MONDE QUANTIQUE

Dans ce chapitre, on va étudier :

Un peu de physique moderne et voir les limites de la physique classique.

La mécanique quantique a été élaborée dans la première moitié du XX^{ème} siècle par de nombreux physiciens dont N. Bohr, L. de Broglie, P. Dirac, A. Einstein, W.K. Heisenberg, M. Planck et E. Schrödinger. Cette théorie est nécessaire pour décrire la matière à l'échelle atomique et au-dessous. Ses prédictions n'ont, à l'heure actuelle, jamais été mises en défaut. Elles ont permis la réalisation d'inventions aussi importantes que le laser, le microprocesseur, l'horloge atomique, l'imagerie médicale par résonance magnétique nucléaire...

Les phénomènes quantiques qui apparaissent à l'échelle microscopique sont parfois difficiles à appréhender car ils ne correspondent pas à notre intuition naturelle fondée sur notre expérience du monde macroscopique. À la base de leur compréhension se trouve l'idée de dualité onde-particule et la notion d'onde de matière. Il en découle l'inégalité de Heisenberg et la quantification de l'énergie.

I – La dualité onde-particule de la lumière

I-1) Introduction

On a présenté dans les chapitres précédents l'onde lumineuse et les phénomènes d'interférences et de diffraction. Ces phénomènes caractéristiques des ondes ont été étudiés au XIXème siècle. Ils montrent l'aspect ondulatoire de la lumière.

D'autre part, des phénomènes découverts au XXème siècle ne peuvent être interprétés que si l'on admet l'existence de « particules de lumière », que l'on appelle les photons. La lumière a aussi un aspect corpusculaire.

Ce double comportement est appelé dualité onde-particule. Il est impossible à théoriser dans le cadre de la mécanique classique, mais trouve son interprétation dans le cadre la mécanique quantique.

I-2) Approche documentaire : Historique de la découverte du photon

a) Le rayonnement thermique

En 1900, pour réussir à expliquer les propriétés de l'émission thermique du rayonnement électromagnétique d'un corps chauffé (ce rayonnement est pour l'essentiel dans le domaine infrarouge), Max Planck utilisa l'hypothèse que l'énergie s'échange entre la matière et le rayonnement par multiples d'une valeur minimale, le quantum d'énergie, dont l'expression est :

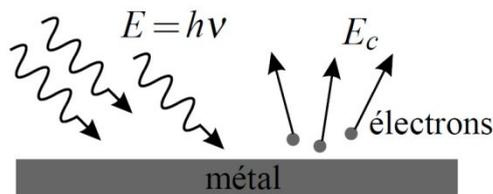
$$E = h\nu$$

où ν est la fréquence du rayonnement et h une constante. Cette constante appelée *Hilfskonstante* par Planck, soit en français constante auxiliaire, est devenue depuis l'une des constantes fondamentales de la physique. Sa valeur actuellement admise est:

$$h = 6,636176 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

b) L'effet photoélectrique

L'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par un métal lorsqu'il est éclairé par un rayonnement du domaine visible ou ultraviolet. **Le phénomène n'existe que si la fréquence du rayonnement est supérieure à une fréquence seuil ν_s qui dépend de la nature du métal.** Si la fréquence est plus petite que ν_s il n'y a pas d'effet photoélectrique, même si le faisceau est très intense.



Effet photoélectrique. Chaque électron de masse m_e et vitesse v_e emporte une énergie cinétique : $E_c \leq h\nu - W$.

En 1905, Albert Einstein proposa une interprétation théorique de l'effet photoélectrique en reprenant l'idée de Planck. Il supposa que le rayonnement lui-même est constitué

de « quanta de lumière », sortes de grains de lumière contenant l'énergie $E = h\nu$.

L'hypothèse de base de la théorie d'Einstein est qu'un électron du métal peut absorber un seul quantum de lumière. Il est alors arraché au métal si l'énergie $E = h\nu$ est supérieure à une valeur minimale dépendant du métal et appelée travail d'extraction W . La condition $E > W$ se traduit par :

$$\nu > \nu_s = \frac{W}{h}$$

La théorie d'Einstein explique ainsi l'existence de la fréquence seuil. De plus elle prédit que l'énergie cinétique maximale emportée par l'électron est :

$$E_{c,max} = E - W = h(\nu - \nu_s).$$

Des expériences, menées par Robert Andrews Millikan entre 1905 et 1915, confirmèrent cette formule et donnèrent une valeur de la constante de Planck en bon accord avec la valeur provenant des expériences sur le rayonnement thermique. Einstein reçut le prix Nobel de physique pour son travail sur l'effet photoélectrique en 1922.

c) La diffusion Compton

Le phénomène qui finit de convaincre la communauté scientifique de l'existence de particules associées au rayonnement électromagnétique est la diffusion Compton découverte par Arthur Compton en 1922.

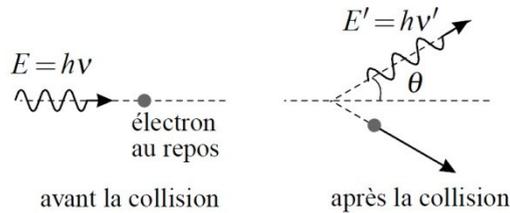
La diffusion d'un rayonnement est le phénomène selon lequel un échantillon de matière, recevant un rayonnement incident, renvoie dans tout l'espace un rayonnement de même nature appelé onde diffusée.

Classiquement on explique la diffusion des ondes électromagnétiques par le fait que les électrons contenus dans la matière sont mis en mouvement sous l'action du champ électromagnétique de l'onde incidente. L'onde diffusée est créée par les électrons en mouvement qui oscillent à la fréquence de l'onde incidente. L'onde diffusée a donc la même fréquence que l'onde incidente (parce que les équations de l'électromagnétisme et de la mécanique sont aussi linéaires).

En envoyant des rayons X de longueur d'onde $\lambda=0,071\text{nm}$ sur une cible de carbone, A. Compton observa un rayonnement diffusé de longueur d'onde différente de la longueur d'onde incidente, en contradiction avec la théorie classique. Il put interpréter les résultats expérimentaux en faisant hypothèse d'une collision entre les électrons contenus dans l'échantillon et des particules arrivant avec le rayonnement, particules dotées :

- De l'énergie $E=h\nu$
- De la quantité de mouvement : $p = h \frac{\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

Au cours de cette collision la particule du rayonnement perd une partie de son énergie, ce qui explique qu'elle reparte avec une énergie $E' < E$, donc une fréquence $\nu' < \nu$ et une longueur d'onde $\lambda' > \lambda$. Le calcul fondé sur les lois de la mécanique relativiste donne des résultats quantitatifs en parfait accord avec l'expérience.



Effet Compton : collision entre un photon et un électron. Le calcul relativiste donne : $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$ où m_e est la masse de l'électron.

Quelques questions sur l'effet photoélectrique :

Pour le sodium, le travail d'extraction vaut $W=2,2\text{eV}$

- Quelle est la fréquence seuil pour l'effet photoélectrique
- En déduire la longueur d'onde seuil de l'onde électromagnétique. Quel est le domaine spectral correspondant ?
- Une plaque de sodium est éclairée par un rayonnement UV. L'effet photoélectrique a-t-il lieu ?
 - Soit $\nu_s = \frac{W}{h} = 5,310^{14}\text{Hz}$
 - $\lambda = \frac{c}{\nu} = 560\text{nm}$ on est dans le jaune-vert
 - Les photons correspondant à l'UV sont plus énergétiques que ceux du visible. L'effet photoélectrique a bien lieu. L'excédent d'énergie est communiqué à l'électron sous forme d'énergie cinétique.

I-3) Le photon

a) Définition

La particule associée à la lumière s'appelle le photon. Ses propriétés sont les suivantes :

- Le photon a une masse nulle.
- Le photon se déplace à la vitesse de la lumière, égale à $c=3,00.10^8$ ms^{-1} dans le vide.
- Le photon associé à une lumière de fréquence ν et de longueur d'onde $\lambda = \frac{c}{\nu}$ possède l'énergie : $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$
où $h=6,62.10^{-34}$ Js est la constante de Planck.
- Le photon associé à une lumière de fréquence ν se propageant dans la direction du vecteur unitaire \vec{u} possède la quantité de mouvement : $\vec{p} = \frac{E}{c}\vec{u} = \frac{hc}{\lambda}\vec{u} = \frac{h}{\lambda}\vec{u}$

b) Ordre de grandeur de l'énergie d'un photon

L'énergie du photon correspondant à une lumière de longueur d'onde $\lambda = 633$ nm est :

$$E = \frac{6,62.10^{-34} * 3.10^8}{633.10^{-9}} \sim 3,1.10^{-19} \text{ J}$$

On constate que le joule n'est pas une unité adaptée pour exprimer cette énergie. Il est courant d'exprimer l'énergie du photon en électronvolt :

$$1\text{eV} = 1,6.10^{-19}\text{J} \Rightarrow E = 2,0\text{eV}$$

c) Nombre de photons

Dans les expériences d'optique, l'aspect granulaire de la lumière n'apparaît généralement pas. L'explication est que ces expériences mettent en jeu un très grand nombre de photons à la seconde.

On peut calculer, par exemple, le nombre de photons émis chaque seconde par un laser hélium-néon de longueur d'onde $\lambda = 633 \text{ nm}$ et de puissance $P = 1,0 \text{ mW}$. En $\Delta t = 1 \text{ s}$, l'énergie lumineuse délivrée par le laser est $E_{\text{laser}} = P\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ J}$. L'énergie d'un photon est :

$$E = \frac{hc}{\lambda} = 3,1 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Le nombre de photons est donc :

$$N = \frac{E_{\text{laser}}}{E} = 3,2 \cdot 10^{15}$$

C'est un nombre élevé mais, à titre de comparaison, bien plus petit que le nombre d'Avogadro qui est l'ordre de grandeur du nombre d'atomes ou de molécules dans une expérience de chimie.

Pour voir les photons un à un, on peut imaginer réduire la puissance du faisceau. En réduisant d'un facteur 10^9 la puissance, on obtient $3,2 \cdot 10^6$ photons par seconde, soit un photon toutes les $0,31 \cdot 10^{-6} \text{ s}$ en moyenne. Avec un détecteur de résolution temporelle de l'ordre de 10^{-7} s , on peut espérer recevoir des photons un à un.

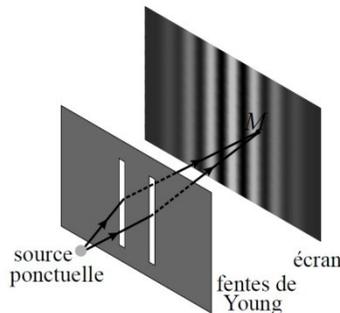
En fait ce système simple ne fonctionne pas correctement : à cause du caractère aléatoire de l'émission du laser, les photons sont émis irrégulièrement et plusieurs photons peuvent être détectés en même temps.

On sait cependant produire des photons un à un avec des systèmes beaucoup plus élaborés appelés **sources de photons uniques**. Avec de telles sources on réalise des expériences qui illustrent remarquablement le double aspect, corpusculaire et ondulatoire, de la lumière.

I-4) Franges d'interférences et photons

a) Aspect ondulatoire

Une source ponctuelle, quasiment monochromatique, éclaire un écran opaque percé de deux fentes rectilignes identiques, très fines, derrière lesquelles on place un écran parallèle au plan des fentes. Sur l'écran on observe des **franges rectilignes** parallèles aux fentes.



Principe de l'expérience des fentes de Young.

L'explication qualitative du phénomène est la suivante : en tout point M de l'écran parviennent deux ondes qui sont diffractées par les deux fentes de Young. Les longueurs des deux rayons lumineux entre la source et M sont différentes, donc les deux ondes sont décalées dans le temps ce qui se traduit par un déphasage qui dépend de la position de M sur l'écran.

On observe ainsi des franges brillantes, au centre desquelles le déphasage est un multiple de 2π (condition d'interférence constructive) et des franges sombres au centre desquelles le déphasage est un multiple impair de π (condition d'interférence destructive).

b) Aspect corpusculaire

L'interprétation en termes d'onde est assez simple : suivant le déphasage des deux ondes se superposant, on observe des interférences constructives ou destructives, ce qui explique les zones claires et obscures de l'écran.

Imaginons que l'on réduise très fortement l'intensité lumineuse de la source éclairant les fentes jusqu'à ce qu'elle émette des photons séparément, l'un après l'autre. Alors, ces mêmes photons viennent aussi frapper l'écran l'un après l'autre. On se demande alors comment se forme la figure d'interférence. L'expérience peut être réalisée et les résultats sont indiqués sur la figure où les impacts des photons ont été matérialisés pour successivement $N = 50$, $N = 200$ et $N = 1\,500$ photons. Le résultat est très simple à comprendre : les photons ne viennent que très rarement heurter l'écran aux endroits où des franges sombres sont observées, alors que la probabilité qu'un photon arrive au niveau d'une frange claire est maximale.



On s'aperçoit dans cette expérience que la mécanique quantique est de nature probabiliste : il est impossible de savoir dans cette expérience quelle zone de l'écran sera précisément atteinte par le photon, mais on peut connaître la probabilité correspondante.

Maintenant que l'on a compris que les photons viennent frapper l'écran un à un et que la superposition des impacts successifs forme la figure d'interférence, il est nécessaire de se poser à nouveau la question de l'interprétation de l'expérience. En effet, chaque photon émis par la source lumineuse passe au travers des fentes puis atteint l'écran. Il est délicat de concevoir pourquoi certaines zones de l'écran ne sont quasiment jamais atteintes. L'explication, bien qu'étrange et contraire à l'intuition usuelle, est la suivante. Chaque photon passe simultanément par les deux fentes et d'une manière ondulatoire, chaque chemin contribue avec une certaine phase, de la même manière que l'interprétation classique ondulatoire. Évidemment, le fait que le photon passe à la fois par les deux fentes est difficile à concevoir par rapport à notre expérience quotidienne. Il est possible de mettre en doute cette interprétation et se dire que chaque photon passe forcément par une fente donnée. Dans cet état d'esprit, on peut essayer d'adjoindre à l'expérience des trous

d'Young un dispositif permettant de savoir par quelle fente le photon est passé. Si on procède de cette manière, on constate effectivement par quelle fente chaque photon passe, cependant, les interférences disparaissent... Ainsi, mesurer par quelle fente est passé chaque photon détruit le phénomène d'interférences. **Le fait que chaque photon passe simultanément par les deux fentes est fondamental pour l'observation d'interférences.**

c) Conclusion

La lumière présente un double aspect corpusculaire et ondulatoire, tous les deux perceptibles dans les expériences d'interférences lumineuses avec peu de photons. Les photons sont détectés de manière aléatoire. La probabilité de détecter un photon en un point est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde lumineuse en ce point.

II – La dualité onde-particule de la matière

II-1) Longueur d'onde de De Broglie

Comme on l'a vu précédemment, les ondes lumineuses peuvent présenter un comportement de type corpusculaire. En fait, la situation est plus générale, il s'agit du principe de dualité onde-corpuscule énoncé par le Français Louis de Broglie en 1924. Il s'agit d'une généralisation de l'interprétation d'Einstein : **toute particule (et pas seulement les photons) peut présenter un caractère ondulatoire.** Ainsi, à une particule de quantité de

mouvement \vec{p} est associée une onde progressive de longueur d'onde λ vérifiant la relation de De Broglie :

$$\lambda_B = \frac{h}{p}$$

La relation de De Broglie peut aussi s'exprimer sous la forme :

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{u} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u} = \hbar \vec{k}$$

Où :

- \vec{p} est la quantité de mouvement de la particule
- \vec{k} le vecteur d'onde de l'onde associée.
- \hbar est la constante de Planck réduite : $\hbar = 1,0 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

La direction de la quantité de mouvement de la particule correspond à la direction de propagation de l'onde associée.

Il est donc possible de réaliser des expériences ondulatoires, telles que la diffraction ou les interférences non seulement avec des photons, mais aussi avec des électrons, des neutrons, des atomes...

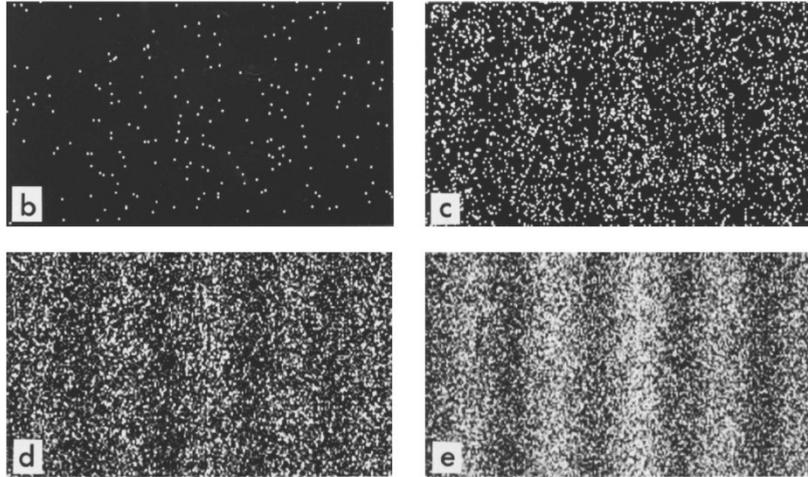
II-2) Approche documentaire : Franges d'interférences et matière

a) Interférences d'électrons

La figure suivante montre le résultat d'une expérience d'interférences d'électrons réalisée en 1989 par les chercheurs japonais A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki et H. Ezawa.

Il s'agit d'une expérience analogue à l'expérience des fentes de Young. Les électrons, après leurs passages à travers les « fentes »,

tombent sur un film fluorescent jouant le rôle d'« écran ». Chaque électron arrivant sur le film provoque l'émission d'environ 500 photons, collectés par un dispositif d'imagerie.



Construction progressive d'une figure d'interférences d'électrons. Chaque point lumineux correspond à l'arrivée d'un électron. Nombres d'électrons respectifs sur les images (b), (c), (d) et (e) : 100, 3000, 20000 et 70000.

Sur le document présenté sur la figure 6.9 chaque point lumineux témoigne de l'arrivée d'un électron. Dans cette expérience les électrons arrivent un à un sur le détecteur. En effet, le flux d'électrons à travers l'appareil est maintenu à une valeur très faible, de l'ordre de 10^3 électrons par seconde.

L'observation du document appelle les remarques suivantes :

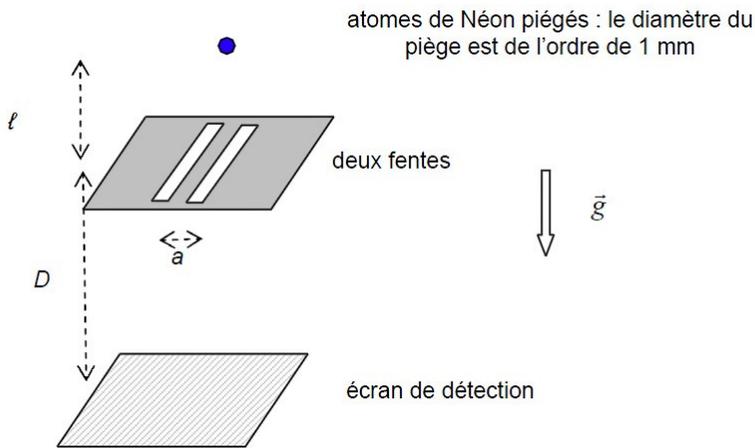
- Les électrons ne se comportent pas comme on s'y attendrait d'après les lois de la mécanique classique : pour des conditions initiales données on trouve une trajectoire bien définie. Dans ce cas on devrait avoir en théorie un point d'impact sur l'écran et en pratique des points regroupés. Au lieu de cela, on observe, notamment sur la photo (b), une répartition aléatoire des points d'impacts. Ainsi : chaque électron est détecté en un point aléatoire.

- De la photographie b à la photographie e, au fur et à mesure que le nombre d'électrons détectés croît, apparaît une modulation régulière du nombre d'impacts enregistrés. Des franges d'interférences tout à fait analogues à celles que l'on obtient avec des photons se dessinent peu à peu.

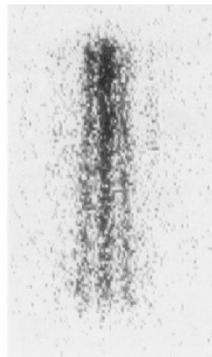
b) Interférences atomiques

En 1992, une équipe japonaise (F.Shimizu...) a réalisé une expérience d'interférences atomiques. On utilise le dispositif décrit sommairement sur la figure ci-dessous, soulignons qu'il est en réalité très complexe. Il utilise des atomes de Néon piégés et refroidis à une température de 2,5mK de manière à minimiser leur agitation thermique moyenne. Ils sont portés dans un état métastable grâce à un laser à 598 nm, ils peuvent alors quitter le piège et tombent dans le champ de pesanteur : ces atomes sont alors en chute libre. L'utilisation d'atomes légers et refroidis permet de disposer de valeurs de longueur d'onde de De Broglie plus élevées.

Le piège est situé à une hauteur $\ell = 76$ mm au dessus de deux fentes séparées d'une distance $a = 6$ μm . La largeur d'une fente est de 2 μm . Un écran MPC (microchannel plate detector) est placé à une distance $D = 113$ mm de la double fente et détecte les atomes de Néon avec une résolution de l'ordre de 20 μm . L'ensemble du dispositif est disposé verticalement.



La figure d'interférence obtenue en libérant les atomes du piège, est constituée d'environ 6000 impacts atomiques. Chaque impact est clairement identifié attestant du caractère corpusculaire des entités détectées mais l'ensemble des impacts dessine des franges d'interférences dont la période est égale à 0,23 mm. On a donc une preuve éclatante de la subtilité de la prédiction en physique quantique.



1 mm
interférences obtenue avec des atomes
de vitesse initiale approximativement nulle

On remarque donc :

- Que les atomes de Néon ont un impact bien défini au niveau du détecteur et donc qu'ils ne se « scindent » pas.
- Que la prédiction du lieu de l'impact est de nature probabiliste celle-ci fait intervenir la longueur d'onde de de Broglie associée à l'atome ainsi que les paramètres géométrique du dispositif.

Quelques questions qui en découlent :

- a) Si l'on bouche l'un des deux trous, que devient la figure d'interférences cette situation est déjà connue dans le cas de la lumière.

Si l'on bouche l'un des deux trous on se rend compte que les franges d'interférence disparaissent ... il est donc spectaculaire de noter que le fait d'ouvrir une « porte supplémentaire » empêche la particule d'arriver à certains endroits. cette situation est déjà connue dans le cas de la lumière.

- b) Si on cherche à savoir par quel trou est passée la particule en mettant un détecteur optique (un faisceau laser situé devant l'une des deux fentes par exemple). Que devient la figure d'interférences ?

On note alors que les franges d'interférence disparaissent ! Ce n'est plus la même expérience. On en déduit un autre résultat fondamental : **la mesure perturbe le système.**

- c) Calculer la longueur d'onde de De Broglie associé au système. Comparer l'ordre de grandeur à l'espace entre les fentes a . Conclure.

Soit : $\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{hN_A}{Mv} = 1,6 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 16 \text{ nm}$ où $v = \sqrt{2gl} = 1,22 \text{ ms}^{-1}$. On remarque que $\lambda < a$ ce qui permet d'observer des interférences.

- d) Faites un calcul simplifié de l'interfrange à partir de la formule des ondes lumineuses : $i = \frac{\lambda D}{a}$. Conclure

On a : $i = \frac{\lambda D}{a} = 1,6 \cdot 10^{-8} * \frac{0,113}{6 \cdot 10^{-6}} = 0,30 \text{ mm}$. C'est normal la formule de l'interfrange est plus complexe.

III – Fonction d'onde et probabilité

III-1) Analyse d'une expérience d'interférences quantiques

L'expérience de fentes de Young, peut être résumée ainsi : une particule (neutron, électron, atome...) peut parvenir en M sur l'écran soit en passant soit par la fente F_1 soit par la fente F_2 . Dans le cas où la particule a un comportement quantique la réponse à la question « la particule est-elle détectée par un détecteur placé au point M ? » est aléatoire. La réponse est « oui » avec une probabilité que l'on note **$p(\mathbf{M}) = \text{Prob}(\text{détecté en } \mathbf{M})$** .

La situation peut être considérée comme la superposition des deux situations :

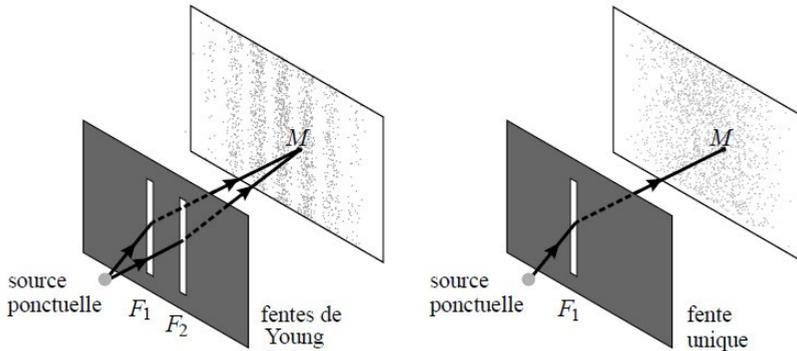
- situation 1 : il n'y a que la fente F_1 , la particule peut parvenir en M en passant par la fente F_1
- situation 2 : il n'y a que la fente F_2 , la particule peut parvenir en M en passant par la fente F_2 .

On appelle $p_1(M)$ et $p_2(M)$ les probabilités de détection de la particule en M dans ces deux situations.

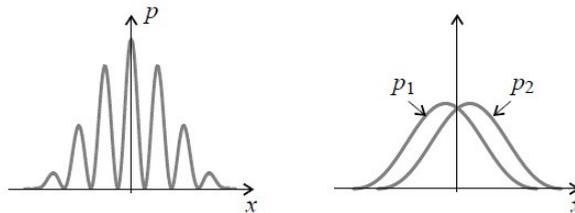
Des expériences comme celles qui ont été décrites ci-dessus permettent, par le comptage des particules arrivant sur le détecteur, de déterminer les probabilités $p(M)$, $p_1(M)$ et $p_2(M)$. Un résultat typique est visible sur la figure où chaque point gris sur l'écran représente une particule détectée. Les allures des courbes donnant $p(M)$, $p_1(M)$ et $p_2(M)$ en fonction de la coordonnée x selon un axe perpendiculaire aux fentes sont représentées sur la figure suivante.

Ces résultats sont surprenants. En effet, en s'appuyant sur l'image classique selon laquelle la particule passe soit par une fente, soit par l'autre, on s'attend à ce que les probabilités $p_1(M)$ et $p_2(M)$ associées

aux deux chemins, s'ajoutent lorsque la particule peut emprunter les deux chemins. **Or il est manifeste que : $p(M) \neq p_1(M) + p_2(M)$.**



A gauche l'expérience des fentes de Young, à droite la « situation 1 » où la fente F_2 est occultée.



Probabilités de détection de la particule : dans l'expérience d'interférence (à gauche) et dans les « situations 1 et 2 » (à droite).

Plus étonnant encore, il y a des points où $p(M)$ est pratiquement nulle alors que $p_1(M)$ et $p_2(M)$ ne sont pas nulles. En ces points, la particule peut parvenir si l'une des fentes est ouverte, mais ne le peut plus si les deux fentes sont ouvertes. Ce résultat paradoxal s'interprète par l'interférence entre les deux ondes associées à la particule dans les situations 1 et 2.

III-2) Fonction d'onde

a) Lien avec la probabilité

En mécanique classique, une particule peut être clairement suivie au cours de son mouvement : l'ensemble des points de l'espace successivement occupés constitue la trajectoire. D'un point de vue quantique, le comportement ondulatoire interdit cette notion de trajectoire qui n'a alors plus aucun sens. On est amené à définir une fonction d'onde $\psi(M, t)$ au point M et à l'instant t , aussi appelée amplitude de probabilité.

Cette fonction d'onde est par définition telle que la quantité : $dP = |\psi(M, t)|^2 d\tau$ soit la probabilité que la particule se trouve à l'instant t dans le volume élémentaire $d\tau$ autour du point M .

On s'aperçoit ici que la notion de probabilité fait partie des fondements de la théorie quantique. Puis, la particule étant forcément quelque part, la probabilité correspondant vaut 1, soit :

$$\int_{\text{espace}} |\psi(M, t)|^2 d\tau = 1$$

Cette fonction d'onde doit de plus obéir à une certaine équation, appelée équation de Schrödinger.

b) Equation de Schrödinger

L'existence de la fonction d'onde et de l'équation de Schrödinger constituent des postulats de la mécanique quantique. Il n'est donc absolument pas question de les démontrer à partir d'autres considérations. Seule l'expérience permet de valider des postulats : les résultats des expériences réalisées doivent coïncider avec les prédictions théoriques déduites des postulats. L'équation de

Schrödinger peut s'énoncer sous la forme dite indépendante du temps :

$H\psi = E\psi$ où H est un opérateur linéaire appelé hamiltonien et E est l'énergie de l'état y considéré.

Toute la difficulté de la résolution de l'équation provient du fait qu'a priori, ni les énergies E , ni les fonctions d'ondes ψ ne sont connues. Un exemple de résolution sera donné dans la suite. Pour une particule de masse m , l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit explicitement à une variable d'espace :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

où V est l'énergie potentielle (indépendante du temps) de la particule concernée. La résolution de cette équation donnera des fonctions $\psi(M)$ indépendantes du temps, qu'il faut ensuite faire évoluer temporellement pour obtenir la fonction d'onde $\psi(M, t)$.

c) Conclusion sur les fentes d'Young

Notons que l'équation de Schrödinger est linéaire, ce qui implique que la superposition de deux états solutions de l'équation de Schrödinger est aussi solution de l'équation. Lors d'une expérience d'interférences de type fentes d'Young, la fonction d'onde $\psi(M, t)$ au point M après les trous s'écrit comme la superposition des deux solutions correspondant aux ondes (ou particules) passant par la première et la seconde fente :

$$\psi(M, t) = \psi_1(M, t) + \psi_2(M, t).$$

Cela correspond à une distribution sur l'écran (l'intensité lumineuse est proportionnelle à la probabilité de présence en un point de l'écran) :

$$I = |\psi(\mathbf{M}, t)|^2 = |\psi_1(\mathbf{M}, t) + \psi_2(\mathbf{M}, t)|^2$$

On retrouve ainsi la formule des interférences :

$$I = \psi_1^2 + \psi_2^2 + 2\psi_1\psi_2$$

Ce type de formalisme (fonction d'onde dont le carré est associé à la probabilité de présence en un endroit) permet donc naturellement de décrire les phénomènes interférentiels.

IV - L'inégalité de Heisenberg

IV-1) Indétermination quantique

Dans les expériences présentées ci-dessus, on a vu que des particules quantiques arrivent en des points aléatoires du plan de détection. Ainsi, quand on mesure la coordonnée x ou y d'une particule dans le plan de détection, on obtient un résultat aléatoire.

Il s'agit d'une propriété générale des systèmes quantiques :

La mesure d'une grandeur X sur un système quantique donne a priori un résultat aléatoire.

Soit $\langle X \rangle$ la moyenne des résultats possibles pondérés par leur probabilité. On définit en mathématiques l'écart quadratique moyen

$$\text{par } \Delta x = \sqrt{\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle}$$

L'écart quadratique moyen Δx nous renseigne sur la dispersion des résultats possibles pour la mesure de la grandeur X . On l'appelle indétermination quantique de X .

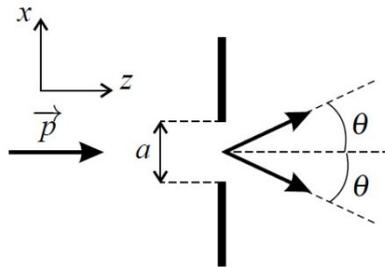
Il ne faut pas confondre l'indétermination quantique Δx avec l'incertitude sur la mesure :

Δx est totalement indépendante de l'instrument de mesure et du protocole suivi.

Par exemple sur le document des figures d'interférences par électrons, l'incertitude sur la coordonnée x est donnée par la taille d'un point correspondant à un électron, alors que l'indétermination quantique Δx est au moins aussi grande que la largeur du champ visible.

IV-2 Diffraction par une fente

On considère une particule de quantité de mouvement $\vec{p} = p\vec{u}_z$ arrivant orthogonalement sur une fente de largeur a parallèle à (Oy) . L'onde associée à la particule est diffractée par la fente exactement comme une onde lumineuse l'est.



Diffraction d'une particule par une fente.

Le demi-angle d'ouverture θ du faisceau diffracté est donné par : $\sin \theta = \frac{\lambda}{a}$ où λ est la longueur d'onde de Broglie de la particule. Si l'on fait une mesure de la coordonnée x de la particule immédiatement après la fente, le résultat de la mesure est compris entre $-a/2$ et $a/2$ donc l'indétermination quantique est du même ordre de grandeur que a : $\Delta x = a$.

Si l'on fait la mesure de sa quantité de mouvement p_x selon (Ox) immédiatement après la fente, la dispersion des résultats possibles est due au phénomène de diffraction. Les valeurs extrêmes de p_x correspondent aux cas représentés sur la figure où la particule part dans la direction faisant l'angle θ ou $-\theta$ avec l'axe (Oz). Les valeurs de p_x possibles sont donc comprises entre $-p\sin\theta$ et $p\sin\theta$. Donc :

$$\Delta p_x \Delta x p \sin\theta = p \frac{\lambda}{a} = p \frac{\lambda}{\Delta x}$$

Ainsi, en utilisant $\lambda = \frac{h}{p}$ on trouve :

$$\Delta p_x \Delta x \sim h$$

Ainsi, en localisant la particule avec précision à l'aide d'une fente étroite, on introduit une dispersion sur sa quantité de mouvement.

IV-3) Inégalité de Heisenberg

Le résultat précédent est un cas particulier du principe d'indétermination de Heisenberg qui est aussi connu sous le nom, d'inégalité de Heisenberg :

Les mesures de position x et de quantité de mouvement p_x selon un même axe (Ox) sont affectées d'indéterminations quantiques Δx et Δp_x dont le produit est au moins de l'ordre de grandeur de la constante de Planck réduite \hbar .

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar$$

Cette inégalité représente une contrainte fondamentale. Si la position d'une particule est connue avec une grande précision, alors une mesure de la quantité de mouvement sera affectée d'une grande indétermination. C'est par exemple le cas pour une particule

enfermée dans une « boîte » de petites dimensions. De même, si l'on a préparé la particule de manière à bien connaître sa vitesse, alors on ne peut avoir que très peu d'information sur sa position.

Ainsi, l'inégalité de Heisenberg rend caduque, à l'échelle microscopique, la notion de trajectoire (pour laquelle position et vitesse sont parfaitement connues) sur laquelle la mécanique classique est fondée. En revanche pour un système macroscopique, la petitesse de la valeur \hbar fait que la limitation posée par l'inégalité de Heisenberg n'est pas perceptible, donc la mécanique classique s'applique.

IV-4) Applications

a) Énergie cinétique minimale d'une particule quantique confinée

Une conséquence de l'inégalité d'Heisenberg est le fait qu'une particule confinée dans un volume de l'espace de taille limitée a une énergie cinétique bornée inférieurement. On considère une particule de masse m se déplaçant le long de l'axe (Ox). On suppose que la particule est confinée dans un intervalle de largeur ℓ : on ne sait pas où elle se trouve dans cet intervalle mais on est certain qu'elle ne se trouve pas à l'extérieur. On a alors : $\Delta x \leq \ell$, donc d'après l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \geq \frac{\hbar}{\ell}$$

Par ailleurs, l'énergie cinétique de la particule, supposée non relativiste, est : $E_c = \frac{1}{2} m v_x^2 = \frac{p_x^2}{2m}$

Et, d'après l'expression de l'écart quadratique moyen :

$$\Delta p_x \leq p_x \Rightarrow E_c = \frac{p_x^2}{2m} \geq \frac{\Delta p_x^2}{2m}$$

$$\Rightarrow E_c \geq \frac{\left(\frac{\hbar}{\Delta x}\right)^2}{2m} \Rightarrow E_c \geq \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{2m l^2} = E_{c,\min}$$

Ainsi, l'énergie cinétique de la particule est au minimum de l'ordre de grandeur de $E_{c,\min}$.

b) Energie minimale de l'oscillateur harmonique quantique

Dans le chapitre I on a vu que l'énergie d'un oscillateur harmonique était donné par :

$$E = E_c + E_p = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kX^2 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 X^2$$

Ce potentiel peut représenter l'interaction entre deux atomes à l'intérieur d'une molécule, où les oscillations d'un atome donné à l'intérieur du solide.

Classiquement la particule effectue des oscillations avec une amplitude X_0 .

Sa vitesse elle oscille avec une amplitude $\omega_0 X_0$ et par conséquent on peut écrire :

$$\Delta x = X_0 \text{ et } \Delta v_x = \omega_0 X_0$$

Or

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar \Leftrightarrow m\omega_0 X_0^2 \geq \hbar$$

Dans le cas de l'oscillateur harmonique classique on avait vu que :

$$E_m = \frac{1}{2}kX_0^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 X_0^2 = \text{CSTE}$$

Par conséquent :

$$E \geq \frac{\hbar\omega_0}{2} : \text{Energie de point zéro}$$

Ainsi un oscillateur harmonique quantique de pulsation ω_0 possède au moins l'énergie $\frac{\hbar\omega_0}{2}$

En fait on démontre que les niveaux d'énergie sont quantifiés par la formule :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0$$

V - Quantification de l'énergie d'une particule libre confinée 1D

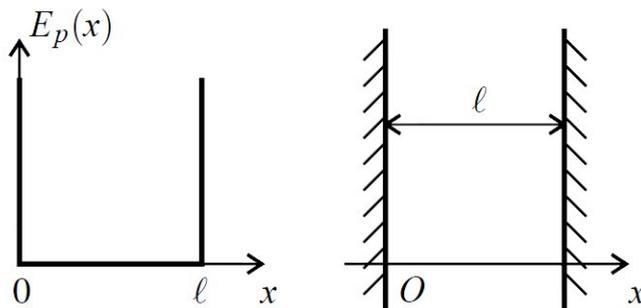
V-1) Notion de quantification

Un des résultats les plus remarquables de la mécanique quantique est la quantification de certaines grandeurs physiques. Une grandeur physique est quantifiée lorsqu'elle ne peut prendre qu'une suite de valeurs discrètes. On parle de quantification. L'énergie mécanique d'une particule confinée dans une région limitée de l'espace est quantifiée. Le cas le plus simple est celui d'une particule dans un puits infini à une dimension.

V-2) Particule dans un puits infini à 1 dimension

a) Puits infini à 1 dimension

Le puits infini à une dimension est le nom donné au modèle théorique d'énergie potentielle suivant :



Modèle du puits infini à 1 dimension.

$$E_p(x) = 0 \text{ si } 0 < x < \ell \text{ et } E_p(x) = +\infty \text{ si } |x| > \ell$$

Concrètement cela décrit une particule se déplaçant librement entre deux « murs » infranchissables perpendiculaires à (Ox) et distants de ℓ . La particule est confinée dans l'intervalle $0 < x < \ell$.

b) Longueurs d'onde possibles pour la particule

Quelles sont les longueurs d'ondes possibles pour une particule placée dans le puits infini ?

L'onde de matière est limitée à l'intervalle $0 < x < \ell$. On a vu dans un chapitre précédent qu'**une onde dans un espace confiné est nécessairement une onde stationnaire**. Il en est obligatoirement de

même pour l'onde de De Broglie associée à la particule. L'onde associée à la particule est une onde stationnaire.

D'autre part, la probabilité de détecter la particule en un point est proportionnelle au carré de l'amplitude de la fonction d'onde en ce point. On sait que cette probabilité est nulle pour $x < 0$ et pour $x > \ell$. **Par continuité, elle est aussi nulle pour $x = 0$ et pour $x = \ell$.** Ainsi l'amplitude de l'onde associée à la particule s'annule en $x = 0$ et $x = \ell$. L'onde associée à la particule présente un nœud de vibration en $x = 0$ et en $x = \ell$.

L'étude des ondes stationnaires a montré que la distance entre deux nœuds de vibration consécutifs est égale à la moitié de la longueur d'onde. Ainsi la largeur du puits est nécessairement un multiple entier de la demi-longueur d'onde.

Ceci s'écrit : $\ell = \frac{n\lambda}{2}$, où n est un entier.

Finalement, l'onde associée à une particule placée dans le puits de potentiel a nécessairement une longueur d'onde de De Broglie prenant l'une des valeurs :

$$\lambda = \frac{2\ell}{n} \text{ où } n \text{ est un entier.}$$

c) Niveaux d'énergie

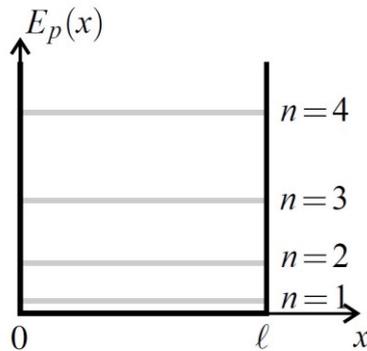
L'énergie mécanique de la particule à l'intérieur du puits, $E = E_c + E_p$, se résume à son énergie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$ puisque l'énergie potentielle est nulle.

$$\text{Or } p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

$$\text{Or } \lambda = \frac{2\ell}{n} \text{ d'où } E_n = n^2 \frac{h^2}{8m\ell^2}$$

L'énergie de la particule dans le puits est quantifiée. Les premiers niveaux d'énergie sont représentés sur la figure. L'écart entre deux niveaux consécutifs est :

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1) \frac{h^2}{8m\ell^2} \text{ qui augmente avec } n.$$



Les 4 premiers niveaux d'énergie de la particule dans le puits infini.

D'autre part, conformément au paragraphe précédent, l'énergie de la particule confinée dans le puits ne peut pas être nulle. Sa valeur minimale est $E_1 = \frac{h^2}{8m\ell^2}$ qui est, comme attendu, supérieure à l'énergie cinétique minimale :

$$E_{c,\min} = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} = \frac{h^2}{8\pi^2 m\ell^2} = \frac{E_1}{\pi^2}$$

d) Transitions entre niveaux d'énergie

La particule doit être dans l'un des niveaux d'énergie précédemment déterminés. Elle peut passer d'un niveau E_n à un niveau plus bas $E_{n'}$ ($n' < n$) en émettant un photon dont la fréquence est donnée par la loi de conservation de l'énergie :

$$h\nu = E_n - E_{n'} = (n^2 - n'^2) \frac{h^2}{8m\ell^2}$$

Ainsi pour la première transition : $\Delta E = \frac{3h^2}{8m\ell^2}$

Elle peut aussi passer du niveau $E_{n'}$ au niveau E_n en absorbant un photon ayant cette même fréquence.

On sait réaliser des puits quantiques constitués de couches de semi-conducteurs : par exemple une couche de GaAs en « sandwich » entre deux couches de GaAlAs. On appelle ceci une hétérostructure. Le puits de potentiel correspond à la couche centrale dont la largeur ℓ est de quelques nanomètres. Ces puits quantiques sont à la base des lasers qui équipent la plupart des lecteurs de CD et de DVD de salon.

V-3) Généralisation : lien entre confinement spatial et quantification

L'exemple du puits infini montre que la notion d'onde de matière conduit, pour une particule confinée, à la quantification de l'énergie. Ceci est un fait qualitatif général :

Une particule quantique confinée dans une région de l'espace de taille finie a son énergie quantifiée.

En appliquant le modèle du puits infini, fortement idéalisé, on peut chercher une estimation de l'ordre de grandeur de l'écart entre deux niveaux d'énergie au niveau atomique.

Par exemple pour :

- un électron de masse m_e dans un puits de la taille d'un atome, soit

$$\ell \sim 10^{-10} \text{ m, on trouve : } \Delta E = \frac{3h^2}{8m\ell^2} = 100 \text{ eV}$$

- un nucléon (c'est-à-dire un proton ou un neutron) de masse m_n dans un puits de la taille d'un noyau atomique, soit $\ell \sim 10^{-15} \text{ m}$, on

$$\text{trouve : } \Delta E = \frac{3h^2}{8m\ell^2} = 100 \text{ MeV}$$

Ces valeurs sont dans les deux cas supérieures d'un facteur 10 à 100 aux valeurs expérimentales (spectres d'émission en énergie) mais le calcul interprète bien le fait que les énergies mises en jeu dans le **noyau sont 10^5 à 10^6 fois plus importantes** que celles qui sont mises en jeu dans l'atome.