

Introduction au monde quantique

Introduction

La mécanique classique a été développée continûment depuis Newton et permet de décrire avec succès la dynamique de très nombreux systèmes. Il est apparu cependant nécessaire de développer une nouvelle théorie, plus adaptée aux systèmes à l'échelle atomique appelée **mécanique quantique**. Les lois générales de la mécanique quantique, élaborées dès le début du xx^e siècle par W. Heisenberg, P.A.M. Dirac, W. Pauli ou encore E. Schrödinger, ont trouvé de nombreuses confirmations expérimentales, souvent postérieures aux prédictions théoriques. L'un des acteurs majeurs de la révolution de la physique du début du xx^e siècle, A. Einstein est à l'origine du concept des « quanta de lumière », les photons, dont l'interprétation corpusculaire permettra l'essor de l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique dont ce chapitre présente quelques fondements et spécificités. Les difficultés conceptuelles que présente la mécanique quantique et la nouveauté de nombreux aspects théoriques justifient la longueur du cours relatif à cette partie du programme qui doit être abordée avec prudence. Il s'adresse aux classes de MPSI, PCSI et PTSI.

Plan du chapitre 4

A. Dualité onde-corpuscule	X
1. Préambule	X
2. Matière et rayonnement	X
3. Description de la lumière.....	X
4. Relations de de Broglie	X
B. Interprétation de la fonction d'onde	
1. Interférences particule par particule	X
2. État quantique et fonction d'onde.....	X
3. L'équation de Schrödinger	X
C. Inégalité de Heisenberg	
1. Mesures et incertitudes	X
2. Interprétation de l'inégalité de Heisenberg	X
3. Mesure de la position d'un faisceau	X
D. Analyse de quelques systèmes simples	
1. L'oscillateur harmonique quantique	X
2. Particule libre confinée	X
Méthodes	X
Exercices	X

A. Dualité onde-corpuscule

A.1. Préambule

La description d'un système classique par la mécanique est basée sur la connaissance de l'évolution temporelle des trois composantes du vecteur position et des trois composantes du vecteur vitesse, dont on connaît a priori les valeurs exactes à chaque instant. Les lois de Newton de la mécanique classique permettent de déterminer cette évolution, connaissant l'état initial du système, après la résolution des équations du mouvement. Mathématiquement cela se ramène à la résolution d'équations différentielles, compte tenu de conditions initiales précises. En particulier on considère qu'il est possible de déterminer *simultanément* la position et la vitesse du système avec une précision qui n'est limitée que par la résolution des instruments de mesure. Si cette approche classique a connu de grands succès dans la description des systèmes macroscopiques, tels que les planètes et les satellites, elle a été rapidement mise en défaut à partir du début du XX^e siècle quand il s'est agi d'étudier le monde microscopique, atomique puis subatomique, que l'on caractérisera par des échelles de longueur inférieures ou égales à l'Angström¹.

1. 1 Angström $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$, définit la taille typique d'un atome.

C'est à cette époque que l'on peut situer les trois grandes révolutions de la physique théorique moderne : la **relativité restreinte**, la **mécanique quantique** et la **thermodynamique statistique**. Nous allons focaliser sur les deux premières, dans lesquelles la description de la lumière, soit comme onde soit comme faisceau de particules, a joué un rôle central.

A.2. Matière et rayonnement

À la fin de la période de la physique dite « classique », les physiciens distinguaient deux grandes catégories d'objets : la **matière** et le **rayonnement**.

2. Corpuscule = corps matériel extrêmement petit, particule. Une particule est dite élémentaire si elle n'a pas de sous-structure. L'électron est considéré comme élémentaire, contrairement au proton par exemple qui est constitué de quarks.

La matière, souvent ramenée à l'étude de points matériels est décrite par une **théorie corpusculaire**² : la mécanique newtonienne classique qui détermine la trajectoire des objets à partir de leur position initiale, après résolution des équations du mouvement.

Le rayonnement quant à lui, est étudié séparément par une **théorie ondulatoire**. C'est le cas du rayonnement lumineux par exemple, dont le cadre d'étude est l'optique. Contentons-nous pour l'instant de définir une onde comme une perturbation qui se propage dans l'espace et dans le temps. Elle est caractérisée par sa longueur d'onde (associée à l'évolution *spatiale* de l'onde) et sa fréquence (associée à son évolution *temporelle*). Exemples d'ondes matérielles courantes : onde élastique sur une corde vibrante, ondes acoustiques de compression-dilatation dans l'air, ondes sismiques etc.

Remarque historique : la différence notable entre ces exemples d'ondes et la lumière est la capacité de celle-ci à se propager dans le vide. Pour tenter d'unifier la description de toutes ces ondes, les physiciens de l'époque avaient postulé l'existence d'un support matériel « caché », baptisé *éther*, dont la lumière représenterait une perturbation à l'instar par exemple des ondes de compression-dilatation dans l'air. L'impossibilité de mettre en évidence ce support matériel³ conduisit Albert Einstein à renoncer à cette hypothèse et à formuler sa théorie de la relativité restreinte à partir de 1905.

C'est à cette époque que la séparation nette entre matière et rayonnement commence également à se fissurer avec les débuts de la mécanique quantique.

3. Parmi les expériences destinées à caractériser les propriétés de l'éther, la plus célèbre fut menée par Michelson et Morley en 1887 et conduisit au résultat que la vitesse de la lumière est indépendante de sa direction de propagation.

A.3. Description de la lumière

A.3.1. Les succès de la théorie ondulatoire

La description ondulatoire de la lumière permet de décrire les principaux phénomènes rencontrés en optique : réflexion, réfraction, interférences et diffraction. Citons les travaux de C. Huygens au XVII^e puis ceux de T. Young ou d'A. Fresnel au XIX^e siècle. À la fin du XIX^e siècle cette description ondulatoire l'emporte largement avec la théorie de J.C. Maxwell⁴ qui permet d'identifier la lumière à un rayonnement électromagnétique engendré par des charges en mouvement. Le spectre de ce rayonnement est schématisé, en domaines de longueur d'onde, sur la figure ci-dessous.

4. Les équations de Maxwell lient, en chaque point de l'espace et à tout instant, les champs électrique et magnétique à leurs sources : les densités de charges électriques et de courants.

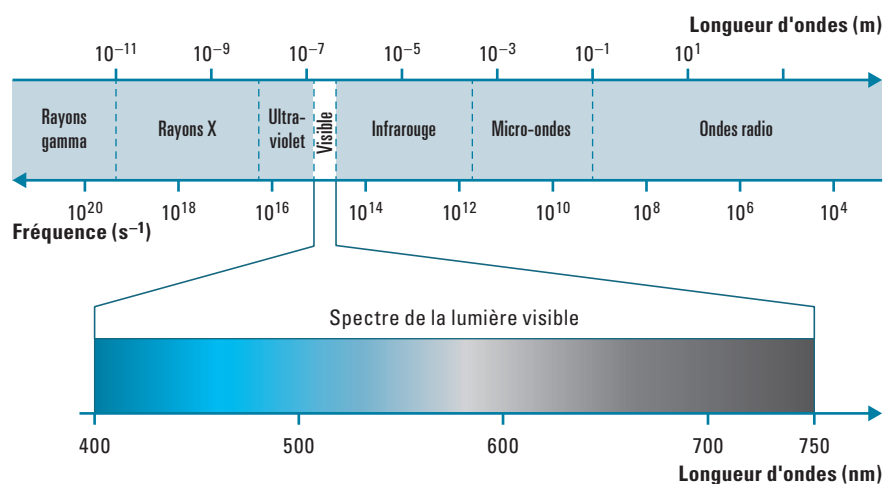


Fig. 1. Spectre électromagnétique.

A.3.2. Nécessité d'une description corpusculaire

Cependant, la description ondulatoire se révèle incapable de rendre compte de phénomènes tels que l'**effet photoélectrique** (émission d'électrons lorsque l'on éclaire un métal), l'**effet Compton** (diffusion de rayons X par des électrons libres) ou le **rayonnement du corps noir** (rayonnement d'un corps porté à une certaine température T). C'est pour décrire les propriétés du corps noir que Max Planck postula en 1900 que les interactions entre matière et lumière se faisaient par échange de « paquets » d'énergie ε ou **quanta**. Il postule de plus que chaque quantum échangé équivaut à une énergie proportionnelle à la fréquence ν de la lumière :

$$\varepsilon = h\nu$$

5. La constante h correspond à une action A dont les dimensions sont : $[A] = M \cdot L^2 \cdot T^{-1}$.

La constante h entre ces deux quantités, baptisée **constante de Planck** vaut⁵ : $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. La quantité d'énergie ε est la plus petite quantité d'énergie pouvant être échangée entre la matière et le rayonnement, mais la théorie des quanta ne fournit pas de justification théorique.

A.3.3. Modèle de Planck-Einstein

Au début du XX^e siècle, Albert Einstein et Louis de Broglie étendent cette théorie en considérant qu'un rayonnement lumineux de fréquence ν est constitué d'un « jet » de particules, des **photons**, possédant tous l'énergie :

$$\varepsilon = h\nu.$$

C'est la relation de Planck-Einstein. On voit apparaître deux aspects **complémentaires** de la lumière : une caractéristique ondulatoire (la fréquence ν) et

une caractéristique mécanique (l'énergie ε). On parle alors de **dualité onde-corpuscule** pour la lumière. Cette dualité, et les difficultés conceptuelles qu'elle engendre, est profondément liée à la nature quantique de la lumière. Pour compléter sa présentation, il est nécessaire de se poser deux questions :

- Existe-t-il une relation analogue à Planck-Einstein pour la quantité de mouvement des photons ?
- La dualité onde-corpuscule est-elle spécifique à la lumière ou s'adresse-t-elle à toutes les particules ?

A.4. Relations de de Broglie

A.4.1. Quantité de mouvement du photon

Le photon se déplaçant dans le vide, par définition, à la vitesse de la lumière c , la mécanique relativiste montre que sa quantité de mouvement est reliée à son énergie par : $p = \frac{\varepsilon}{c}$. On en déduit, par application de la relation de

Planck-Einstein : $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$. C'est la relation de de Broglie. On voit que les descriptions ondulatoires et corpusculaires sont étroitement liées et par conséquent indissociables, par l'intermédiaire de la constante de Planck :

Propriété 1

Un rayonnement lumineux, de fréquence ν et de longueur d'onde λ , peut être décrit simultanément comme un faisceau de particules, des photons, d'énergie et de quantité de mouvement données par :

$$\begin{array}{ccc} & \varepsilon = h\nu. & \\ & \swarrow \quad \searrow & \\ \text{description corpusculaire} & p = \frac{h}{\lambda} & \text{description ondulatoire} \end{array}$$

A.4.2. Dualité onde-corpuscule et ondes de matière

En 1924, Louis de Broglie va généraliser la dualité onde-corpuscule et l'étendre à la matière⁶.

6. Ses travaux sur la dualité onde-corpuscule valurent à Louis de Broglie le prix Nobel en 1929.

Propriété 2

Ainsi à toute particule de quantité de mouvement p et d'énergie ε est associée une onde de longueur d'onde λ et de fréquence ν données par :

$$\begin{array}{ccc} & \nu = \frac{\varepsilon}{h} & \\ & \swarrow \quad \searrow & \\ \text{description ondulatoire} & \lambda = \frac{h}{p} & \text{description corpusculaire} \end{array}$$

Cette hypothèse a été vérifiée avec succès par Davisson et Germer en 1927 grâce à une expérience de diffraction d'électrons par un cristal.

Application 1 Détermination de la longueur d'onde associée à un faisceau d'électrons

L'expérience de Davisson et Germer utilise un faisceau d'électrons que l'on peut accélérer sous une différence de potentiel (ddp) variable (la première expérience fut réalisée sous une ddp de 54 V) et que l'on dirige sur un cristal de nickel (fig. 2, gauche). La disposition régulière des atomes de nickel joue un rôle analogue à celui des fentes fines régulièrement espacées d'un réseau de diffraction en optique (fig. 2, droite). Le but de l'expérience est de compter le nombre d'électrons qui font un angle θ par rapport à la direction de l'onde incidente.

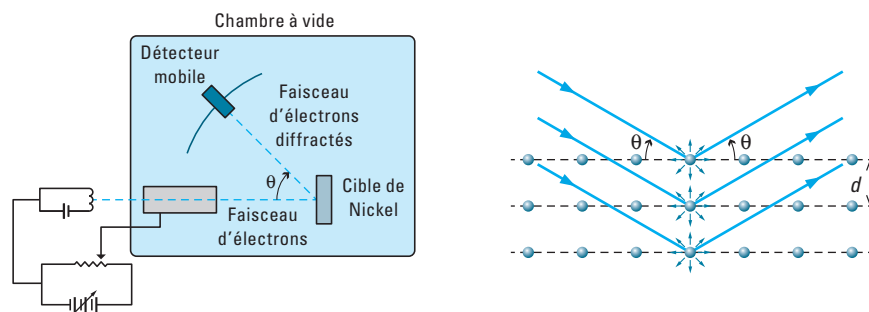


Fig. 2. Dispositif expérimental (gauche) et schéma de la diffraction des électrons par le cristal (droite).

Pour une diffraction de rayons X (rayonnement électromagnétique), on observe des pics d'intensité maximale dans les directions obéissant à la loi de Bragg : $2d \sin \theta = k\lambda$ avec $k \in \mathbb{Z}$. L'expérience de Davisson et Germer a mis en évidence un comportement identique pour un faisceau d'électrons, validant du même coup l'hypothèse de Louis de Broglie d'un comportement ondulatoire de la matière.

1) Calculer la longueur d'onde associée à un électron en fonction de la ddp appliquée.

A.N. : $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C, $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ J·s, $\Delta V = 54$ V.

2) Quel rôle peuvent jouer les électrons dans l'étude du cristal?

Solution

1) On fait l'hypothèse que les électrons partent sans vitesse initiale d'un point noté A, que leur accélération se fait suivant l'axe Oz jusqu'à un point noté B (arrivée). La quantité de mouvement d'un électron s'écrit : $p = mv$, où v désigne la vitesse. Pour déterminer cette dernière, nous faisons l'hypothèse qu'elle reste faible devant la vitesse de la lumière dans le vide, soit $v \ll c$, et nous appliquons le théorème de l'énergie cinétique. Le poids d'un électron étant négligeable par rapport aux forces d'origine électrostatique, nous pouvons faire l'approximation que seules ces dernières ont un travail appréciable lors du déplacement de A à B : $\Delta E_c = W(\vec{F}_{\text{élec}}) = (-e)\vec{E} \cdot \vec{AB} = e\Delta V$ (avec ΔV : différence de potentiel appliquée entre A et B).



Sous cette forme, l'énergie cinétique s'exprime simplement en électron-volts (eV). Si la ddp appliquée vaut 100 V, l'énergie cinétique finale de l'électron sera 100 eV.

On en déduit que la vitesse finale de l'électron est donnée par : $\Delta E_c = \frac{1}{2}mv^2 = e\Delta V \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2e\Delta V}{m}}$.

La longueur d'onde associée à l'électron, d'après la relation de de Broglie, vaut quant à elle :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m} \sqrt{\frac{m}{2e\Delta V}} = \frac{h}{\sqrt{2em\Delta V}}$$

A.N. : $\lambda = 1,67$ Å.

2) Cette longueur d'onde est de l'ordre de grandeur des distances interatomiques dans le cristal. En réalisant cette expérience, on peut déterminer la valeur du paramètre inconnu d , caractéristique du cristal.

On comprend sur l'application précédente que les électrons subissent une diffraction sur le réseau cristallin puisque leur longueur d'onde est de l'ordre de grandeur de la distance interatomique. Comme on peut le voir sur cet exemple, tous les systèmes microscopiques (électrons, photons, atomes etc.) se comportent à la fois comme des ondes et comme des corpuscules.

B. Interprétation de la fonction d'onde

B.1. Interférences particule par particule

Puisque nous avons mis en évidence dans le paragraphe précédent la complémentarité des aspects corpusculaires et ondulatoires pour tout système microscopique et puisqu'il n'y a pas lieu de distinguer électrons et photons par exemple, nous allons reprendre l'interprétation d'une expérience classique d'interférences utilisant des fentes d'Young. Le dispositif expérimental utilisé est celui de la figure 3 :

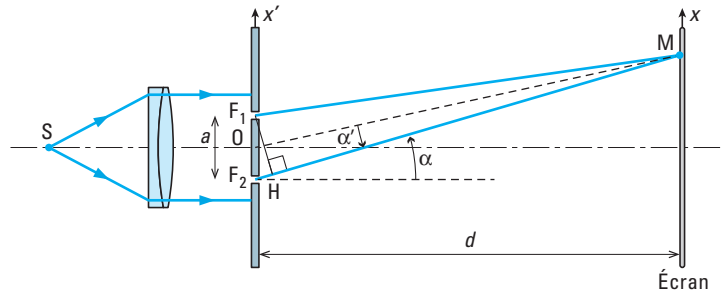


Fig. 3. Dispositif expérimental des fentes d'Young notées F_1 et F_2 .

7. Un photomultiplicateur ou PM convertit un signal lumineux incident en un signal de charges (plusieurs milliers d'électrons par photon). C'est un détecteur rapide et sensible à de très faibles quantités de lumière, voire au « photon unique ».

Le résultat obtenu sur l'écran ou sur un détecteur tel qu'un photomultiplicateur⁷ (PM) placé à une distance d des fentes d'Young est connu : l'intensité totale observée n'est pas la somme des intensités produites par les deux fentes séparément du fait du phénomène d'interférences.

$$I(x) \neq I_1(x) + I_2(x).$$

On observe sur l'écran une succession de franges alternativement sombres et brillantes. La théorie ondulatoire permet d'interpréter la figure ainsi obtenue. En désignant par $a_1(x)$ l'amplitude du signal lumineux produit par la première fente et par $a_2(x)$ celle produite par la seconde fente, on détermine :

$$I(x) \approx |a(x)|^2 = |a_1(x) + a_2(x)|^2$$

qui diffère clairement de : $I_1(x) + I_2(x) = |a_1(x)|^2 + |a_2(x)|^2$.

Que prévoit la théorie corpusculaire ? On pourrait imaginer que les photons passant par F_1 interagissent avec ceux passant par F_2 . Il reste à le prouver.

Que se passe-t-il maintenant si l'on réalise l'expérience en envoyant les photons un par un ? Les constatations expérimentales sont les suivantes (fig. 4 ci-contre).

1) Chaque photon produit un impact ponctuel sur l'écran (fig. 4-a). Ceci rejette une interprétation ondulatoire qui prévoit que l'on doit observer une figure d'interférences faites de franges sombres et brillantes mais de très faible intensité.

2) En accumulant un grand nombre de ces impacts on constate qu'ils ne sont pas distribués de manière quelconque et qu'ils reconstituent la figure d'interférences initiale (fig. 4-e). Une interprétation corpusculaire prévoit qu'un photon unique passerait soit par une fente, soit par l'autre et que l'on doit donc observer au mieux deux tâches de diffraction derrière chaque fente. Les deux interprétations, uniquement corpusculaire ou uniquement ondulatoire, sont donc mises en défaut.

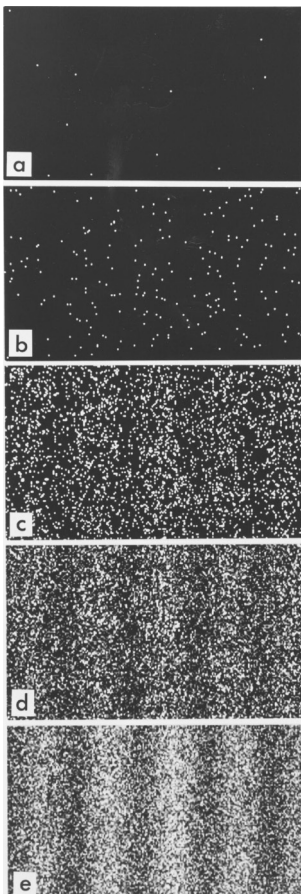


Fig. 4. Figure d'interférences obtenue progressivement photon-par-photon.

B.2. État quantique et fonction d'onde

B.2.1. Mesures et perturbations du système

L'expérience des fentes d'Young réalisée photon par photon nous conduit à nous demander par quelle fente passe le photon. Si l'on place pour cela un PM derrière la fente F_1 nous allons détecter tous les photons qui seront passés par cette fente déterminée. Mais on constate que l'on détruit la figure d'interférences. On ne peut pas savoir **simultanément** par quelle fente le photon est passé **et** observer la figure d'interférence. Ce phénomène est propre aux systèmes microscopiques en général et radicalement différent de la mécanique classique dans laquelle on peut déterminer la valeur exacte de toutes les variables dynamiques en même temps et sans restriction.

B.2.2. Notion de fonction d'onde

La mécanique quantique prévoit le comportement des systèmes microscopiques, auxquels s'applique la dualité onde-corpuscule, de manière probabiliste. À la notion classique de trajectoire on substitue la notion d'**état du système**.

Considérons un problème unidimensionnel d'axe Ox . L'état d'un système est décrit par une **fonction d'onde** $\psi(x, t)$, fonction complexe, dépendant des variables temporelles et spatiales dans le cas général et que l'on interprète comme une **probabilité de présence**. La probabilité pour que le système soit à l'instant t , dans l'intervalle de longueur dx centré à l'abscisse x est proportionnelle⁸ au module carré de la fonction d'onde :

$$dP(x, t) = C |\psi(x, t)|^2 dx$$

8. La constante C de proportionnalité se détermine simplement en constatant que la probabilité de trouver le système sur la totalité de l'axe Ox est égale à 1. C'est la relation de normalisation de la fonction d'onde.

La condition de normalisation⁸ s'écrit mathématiquement :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

Comme nous l'avons indiqué plus haut, la notion de trajectoire n'existe plus et on peut employer l'image d'un « nuage » dans lequel le système a une plus ou moins grande probabilité de se trouver. En fait toute l'information sur le système est contenue dans sa fonction d'onde.

Insistons bien sur le fait que la détermination de la position du système influe physiquement sur le comportement de ce dernier et le modifie (par exemple en absorbant le photon par un PM placé derrière une fente d'Young dans l'expérience précédente : on sait que le photon est passé par cette fente mais on a détruit la figure d'interférences ; on a donc une information mais sur une expérience différente au final). **La mesure perturbe le système**, et il faut en tenir compte en mécanique quantique.

B.3. L'équation de Schrödinger

Le comportement d'un système microscopique est donc décrit par sa fonction d'onde. Pour déterminer cette dernière il faut se doter d'une équation d'évolution qui puisse rendre compte du problème physique auquel on s'intéresse (par exemple un électron en interaction électrostatique avec un noyau en physique atomique ou un photon diffracté par un diaphragme en optique).

Définition 1

Une particule de masse m , possédant une énergie **potentielle**⁹ $E_p(x, t)$ est décrite par une fonction d'onde dont le comportement est régi par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_p \psi$$

avec $\hbar = h / 2\pi$ la constante de Planck réduite.

9. Il est courant en mécanique quantique de confondre « énergie potentielle » et « potentiel ».

Cette équation est linéaire et homogène en ψ . Le principe de superposition est donc applicable. On remarque que l'équation est du premier ordre en t , ce qui implique que la connaissance de l'état d'un système à un instant t_0 détermine son état à un instant t ultérieur.

Application 2 Cas d'une particule libre

On considère une particule soumise à aucune interaction. On parle dans ce cas de particule libre.

- 1) Que vaut l'énergie potentielle de cette particule ?
- 2) Écrire l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde de cette particule.
- 3) Chercher une solution à cette équation sous la forme d'une fonction de type « onde plane » : $\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$ avec A une constante. Identifier les variables k et ω .

Solution

- 1) La particule n'étant soumise à aucune force, son énergie potentielle est nulle.

- 2) L'équation de Schrödinger est donc simplement : $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$.

- 3) En remplaçant dans cette équation par la solution proposée de type « onde plane », sachant que :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \times (-i\omega) A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar\omega \times A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar\omega \times \psi(x, t) \text{ d'une part, et que :}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \times (ik)^2 A e^{i(kx - \omega t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \times (-k^2) \times A e^{i(kx - \omega t)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \times \psi(x, t) \text{ d'autre part, on se ramène à une}$$

équation simple : $\hbar\omega \times \psi(x, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \times \psi(x, t)$ qui est vérifiée pour $\psi(x, t)$ moyennant la relation suivante entre k et $\psi(x, t)$:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1)$$

Dans l'expression de $\psi(x, t)$ on reconnaît la pulsation ω de l'onde. k est le vecteur d'onde, ou fréquence spatiale de l'onde : $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. On peut alors écrire les relations de de Broglie à partir de k et ω :

$$\begin{aligned} \varepsilon &= h\nu = \hbar\omega \\ p &= \frac{h}{\lambda} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \end{aligned}$$

La relation (1), dite relation « de dispersion », s'écrit de manière analogue, dans l'approche corpusculaire : $\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2$. On retrouve bien le résultat prévisible que toute l'énergie d'une particule libre se retrouve sous forme d'énergie cinétique.

Un autre cas particulier important est celui dans lequel l'énergie potentielle de la particule est indépendante du temps. Dans ce cas on peut rechercher des solutions de fonction d'onde sous la forme : $\psi(x, t) = \phi(x) \times \chi(t)$. La séparation des variables permet de montrer (voir exercice 6) que la fonction d'onde se met alors sous la forme : $\psi(x, t) = \phi(x) \times e^{-i\omega t}$ et que la fonction $\phi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire.

Définition 2

Une particule de masse m , possédant une énergie potentielle $E_p(x)$ est décrite par une fonction d'onde $\psi(x, t) = \phi(x) \times e^{-i\omega t}$ dont la dépendance spatiale est solution de :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + E_p \phi = E \phi \text{ ou encore } \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + (E - E_p) \phi = 0$$

avec $E = \hbar\omega$ est l'énergie totale, constante, du système.

Application 3 Particule dans un potentiel constant

Soit une particule de masse m possédant une énergie potentielle constante E_{p0} . Donner la forme générale de la fonction d'onde spatiale de cette particule en supposant que son énergie totale est supérieure à E_{p0} .

Solution

L'application de l'équation de Schrödinger stationnaire conduit à : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + E_p \phi = E \phi$ soit encore, en réordonnant l'équation : $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_{p0}) \phi = 0$. Comme le terme entre parenthèses est positif par hypothèse, on peut poser : $\Omega^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_{p0})$. On reconnaît alors une équation de type harmonique déjà étudiée au chapitre 1 : $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \Omega^2 \phi = 0$, et dont les solutions sont de la forme : $\phi(x) = A \cos(x + \varphi)$.

Les constantes A et φ qui interviennent dans la solution se déterminent grâce aux conditions aux limites.

C. Inégalité de Heisenberg

Nous avons vu jusqu'à présent que la description des systèmes microscopiques impliquait un changement radical par rapport à l'approche classique et qu'il fallait abandonner des notions familières comme la trajectoire d'un objet ou encore la possibilité de mesurer l'état d'un système sans le perturber. Une autre conséquence de la description quantique d'un système est l'impossibilité de mesurer simultanément, avec autant de précision que l'on veut, la position et la quantité de mouvement. C'est le sens de l'inégalité de Heisenberg.

C.1. Mesures et incertitudes

On se place toujours dans le cadre d'un problème unidimensionnel d'axe Ox . La position du système est repérée par x et sa quantité de mouvement par :

$$p \equiv p_x = mv_x.$$

Nous avons vu que le module carré de la fonction d'onde $|\psi(x, t)|^2$ du système permet de définir la probabilité qu'il soit en x . Nous avons mis en évidence que cela signifie en particulier que la position x n'est pas certaine. Il y a une incertitude sur la position du système. D'un point de vue mathématique la position du système est distribuée selon la loi de probabilité définie par $|\psi(x, t)|^2$.

On peut donc utiliser les outils statistiques pour calculer par exemple la valeur moyenne de la position $\langle x \rangle$ ou l'incertitude sur la position¹⁰. Le même raisonnement peut se tenir avec la quantité de mouvement du système, sa valeur moyenne $\langle p \rangle$ et son incertitude Δp .

De manière plus intuitive Δx et Δp permettent de quantifier la « précision » avec laquelle on peut déterminer la position d'un système et sa quantité de mouvement (donc sa vitesse). Connaître parfaitement la position d'un système revient à avoir une précision maximale, donc une incertitude nulle.

C.2. Interprétation de l'inégalité de Heisenberg

Définition 3

Les incertitudes sur la position et la quantité de mouvement sont liées de manière très générale par l'inégalité d'Heisenberg : $\Delta x \times \Delta p \gtrsim \hbar / 2$

L'existence d'une valeur minimale, non-nulle, pour le produit des incertitudes implique **qu'on ne peut donc pas connaître simultanément et avec une précision aussi grande que l'on veut la position et la quantité de mouvement d'un système.**

¹⁰ L'incertitude sur la position est définie comme l'écart quadratique moyen :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

qui correspond à la fluctuation statistique autour de la valeur moyenne $\langle x \rangle$.

Remarque : comme cette inégalité porte sur un produit d'incertitudes, il n'est pas question de donner avec précision la valeur minimale. L'important est que cette valeur minimale est de l'ordre de grandeur de la constante de Planck h .

C.3. Mesure de la position d'un faisceau

Pour donner un sens physique à cette inégalité considérons le problème d'un faisceau lumineux de longueur d'onde λ dont on cherche à déterminer la position. Pour cela on utilise une fente de largeur d que l'on interpose sur le trajet du faisceau (fig. 5). Lorsque le faisceau traverse cette fente, la position du faisceau correspond à celle de la fente. La précision avec laquelle la position du faisceau est connue est donc $\Delta x \approx d$.

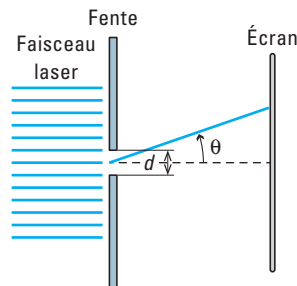


Fig. 5. Faisceau laser diaphragmé.

D'après les relations de de Broglie, la quantité de mouvement des photons de ce faisceau est : $p = h/\lambda$. Cette quantité de mouvement est définie en projection sur l'axe de propagation.

On sait que la traversée de la fente s'accompagne d'un phénomène de diffraction et que le faisceau s'élargit d'un certain angle $\theta \approx \lambda/d$. En particulier les photons acquièrent, après traversée, une quantité de mouvement suivant l'axe perpendiculaire à l'axe de propagation. Il y a donc une dispersion de la quantité de mouvement dans cette direction perpendiculaire : $\Delta p \approx p \sin \theta \approx p \theta$ à la limite des petits angles. On en déduit la relation : $\Delta p \approx p \theta \approx p \lambda / d \approx h / \Delta x$ soit $\Delta p \times \Delta x \approx h \gtrsim \hbar / 2$. On retrouve bien l'ordre de grandeur annoncé pour le produit des incertitudes.

Interprétation : la quantité de mouvement suivant l'axe perpendiculaire à la propagation était connue a priori avant la traversée de la fente (elle est nulle) et elle a été perturbée d'une quantité de l'ordre de $h/\Delta x$ par la mesure.

D. Analyse de quelques systèmes simples

D.1. L'oscillateur harmonique quantique

Nous avons vu dans le chapitre introductif que l'oscillateur harmonique (OH) était caractérisé par une énergie potentielle : $E_p(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$.

L'oscillateur harmonique revêt une importance particulière car de nombreuses situations physiques peuvent se ramener en première approximation à une étude énergétique où l'énergie potentielle est du type harmonique¹¹.

Pour déterminer la fonction d'onde spatiale, il suffit en principe de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire : $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \left(E - \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \phi = 0$. Mais

11. On peut modéliser de nombreux systèmes microscopiques par des oscillateurs harmoniques comme par exemple des noyaux en vibration dans une molécule diatomique ou dans un cristal.

pour quelle valeur de l'énergie? Toutes les valeurs de l'énergie sont-elles permises? On sait par exemple que les énergies atomiques sont distribuées selon des spectres déterminés et que les valeurs des énergies sont quantifiées. C'est également le cas pour l'OH quantique. On peut montrer de manière tout à fait générale que les valeurs d'énergie permises pour un OH de pulsation propre ω sont : $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ où n est un entier naturel. Ce spectre illustré sur la figure 6 ci-dessous. L'énergie de transition entre deux niveaux consécutifs est le quantum $\hbar\omega$.

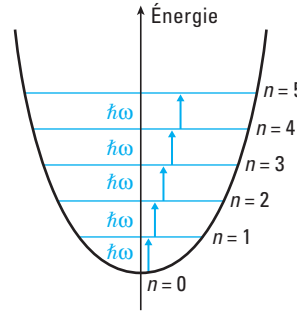


Fig. 6. Spectre énergétique de l'OH quantique.

Comme la résolution exacte de l'OH quantique dépasse largement le cadre de cet ouvrage, nous allons nous placer dans le cadre de l'OH classique à une dimension tel qu'abordé au chapitre 1. Les solutions de l'équation harmonique s'écrivent sous la forme : $x = A \sin(\omega t + \varphi)$. Le mouvement est oscillatoire, sinusoïdal de pulsation ω . A et λ sont deux paramètres dépendant des conditions initiales.

On peut calculer la quantité de mouvement : $p = m\dot{x} = mA\omega \cos(\omega t + \varphi)$.

L'énergie totale de l'OH vaut :

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2.$$

On peut évaluer les valeurs moyennes dans le temps de x , x^2 , p et p^2 :

$$\langle x = 0 \rangle, \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2}A^2 = \frac{E}{m\omega^2} \text{ puis } \langle p \rangle = 0, \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2}A^2 = mE.$$

On en déduit les incertitudes sur x et p :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} \text{ et } \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{mE}.$$

On peut montrer en toute rigueur que les mêmes résultats sont obtenus à partir d'un calcul quantique complet. L'application de l'inégalité d'Heisenberg conduit alors au résultat suivant :

$$\Delta x \times \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \sqrt{\frac{E}{m\omega^2}} \times \sqrt{mE} \gtrsim \frac{\hbar}{2} \text{ soit } E \gtrsim \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Propriété 3

Contrairement au cas classique où l'énergie totale d'un OH peut être annulée (OH au repos), dans le cas quantique il existe une **énergie minimale**¹², égale à $\frac{\hbar\omega}{2}$.

¹² Ce résultat est une conséquence directe de l'inégalité d'Heisenberg qui empêche d'annuler systématiquement énergie cinétique et énergie potentielle, car dans ce cas position et quantité de mouvements de l'OH seraient déterminées avec une précision infinie.

D.2. Particule libre confinée

Nous allons reprendre l'étude d'une particule libre (Application 2) mais confinée dans un puits d'énergie potentielle, que l'on peut schématiser comme sur la figure 7. Le fond du puits est pris constant, égal à zéro (Application 3).

La particule est astreinte à se déplacer entre les positions $x = 0$ et $x = L$. Sa probabilité de présence étant nulle en dehors de ces limites, on doit raisonnablement avoir une annulation de la fonction d'onde en ces deux valeurs particulières.

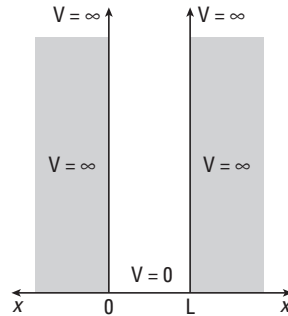


Fig. 7. Puits d'énergie potentielle infini.

Ce problème est analogue à celui d'une corde vibrante de longueur L , de masse m , tendue avec une tension T et dont les extrémités sont maintenues fixes en $x = 0$ et $x = L$. On a alors mis en évidence qu'il existe une infinité de modes propres de vibration dont les pulsations sont quantifiées :

$\omega_n = n\omega_1 = n\pi \frac{v}{2L}$ où v est la vitesse de propagation des ondes mécaniques le long de la corde, $v = \sqrt{\frac{TL}{m}}$.

La longueur d'onde de chaque mode propre est simplement reliée à L par : $\lambda_n = \frac{2L}{n}$. Physiquement pour qu'il y ait vibration il faut qu'une onde qui se propage dans un sens, se réfléchisse à une extrémité et « s'ajoute » constructivement lorsqu'elle parvient à son point de départ avec un autre train d'onde. Le problème est stationnaire.

La résolution du problème de la particule libre confinée se ramène à celle de la corde vibrante : elle passe par l'équation de Schrödinger stationnaire à énergie potentielle nulle pour $0 \leq x \leq L$: $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + E\phi = 0$.

Les résultats de l'Application 3 s'appliquent et on trouve une fonction d'onde spatiale $\phi(x) = A \cos(\Omega x + \varphi)$ avec $\Omega^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} E$ qui doit satisfaire les conditions aux limites suivantes : $\phi(0) = \phi(L) = 0$.

On doit donc résoudre les équations suivantes : $\phi(0) = A \cos(\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = \pm \frac{\pi}{2}$ et $\phi(L) = A \cos(\Omega L + \varphi) = \pm A \sin(\Omega L) = 0 \Rightarrow \Omega L = n\pi$ avec n entier naturel positif. Cet entier est appelé **nombre quantique**.

En convertissant la relation précédente pour faire apparaître l'énergie de la particule on trouve : $\Omega L = n\pi \Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} E = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \Rightarrow E = n^2 \frac{\hbar^2}{8mL^2} \equiv E_n$.

Propriété 4

L'effet du confinement spatial, comme dans le cas de la corde vibrante, conduit à une quantification de l'énergie.

On obtient donc un spectre d'énergie discret : $E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{8mL^2}$.

À chaque valeur E_n de l'énergie correspond une fonction d'onde $\phi_n(x)$, dite *fonction propre*.

Remarque : cette quantification de l'énergie a déjà été vue lors de l'étude des spectres d'émission/absorption des atomes.

L'essentiel

✓ Dualité onde-corpuscule

À une échelle microscopique tout système peut être à la fois considéré comme une onde ou comme un corpuscule.

Aux variables dynamiques (énergie, quantité de mouvement) de la description corpusculaire sont associées une pulsation et une longueur d'onde ou leurs équivalents (période, vecteur d'onde).

✓ Relations de Planck-Einstein et de de Broglie

Les relations entre les descriptions ondulatoire et corpusculaire font intervenir une constante de proportionnalité, la constante de Planck :

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (\hbar = h / 2\pi : \text{constante de Planck réduite})$$

La faible valeur de cette constante indique que seuls les phénomènes à l'échelle microscopique seront affectés par les phénomènes quantiques dont h est une « mesure ».

Relations de Planck-Einstein $\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$.

Relations de de Broglie : $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$.

✓ Interprétation probabiliste

L'état d'un système est décrit par une fonction d'onde $\psi(x, t)$.

En général $\psi(x, t) \in \mathbb{C}$ et seul le module carré de la fonction d'onde a une signification physique.

$|\psi(x, t)|^2$ représente une densité de probabilité de présence.

La probabilité pour que le système soit à l'instant t , dans l'intervalle de longueur dx centré à l'abscisse x est : $dP(x, t) = C |\psi(x, t)|^2 dx$.

✓ Équation de Schrödinger

Une particule de masse m , possédant une énergie potentielle $E_p(x, t)$ est décrite par une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_p \psi$$

L'équation de Schrödinger est l'équivalent du principe fondamental de la dynamique ou seconde loi de Newton en mécanique classique.

✓ Inégalité de Heisenberg

En mécanique quantique il est impossible de connaître simultanément et avec une précision aussi grande que possible la position et la quantité de mouvement d'un système.

Les incertitudes sur la position et la quantité de mouvement ne peuvent pas s'annuler simultanément et vérifient l'inégalité d'Heisenberg :

$$\Delta x \times \Delta p \gtrsim \hbar / 2$$

Cette inégalité a des conséquences sur des systèmes confinés spatialement :

- Existence d'une énergie minimale non nulle pour l'OH quantique :

$$E_{\min} = \hbar\omega / 2$$

- Quantification de l'énergie d'une particule libre confinée :

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Mise en œuvre

Méthode n°1

Propriétés ondulatoires d'un système physique

On s'intéresse à un système physique matériel et l'on veut déterminer s'il est sensible aux effets quantiques, en particulier si l'on peut mettre en évidence ses propriétés ondulatoires.

→ Savoir faire

- ❶ Exprimer la longueur d'onde de de Broglie de l'onde associée au système.
Dans le calcul de la quantité de mouvement on peut être amené à tenir compte des effets relativistes si le système se déplace à une vitesse proche de c , vitesse de la lumière dans le vide.
- ❷ Calculer numériquement sa valeur en faisant attention aux systèmes d'unités (par exemple les énergies sont souvent exprimées en eV ou l'un de ses multiples : MeV, GeV etc.).
- ❸ Comparer cette valeur aux échelles caractéristiques du problème envisagé : dimension du système lui-même ou d'un autre système avec lequel il est en interaction.
Si la longueur d'onde est négligeable par rapport aux dimensions du problème, les effets ondulatoires ne seront pas mis en évidence.

→ Application

Une mouche de masse $m = 5 \text{ g}$ et d'environ $\ell = 1 \text{ cm}$ d'envergure se déplace à une vitesse v de l'ordre de 8 km par heure.

Déterminer si cette mouche peut subir un phénomène de diffraction lors de la traversée d'une porte de $L = 1 \text{ m}$ de largeur.

Solution

- ❶ Pour répondre à la question posée, on doit évaluer la longueur d'onde de de Broglie associée au système considéré, à savoir la mouche : $\lambda = \frac{h}{p}$.

On doit donc commencer par évaluer sa quantité de mouvement. Compte tenu de la faible valeur de la vitesse de la mouche par rapport à c , on peut se placer dans le cadre de la cinématique classique, non-relativiste qui nous indique que : $p = mv$.



Si l'on doit se placer dans le cadre de la cinématique relativiste, on doit introduire le facteur de Lorentz $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$. La quantité de mouvement vaut alors : $p = \gamma mv$.

L'expression littérale de la longueur d'onde de de Broglie en fonction de la masse et de la vitesse du système envisagé est donc : $\lambda = \frac{h}{mv}$.

- ❷ Application numérique : $m = 5 \cdot 10^{-3} \text{ kg}$, $v = 8\,000/3\,600 = 2,22 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

Il vient donc : $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{5 \cdot 10^{-3} \times 2,22} = 5,9 \cdot 10^{-32} \text{ m}$.

Cette longueur est très faible par rapport aux plus petites échelles de longueur connues, comme la taille d'un atome ($\sim 10^{-10} \text{ m}$) ou encore celle d'un noyau ($\sim 10^{-15} \text{ m}$).

- ❸ Cette longueur d'onde est *a fortiori* parfaitement négligeable par rapport à l'ouverture de la porte et à l'envergure de la mouche elle-même. Aucun effet ondulatoire ne peut donc être mis en évidence à cette échelle, en particulier la diffraction d'une mouche qui traverse une porte ! Cette conclusion est d'ailleurs générale pour tous les systèmes macroscopiques.

Contraintes imposées par la relation d'incertitude

On a vu que la relation d'incertitude impose des contraintes sur les incertitudes Δx et Δp qui ne peuvent pas être simultanément arbitrairement petites. On voudrait savoir si cette relation, qui a des implications fortes à l'échelle microscopique, joue un rôle à l'échelle macroscopique.

→ Savoir faire

- ❶ Déterminer les paramètres cinématiques x et p pour le système étudié.
- ❷ Trouver un ordre de grandeur, ou une expression littérale lorsque cela est possible, des incertitudes associées à l'un ou l'autre de ces paramètres. Ces incertitudes peuvent être d'origine expérimentale (résolution d'un instrument, incertitude de mesure etc.) ou théorique (et estimée à partir d'un modèle).
- ❸ Évaluer à partir de l'inégalité d'Heisenberg la relation que doit satisfaire alors l'incertitude sur le paramètre complémentaire (par exemple Δp si on vient de déterminer Δx).
- ❹ Comparer la contrainte obtenue avec un ordre de grandeur réaliste de l'incertitude et conclure quant à la pertinence du rôle joué par l'inégalité d'Heisenberg dans le problème considéré.

→ Application

On considère un grain de poussière de diamètre $d \sim 1 \mu\text{m}$, de masse $m \sim 10^{-15} \text{ kg}$ et se déplaçant à une vitesse v de l'ordre du millimètre par seconde (poussière en suspension dans l'air par exemple). Quelle inégalité doit satisfaire l'incertitude sur la quantité de mouvement de ce grain de poussière si l'on suppose que sa position est connue à $0,01 \mu\text{m}$ près?

Solution

- ❶ La quantité de mouvement de ce grain de poussière se détermine, dans le cadre de la mécanique classique, non-relativiste : $p = mv = 10^{-15} \times 10^{-3} = 10^{-18} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.
- ❷ L'ordre de grandeur de l'incertitude sur la position du grain de poussière est imposé par l'énoncé. Elle correspond à 1 % de la taille typique du grain de poussière ce qui est précis à l'échelle micrométrique. Il peut s'agir d'une contrainte imposée par l'expérience : besoin de mesurer la position au moins au 1 % ou impossibilité de faire mieux du fait de la limite en résolution des appareils de mesure. On a donc $\Delta x = 0,01 \mu\text{m}$.

- ❸ D'après l'inégalité de Heisenberg on trouve que l'incertitude sur la quantité de mouvement de ce grain de poussière doit vérifier : $\Delta p \gtrsim \frac{\hbar/2}{\Delta x} \sim 5 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

On peut calculer l'incertitude relative associée : $\frac{\Delta p}{p} \sim \frac{5 \cdot 10^{-27}}{10^{-18}} = 5 \cdot 10^{-9}$.

- ❹ Cette contrainte intrinsèque, d'origine quantique et fondamentalement toujours présente, est en pratique bien moins restrictive que l'incertitude expérimentale que peut apporter n'importe quel appareil de mesure.

On peut donc conclure, et c'est en général vrai pour les systèmes macroscopiques, que l'inégalité d'Heisenberg n'apporte pas de contrainte forte.

Attention : cela ne signifie aucunement qu'elle n'est pas présente, mais simplement que d'autres sources d'incertitudes interviennent de manière plus importante dans le problème.

Exercices

Niveau 1

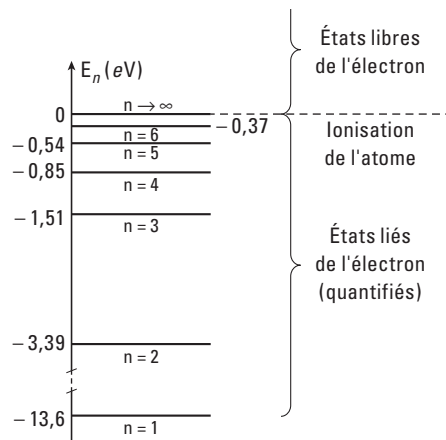
Ex. 1 Vitesses et longueurs d'onde

- 1) Calculer la vitesse d'électrons accélérés sous des différences de potentiel de 1, 10, 100, 10^3 V.
- 2) Calculer la longueur d'onde de de Broglie de l'onde associée à ces électrons.
- 3) (Facultatif) Comment corriger les valeurs obtenues pour des plus grandes valeurs de la différence de potentiel? Reprendre le calcul pour 10^6 V.

Ex. 2 Calculs de longueurs d'onde

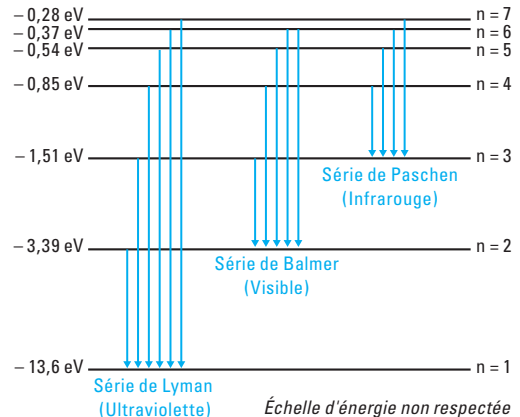
L'atome d'hydrogène est le système atomique le plus simple, constitué d'un proton et d'un électron. Son spectre énergétique est quantifié (programme du second cycle) suivant une loi du type : $E_n = -E_0/n^2$.

Il est représenté sur la figure ci-dessous.



- 1) Identifier sur le schéma le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène.
- 2) Donner la valeur numérique de E_0 en eV.
- 3) Calculer la valeur numérique du produit hc en $\text{eV} \cdot \text{nm}$.
- 4) On rappelle que lorsque l'atome passe d'un état d'énergie E_m à un état d'énergie E_n ($E_m > E_n$), la transition peut s'accompagner de l'émission d'un photon d'énergie $\epsilon = E_m - E_n$. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, les transitions vers le niveau fondamental (resp. le premier état excité) portent le nom de série de Lyman (resp. Balmer).

Calculer les longueurs d'onde des 3 premières raies de chaque série et justifier les domaines de radiation dans lesquelles elles ont été classées dans le schéma ci-dessus.



Ex. 3 Modèle de Bohr

On se propose de reprendre les principales étapes qui ont conduit le physicien Bohr à établir la quantification de l'énergie de l'atome d'hydrogène. Le modèle classique, planétaire, de cet atome consiste à placer l'électron, de masse m , sur des orbites circulaires de rayon r , autour du proton supposé immobile. Bohr est parti de ce modèle et a proposé de quantifier le moment cinétique orbital de l'électron $\sigma_e = rmv$ avec v la vitesse linéaire de l'électron, selon une loi du type : $\sigma_e = n\hbar$ où \hbar est la constante de Planck réduite et n est un entier naturel. On considère dans la suite que le référentiel d'étude, avec le proton pour origine est galiléen.

- 1) Nommer et exprimer les normes des forces qui s'exercent sur l'électron. Faire un schéma. Justifier que l'on peut négliger l'une des forces.

- 2) À partir des lois de Newton, montrer que le mouvement de l'électron est uniforme.

- 3) Exprimer la vitesse de l'électron en fonction du rayon de son orbite : $v = f(r)$.

- 4) Exprimer l'énergie totale de l'atome sachant que l'énergie potentielle d'interaction de l'électron avec le proton est $E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$.

- 5) À l'aide de la quantification de σ_e , établir l'expression de r .

- 6) On appelle rayon de Bohr la longueur : $a_0 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m\pi e^2}$.

Exprimer l'énergie totale de l'atome en fonction de a_0 et conclure.

- 7) Retrouver le spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène : $E_n = -E_0/n^2$. Donner la valeur numérique de E_0 en eV. On donne : $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 \text{ USI}$.

Ex. 4 Examen critique du modèle de Bohr

1) Même si le modèle de Bohr permet de prédire le spectre énergétique de l'hydrogène, il repose sur un certain nombre d'hypothèses remises en cause depuis. Critiquer ce modèle de Bohr en tenant compte de la nature quantique des différents éléments impliqués.

2) On se propose d'évaluer les contraintes apportées par l'inégalité d'Heisenberg dans le cadre du modèle de Bohr. Soit p la quantité de mouvement de l'électron et Δp l'incertitude sur p . On va désigner par Δx l'incertitude sur la position de l'électron. Justifier le fait que pour pouvoir utiliser des trajectoires classiques pour l'électron on doit avoir les inégalités suivantes :

$$\Delta x \ll r \text{ et } \Delta p \ll p.$$

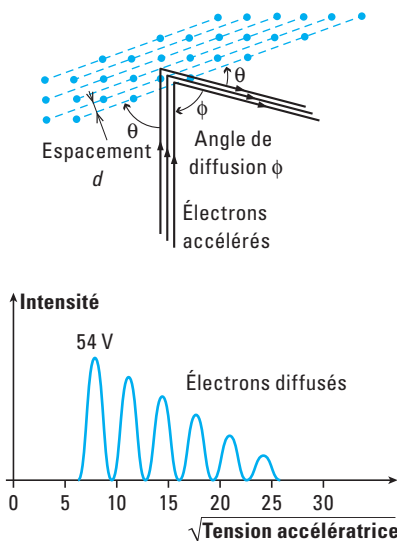
3) Exprimer de deux façons différentes le rapport : $\frac{\Delta x \times \Delta p}{r p}$. Conclure sur la validité du modèle de Bohr.

4) Application numérique. En supposant que le rayon de Bohr soit connu avec une précision de 1 % et que l'électron soit sur une orbite circulaire de rayon $r = a_0$ évaluer l'incertitude sur la vitesse de l'électron. Conclure.

Niveau 2

Ex. 5 Autour de Davisson-Germer

On considère la diffraction des électrons par un cristal ionique telle que décrite dans le cours. Les angles d'incidence et de diffusion sont définis sur la figure ci-dessus. On prendra $\theta = 50^\circ$.



1) Retrouver la position des pics de diffraction en utilisant la loi de Bragg d'interférence constructive : $n\lambda = 2d \sin \theta$.

2) En déduire la valeur de l'espacement d entre plans d'atomes dans le cristal.

Ex. 6 Séparation des variables dans l'équation de Schrödinger

On considère un système quantique décrit par sa fonction d'onde $\psi(x, t)$ et donc l'énergie potentielle est indépendante du temps : $E_p(x)$. On recherche des solutions sous la forme $\psi(x, t) = \phi(x) \times \chi(t)$.

1) Rappeler l'équation de Schrödinger.

2) Montrer que l'on peut séparer les différents termes de cette équation en fonction des variables dont ils dépendent.

3) En déduire que l'on peut mettre $\chi(t)$ sous la forme suivante : $\chi(t) = A e^{-i\omega t}$, où A est une constante d'intégration.

4) Montrer que l'on peut écrire $\psi(x, t) = \phi(x) e^{-i\omega t}$.

5) Que peut-on dire de la densité de probabilité $|\psi(x, t)|^2$? Justifier le fait que l'on parle d'une solution stationnaire alors que $\psi(x, t)$ dépend explicitement du temps.

6) De quelle équation la fonction d'onde spatiale $\phi(x)$ est-elle solution ?

Ex. 7 Fonction propre pour le puits infini

Reprenons l'étude de la particule confinée dans un puits infini d'énergie potentielle (voir figure ci-dessous). Le fond du puits est pris constant, égal à zéro. La particule est astreinte à se déplacer entre les positions $x = 0$ et $x = L$.

1) Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire dans le domaine $x \in [0 ; L]$.

2) Quelles sont les conditions aux limites à considérer ?

3) Résoudre l'équation de Schrödinger en tenant compte des conditions précédentes.

4) Montrer que l'énergie de la particule est quantifiée.

5) Montrer que la fonction d'onde de l'état d'énergie E_n , caractérisé par le nombre quantique n s'écrit :

$$\phi_n(x) = A_n \sin\left(n \frac{\pi x}{L}\right).$$

6) Pour déterminer la constante A_n , on utilise la condition de normalisation : $\int_0^L |\phi_n(x)|^2 dx = 1$. Justifier.

7) Montrer que $\forall n, A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

Solutions des exercices

Exercices de niveau 1

Exercice 1

1) On se replace dans le contexte de l'expérience de diffraction des électrons de type Davisson et Germer (voir Application 1 du cours). On désigne par A et B les points de départ et d'arrivée respectivement des électrons. Les électrons partent sans vitesse initiale du point A. Le poids d'un électron est négligeable par rapport aux forces d'origine électrostatique, comme nous allons le vérifier plus loin. L'application du théorème de l'énergie cinétique ne fait donc intervenir que le travail des forces électrostatiques de A à B :

$$\Delta E_c = \mathcal{W}(\vec{F}_{\text{elec}}) = (-e)\vec{E} \cdot \vec{AB} = e\Delta V$$

ΔV désigne la différence de potentiel appliquée entre A et B. On en déduit que la vitesse finale de l'électron est donnée par : $\Delta E_c = \frac{1}{2}mv^2 = e\Delta V \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2e\Delta V}{m}}$.

Numériquement, $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C soit $v = \sqrt{\frac{2e\Delta V}{m}} = 0,59 \cdot 10^6 \sqrt{\Delta V} \text{ ms}^{-1}$.

d.d.p. (V)	$v_{\text{classique}} (10^6 \text{ ms}^{-1})$	E_c (eV)
1	0,59	1
10	1,9	10
100	5,9	100
1 000	19	1 000

Les vitesses restent faibles par rapport à la vitesse de la lumière dans le vide, $c = 300 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1}$.

Pour valider l'hypothèse faite sur le poids, calculons, en eV, l'énergie potentielle de pesanteur d'un électron en supposant qu'il se déplace avec un dénivelé de $h = 1$ m :

$$E_p = mgh = 9,1 \cdot 10^{-31} \times 9,8 \times \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 5,6 \cdot 10^{-11} \text{ eV}.$$

On valide l'hypothèse consistant à négliger l'effet de la pesanteur.

2) La longueur d'onde associée à l'électron, d'après la relation de de Broglie, vaut quant à elle :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m \sqrt{\frac{2e\Delta V}{m}}} = \frac{h}{\sqrt{2em\Delta V}} = \frac{1,223}{\sqrt{\Delta V}} 10^{-9} \text{ m} = \frac{12,23}{\sqrt{\Delta V}} \text{ \AA}$$

d.d.p. (V)	λ (Å)
1	12,3
10	3,9
100	1,2
1 000	0,39

3) (Facultatif) Si l'on augmente la différence de potentiel, la vitesse des électrons va augmenter et l'approximation non relativiste cessera d'être valable. Il faut alors adopter la cinématique relativiste, en particulier pour l'expression de l'énergie cinétique : $E_c = (\gamma - 1)mc^2$ où $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ est le facteur de Lorentz.



L'expression du théorème de l'énergie cinétique reste identique en mécanique relativiste, une fois l'expression de E_c corrigée.

$$\Delta E_c = (\gamma - 1)mc^2 = e\Delta V \Rightarrow \gamma = 1 + \frac{e\Delta V}{mc^2} \Rightarrow v = \sqrt{1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{e\Delta V}{mc^2}\right)^2}} \times c$$

Le calcul des longueurs d'onde faisant intervenir la quantité de mouvement, il faut également calculer cette dernière en cinématique relativiste, soit $p = \gamma mv$. L'expression littérale de la longueur d'onde devient : $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\gamma mv}$.

Reprenons les tableaux précédents et en rajoutant la valeur demandée (10^6 V). On remarque que la valeur de la vitesse classique obtenue est aberrante.

d.d.p. (V)	$v_{\text{classique}} (10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1})$	E_c (eV)	Relativité ($10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$)	γ	λ (Å)
1	0,59	1	0,59	1	12,26
10	1,9	10	1,9	1	3,88
100	5,9	100	5,9	1	1,23
1 000	19	1 000	19	1,002	0,39
1 000 000	593	1 000 000	282	2,957	0,01

Exercice 2

- 1) Le niveau fondamental de l'hydrogène correspond à l'état de plus basse énergie et donc au plus petit nombre quantique, $n = 1$.
- 2) Sur le schéma on lit $E_0 = 13,6$ eV.
- 3) Le facteur de conversion demandé vaut : $hc = 19,86 \cdot 10^{-26}$ USI soit

$$hc = \frac{19,86 \cdot 10^{-26}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \times 10^9 = 1\,241 \text{ eV} \cdot \text{nm}$$



Les longueurs d'onde sont souvent données en nm et les énergies en eV, d'où ce facteur de conversion pratique.

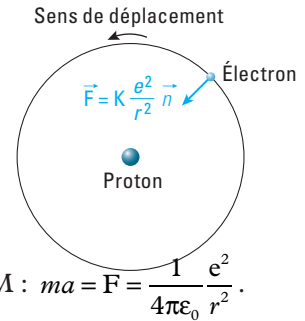
- 4) L'énergie d'un photon émis lors d'une transition $m \rightarrow n$ vaut : $\varepsilon = E_m - E_n = -E_0 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$. Les relations de Planck-Einstein nous indiquent que la longueur d'onde associée à ces photons correspond à : $\lambda = \frac{hc}{\varepsilon}$. En utilisant le facteur de conversion de la question 3) et les énergies en eV on trouve le tableau de valeur suivant :

Série	État départ (m)	État arrivée (n)	Énergie photon (eV)	λ (nm)	Domaine
Lyman	2	1	10,2	121,7	UV
Lyman	3	1	12,09	102,6	UV
Lyman	4	1	12,75	97,3	UV
Balmer	3	2	1,89	656,6	Visible
Balmer	4	2	2,55	486,7	Visible
Balmer	5	2	2,86	433,9	Visible

Exercice 3

- 1) L'électron est soumis à la force électrostatique de la part du proton et à son poids. Ce dernier étant négligeable (voir Exercice 1), on ne retiendra donc que la première.

Schéma des forces en présence. On remarque en particulier que la force électrostatique est systématiquement perpendiculaire à la trajectoire de l'électron. Son travail est donc nul.



2) Soit M le point représentant la position de l'électron. Le mouvement de l'électron est à force centrale (la direction de la force passe en permanence par le point fixe O). Dans ce cas on admet que l'accélération de l'électron

est centripète (dirigée vers O) et vaut: $a = \frac{v^2}{r}$ où r est le rayon de la tra-

jectoire. La seconde loi de Newton s'écrit alors, en projection sur l'axe OM : $ma = F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$.

3) En utilisant les deux relations trouvées à la question précédente, il vient: $m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$ soit la relation demandée entre la vitesse et le rayon: $v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mr}}$.

4) L'énergie totale de l'électron se conserve en l'absence de frottements: $E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$ ce que l'on peut exprimer en fonction du rayon uniquement compte tenu de la question précédente:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = \frac{1}{2} \times \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{2} \times \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}.$$

5) L'énoncé indique que le moment cinétique orbital, défini comme: $\sigma_e = rmv$ est quantifié par Bohr suivant la loi: $\sigma_e = n\hbar$. Ceci nous donne donc une seconde relation entre r et v : $v = \frac{n\hbar}{mr}$. En combinant avec la relation déjà obtenue on trouve:

$$v = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mr}} = \frac{n\hbar}{mr} \text{ soit } r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{me^2} = n^2 \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m\pi e^2}.$$

6) Par définition du rayon de Bohr, l'expression précédente se ramène à: $r = n^2 \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{m\pi e^2} \equiv n^2 a_0$ avec a_0 le rayon de Bohr. Numériquement on calcule $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$. Le principal enseignement de cette formule est que le rayon de la trajectoire de l'électron est quantifié: toutes les valeurs de rayon de trajectoire ne sont pas permises et seuls certains multiples du rayon de Bohr le sont.

7) L'énergie totale étant une fonction de r , on peut l'exprimer en fonction du nombre quantique n :

$$E = -\frac{1}{2} \times \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0} \times \frac{1}{n^2} \equiv -\frac{E_0}{n^2}.$$

$$\text{Numériquement: } E_0 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a_0} = \frac{9 \cdot 10^9}{2} \frac{1,6 \cdot 10^{-19}}{0,529 \cdot 10^{-10}} = 13,6 \text{ eV}.$$

Exercice 4

1) Le modèle de Bohr repose sur une vision classique de l'atome et de ses constituants, le proton et l'électron. C'est un modèle heuristique, qui permet d'obtenir des résultats intéressants sur la quantification de l'énergie par exemple mais qui repose sur des hypothèses fausses puisqu'il néglige la nature quantique des constituants. Notons qu'à l'époque où ce modèle a été proposé la mécanique quantique n'était pas encore née. La première hypothèse qu'il faut rejeter est celle d'une trajectoire pour l'électron et d'une position fixe, l'origine O, pour le proton. On sait que ces entités sont décrites par une fonction d'onde qui indique une probabilité de présence en un point et à un instant donnés. La seconde hypothèse est celle d'une détermination simultanée de la position et de la vitesse (ce que suppose la relation entre r et v de l'exercice précédent). L'inégalité de Heisenberg, ou principe d'incertitude, contredit cette hypothèse. Enfin on pourrait également critiquer, puisqu'elle ne paraît justifiée par aucune hypothèse forte, la forme de quantification proposée par Bohr sur le moment cinétique. La théorie des moments cinétiques en mécanique quantique est en fait plus complexe.

2) L'hypothèse de trajectoire suppose que l'on sache exactement où se trouve l'électron et d'un point de vue classique cela implique que l'on connaît alors exactement sa vitesse, donc sa quantité de mouvement. L'incertitude sur sa position Δx et sur la quantité de mouvement Δp doivent donc être aussi petites que possible, c'est-à-dire en particulier qu'elles doivent être négligeables par rapport aux échelles caractéristiques de ces deux variables, à savoir x et p . On doit donc vérifier, si l'on fait l'hypothèse que l'électron est sur une trajectoire connue, que: $\Delta x \ll r$ et $\Delta p \ll p$.

3) Si l'on forme le rapport $\frac{\Delta x \times \Delta p}{rp}$ en tenant compte de ce qui précède, on trouve que:

$\frac{\Delta x \times \Delta p}{rp} = \frac{\Delta x}{r} \times \frac{\Delta p}{p} \ll 1$. Or d'après l'inégalité de Heisenberg, ce rapport doit aussi vérifier:

$\frac{\Delta x \times \Delta p}{rp} \gtrsim \frac{\hbar}{2rp}$. Comme $p = mv$ et en supposant que l'on puisse appliquer la loi de quantification de Bohr: $\sigma_e = n\hbar = mrv = rp$, on simplifie l'expression précédente selon: $\frac{\Delta x \times \Delta p}{rp} \gtrsim \frac{\hbar}{2n\hbar} = \frac{1}{2n}$. Donc les

deux conditions ne sont compatibles que si $\frac{1}{2n} \ll 1$, donc en pratique que si n est très grand. On voit

que l'inégalité d'Heisenberg interdit bien l'utilisation de modèle classique.

4) Autre illustration de cette incompatibilité avec un modèle classique: supposons que l'électron soit sur l'orbite de rayon $r = a_0$ à mieux que 1 %, l'incertitude absolue sur sa position est donc: $\Delta x = 0,01 \times a_0$. On en déduit que l'incertitude sur sa vitesse devrait être, en tenant compte de l'inégalité de

Heisenberg: $\Delta v = \frac{\Delta p}{m} \gtrsim \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{\hbar}{2m \cdot 0,01 \times a_0} \sim 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. On voit que l'incertitude est de l'ordre de

grandeur de la vitesse de la lumière, ce qui contredit tout à fait l'hypothèse que l'on connaît la vitesse de l'électron sur son orbite.

Exercices de niveau 2

Exercice 5

1) L'analyse de l'expérience de diffraction des électrons montre que l'on obtient des interférences constructives lorsque la condition suivante est réalisée: $n\lambda = 2d\sin\theta$ avec d la distance entre plans d'atomes dans le cristal et θ l'angle de diffusion des électrons. n est un entier naturel.

La figure présentée donne l'intensité observée dans une direction d'observation donnée (donc pour une valeur fixée de l'angle θ) en fonction de la tension (ou d.d.p.) d'accélération.

On constate l'apparition de pics pour certaines valeurs de la tension d'accélération. On sait (voir exercice 1) que la tension d'accélération permet d'ajuster la longueur d'onde de de Broglie associée aux électrons:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m\sqrt{2e\Delta V}} = \frac{h}{\sqrt{2em\Delta V}} = \frac{12,27}{\sqrt{\Delta V}} \text{ \AA}$$

On s'est placé ici dans la limite non relativiste ce qui est raisonnable dans ces conditions expérimentales, avec une tension d'accélération inférieure à 1 000 V (voir exercice 1).

La condition d'interférence de Bragg s'écrit alors: $n \frac{12,27}{\sqrt{\Delta V}} = 2d\sin\theta$ soit $n = \frac{2d\sin\theta}{12,27} \sqrt{\Delta V}$. On constate que la position moyenne des pics croît linéairement avec n lorsque $\sqrt{\Delta V}$ augmente.

2) La détermination du paramètre cristallin se fait en prenant la différence entre plusieurs pics consécutifs. Le premier pic correspond à la tension d'accélération de 54 V ($\sqrt{54\text{V}} = 7,35\text{V}^{1/2}$).

Pour réduire l'erreur systématique de lecture du graphe, on prend en compte le plus grand nombre de pics. Entre le premier et le 6^e pic, on a une variation du paramètre $\sqrt{\Delta V}$ de $18 \text{ V}^{1/2}$. Cela correspond à 5 intervalles entre pics, soit un Δn égal à 5.

$$n_6 - n_1 = 5 = \frac{2d\sin\theta}{12,27} \times 18$$

Le paramètre cristallin vaut donc : $d = \frac{5 \times 12,27}{18 \times 2 \sin \theta}$ soit encore : $d = \frac{1,70}{\sin \theta} \text{ \AA}$. Pour un angle de Bragg $\theta = 50^\circ$ on trouve un paramètre cristallin $d = 2,22 \text{ \AA}$.

Exercice 6

1) L'équation de Schrödinger dépendant du temps s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + E_p(x) \psi(x,t).$$

2) En remplaçant la fonction d'onde complète par la forme proposée dans l'énoncé, dite à variables séparées, on trouve :

$$i\hbar \frac{\partial (\phi(x)\chi(t))}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (\phi(x)\chi(t))}{\partial x^2} + E_p(x) (\phi(x)\chi(t)).$$

Les fonctions $\phi(x)$ et $\chi(t)$ ne dépendant que d'une seule variable, elles ne sont affectées que par les dérivées suivant x et t respectivement.

Par exemple : $\frac{\partial (\phi(x)\chi(t))}{\partial t} = \phi(x) \frac{d(\chi(t))}{dt}$. De même : $\frac{\partial^2 (\phi(x)\chi(t))}{\partial x^2} = \chi(t) \frac{d^2(\phi(x))}{dx^2}$.

L'équation de Schrödinger exprimée en fonction de $\phi(x)$ et $\chi(t)$ devient donc :

$$i\hbar \phi(x) \frac{d(\chi(t))}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi(t) \frac{d^2(\phi(x))}{dx^2} + E_p(x) \phi(x) \chi(t).$$

En supposant que le produit $\phi(x)\chi(t)$ n'est pas systématiquement nul, on simplifie les deux membres de l'équation :

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{d(\chi(t))}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi(x)} \frac{d^2(\phi(x))}{dx^2} + E_p(x) \quad (1)$$

Sous cette forme, il apparaît clairement que les deux membres de l'équation dépendent de deux variables indépendantes différentes : t pour le membre de gauche, x pour celui de droite.

3) Mathématiquement, la seule solution à ce type d'équation c'est que les deux termes soient égaux à une même valeur constante. Du point de vue dimensionnel, cette constante est homogène à une énergie. Posons E cette valeur d'énergie. L'équation en $\chi(t)$ s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{d(\chi(t))}{dt} = E \text{ soit } \frac{d(\chi(t))}{dt} = -i \frac{E}{\hbar} \chi(t).$$

La forme proposée pour la solution $\chi(t) = Ae^{-i\omega t}$ convient à condition que l'on ait : $E = \hbar\omega$. On reconnaît la relation de Planck-Einstein qui permet de faire le lien entre les descriptions ondulatoire et corpusculaire.

4) La constante d'intégration A ne joue aucun rôle particulier dans la question précédente. On peut donc sans souci l'intégrer dans la fonction inconnue $\phi(x)$ et écrire finalement la fonction d'onde totale sous la forme : $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$.

5) La densité de probabilité définie comme le carré du module de la fonction d'onde s'écrit simplement : $\frac{dP(x,t)}{dx} = |\psi(x,t)|^2 = |\phi(x)e^{-i\omega t}|^2 = |\phi(x)|^2$ puisque le module de l'exponentielle complexe est égal à 1. On constate que cette densité de probabilité ne dépend que de x et pas de t . Ceci justifie le fait que l'on parle de solution stationnaire de l'équation de Schrödinger.

6) En exploitant le fait que le membre de droite de l'équation (1) doit évaluer la même valeur de l'énergie E , on retrouve l'expression de l'équation de Schrödinger stationnaire : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi(x)} \frac{d^2(\phi(x))}{dx^2} + E_p(x) = E$ soit encore $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2(\phi(x))}{dx^2} + E_p(x)\phi(x) = E\phi(x)$.

Exercice 7

1) La résolution du problème de la particule libre confinée passe par l'équation de Schrödinger stationnaire à énergie potentielle nulle pour $0 \leq x \leq L$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + E\phi = 0.$$

E désigne l'énergie totale, constante, de la particule.

2) L'énergie potentielle infinie représente une barrière infranchissable pour la particule. Cela implique physiquement que la particule reste bien confinée dans le domaine $0 \leq x \leq L$. Sa probabilité de présence est donc nulle en dehors de ce domaine particulier. Les conditions aux limites sont donc : $\phi(0) = \phi(L) = 0$.

3) L'équation à résoudre est une équation harmonique dont les solutions sont du type :

$\phi(x) = A \cos(\Omega x + \varphi)$ avec $\Omega^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} E$. Les conditions aux limites apportent les deux équations suivantes :

$$\phi(0) = A \cos(\varphi) = 0$$

$$\phi(L) = A \cos(\Omega L + \varphi) = 0$$

Ce qui nous donne :

$\phi(0) = A \cos(\varphi) = 0 \Rightarrow \varphi = \pm \frac{\pi}{2}$ et $\phi(L) = A \cos(\Omega L + \varphi) = \pm A \sin(\Omega L) = 0 \Rightarrow \Omega L = n\pi$ avec n entier naturel positif.

4) En faisant apparaître l'énergie de la particule on trouve : $\Omega L = n\pi \Rightarrow \frac{2m}{\hbar^2} E = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \Rightarrow E = n^2 \frac{\hbar^2}{8mL^2}$. L'énergie est quantifiée. On fait apparaître le nombre quantique n .

5) La fonction d'onde spatiale associée à la valeur n se déduit des questions précédentes :

$$\phi(x) = A \cos(\Omega x + \varphi) = A' \sin(\Omega x) = A' \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

Comme chaque valeur de n génère une fonction d'onde spécifique on adopte la notation proposée dans l'énoncé : $\phi_n(x) = A_n \sin\left(n \frac{\pi x}{L}\right)$.

6) On a vu précédemment que la particule était confinée dans le domaine $0 \leq x \leq L$ et que sa probabilité de présence en dehors de ce domaine était nulle. Ceci implique que la probabilité totale de trouver la particule dans le domaine $0 \leq x \leq L$ est maximale et donc égale à 1.

La probabilité est la somme de toutes les probabilités élémentaires ou densité de probabilité.

Mathématiquement cela se traduit par la relation : $\int_0^L |\phi_n(x)|^2 dx = 1$.

7) On peut effectuer le calcul explicite de l'intégrale précédente :

$$\int_0^L |\phi_n(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^L A_n^2 \sin^2\left(n \frac{\pi x}{L}\right) dx = 1$$

La constante A_n^2 peut sortir de l'intégrale et il ne reste plus qu'à évaluer la quantité $\int_0^L \sin^2\left(n \frac{\pi x}{L}\right) dx$.

On effectue le changement de variable : $y = n \frac{\pi x}{L}$, $dx = L \frac{dy}{n\pi}$ pour se ramener à :

$$\int_0^{n\pi} \sin^2(y) L \frac{dy}{n\pi} = \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2(y) dy = \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \frac{1 - \cos 2y}{2} dy = \frac{L}{2n\pi} \int_0^{n\pi} dy - \frac{L}{2n\pi} \int_0^{n\pi} \cos 2y dy.$$

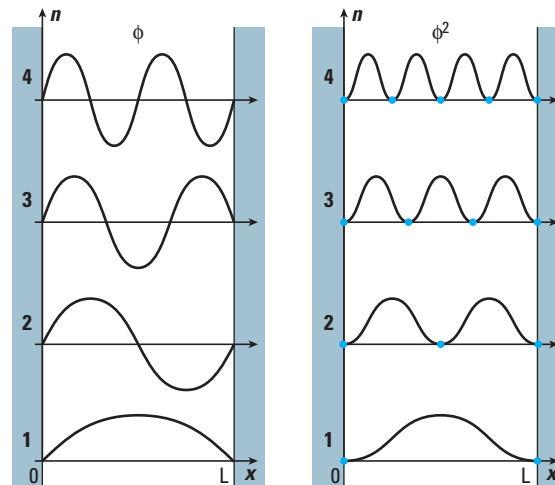
La première des deux intégrales vaut simplement $\frac{L}{2n} \times n = \frac{L}{2}$. La seconde est nulle du fait de la 2π -périodicité des fonctions trigonométriques.

En repartant de la condition de normalisation on trouve le résultat final :

$$\int_0^L A_n^2 \sin^2\left(n \frac{\pi x}{L}\right) dx = 1 \Rightarrow A_n^2 \int_0^L \sin^2\left(n \frac{\pi x}{L}\right) dx = 1 \Rightarrow A_n^2 \times \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad \forall n.$$

On a ainsi déterminé complètement la fonction d'onde spatiale pour une particule confinée dans un puits d'énergie potentielle : $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi x}{L}\right)$. Cette fonction d'onde a la bonne normalisation, conduisant à des probabilités de présence bornées à l'unité.

La représentation graphique des fonctions d'onde et des densités de probabilité de présence pour les premières valeurs de n est donnée sur la figure suivante :



Les points bleus sur les densités de probabilité représentent les points où la densité de probabilité est toujours strictement nulle à tout instant. Ce sont des nœuds de probabilité de présence à l'instar des nœuds de vibration dans le cas de la corde vibrante.

Approche documentaire 1

À propos de l'effet photoélectrique

Une pile photovoltaïque facile à faire !!!
Science & Vie N°858, Mars 89, page 138,
Renaud de la Taille

Il y a maintenant 150 ans, Edmond Becquerel – le père d'Henri qui découvrit la radioactivité – imagina la spectrographie, et fut aussi le premier à expérimenter sur les photopiles... Mais les résultats de ses expériences ne furent publiés que 30 ans plus tard dans un ouvrage, depuis longtemps épuisé, qui avait pour titre : La lumière, ses causes et ses effets.

En fait, il s'agissait surtout des effets de la lumière sur les courants électriques : selon les cas, elle peut modifier la résistance d'un conducteur au passage de l'électricité ou faire apparaître un potentiel, réalisant la conversion directe de la lumière en courant. Le premier phénomène, la photoconduction, est d'emploi courant dans les cellules des appareils photographiques, le second dans les cellules solaires.

Ce qu'on sait moins, c'est que la découverte des effets photoélectriques allait mener à des difficultés d'interprétation théorique bien gênantes ; et c'est pour échapper à ces difficultés qu'Einstein a émis l'hypothèse des photons (1905) en appliquant la théorie des quanta à l'énergie rayonnante. Cette explication de l'effet photoélectrique lui valut par la suite le prix Nobel de physique.

Les premières expériences de Becquerel consistèrent à diriger un faisceau de rayons solaires sur deux liquides réagissant l'un sur l'autre et superposés avec soin dans un récipient en verre ; si l'on plongeait deux lames de platine dans chacun des liquides, on observait alors le passage d'un courant en les reliant à un galvanomètre très sensible.

Il améliora les résultats en divisant en deux compartiments une cuve opaque dont seule la face avant était transparente ; il la sépara en deux par une fine membrane opaque et poreuse, puis remplit la cuve d'une solution acide ou alcaline ; enfin il disposa une électrode de platine - préalablement portée au rouge - dans chaque compartiment. Dès qu'un rayon de soleil atteignait l'électrode au travers de la face vitrée de la cuve, le galvanomètre branché aux deux bornes indiquait le passage d'un courant.

Pour la confection des électrodes, il essaya successivement de l'or, de l'argent, du laiton : le résultat ne changeait pas ; en revanche il augmenta la tension délivrée en utilisant des lames de laiton ou de platine recouvertes sur une face de chlorure, de bromure ou d'iodure d'argent fraîchement préparés. À la suite de ces expériences, Becquerel fabriqua un actinomètre électrochimique qui peut être considéré comme l'ancêtre des cellules photoélectriques.

À la base de l'effet photoélectrique, il y a une expérience d'électrostatique ancienne et facile à reproduire : une plaque de zinc est fixée à la tige d'un électroscope (Physique Amusante d'avril 1978, Science & Vie n° 727) et on la charge par influence, positivement ou négativement ; les feuilles de l'électroscope s'écartent. Si on éclaire ensuite le zinc avec une lumière ayant de l'ultraviolet (arc électrique par exemple), on voit que la plaque se décharge si elle était chargée négativement, et qu'elle conserve sa charge dans le cas contraire.

Cette expérience, répétée de nombreuses fois avec toutes sortes de métaux et de radiations lumineuse, a mené à l'énoncé suivant : les solides, éclairés par des radiations lumineuses de fréquence convenable, laissent échapper des charges négatives qui sont en fait des électrons ; on donne le nom d'effet photoélectrique à tous les phénomènes dans lesquels des électrons sont déplacés sous l'action de la lumière.

Dans la photoconduction, ces déplacements de charges accélèrent ou permettent le passage du courant, ce qui équivaut à une modification de la résistance électrique du matériau ; dans la photo-émission, les électrons sortent de la matière pour se propager dans le vide ou dans un gaz. Dans les deux cas, un fait avait vite intrigué les chercheurs : ces effets électriques ne pouvaient s'expliquer par la seule théorie ondulatoire et continue de la lumière.

Ainsi, l'émission photoélectrique est quasi instantanée même avec des énergies lumineuses très faibles alors que la théorie ondulatoire voudrait qu'il faille attendre des dizaines de minutes ou des heures pour que l'énergie accumulée dans l'atome soit suffisante pour en chasser un électron. Pour avoir une interprétation cohérente du phénomène, Einstein introduisit en 1905 la notion de photon.

Dans cette théorie, l'émission lumineuse doit être considérée comme discontinue, au même titre que les balles d'une rafale de mitrailleuse. Les grains d'énergie ainsi émis, ou photons, serrés dans l'espace, serrés dans le temps, donnent une illusion d'émission continue qui s'accorde avec l'impression que donne un écran uniformément éclairé.

On admet en outre que chaque photon contenu dans une radiation de fréquence f possède une énergie hf proportionnelle à cette fréquence ; h est la constante de Planck qu'on retrouve dans toute la mécanique quantique. Dans le cas du phénomène photoélectrique, l'énergie apportée par un photon sert d'abord à extraire un électron du métal, puis à lui communiquer une certaine vitesse v . Si e est la charge de l'électron, m sa masse et V le potentiel d'extraction, on a :

$$hf = eV + \frac{1}{2}mv^2.$$

Si le rayonnement est tel que hf est inférieur à eV , l'équation précédente n'a pas de solution et aucun électron n'est arraché : c'est le seuil photoélectrique auquel se heurtait aussi la théorie ondulatoire, laquelle voulait qu'en y mettant le temps l'atome reçoive assez d'énergie pour expulser un électron ; l'expérience prouvait que ce n'était pas le cas. L'interprétation des lois de la photoélectricité constitua une des confirmations de la théorie des quanta.

La transformation de l'énergie rayonnante – en l'occurrence rayonnement électromagnétique – peut donc se faire directement comme l'avait constaté Becquerel ; le dispositif qu'il avait inventé a reçu le nom de pile photovoltaïque. C'est un montage métal-électrolyte-métal symétrique, qui ne donne aucun potentiel dans l'obscurité mais qui peut débiter un courant quand l'une des électrodes est éclairée.

En fait, d'une manière plus générale, il y a production d'électricité lorsqu'un éclairage convenable tombe sur la surface de séparation de deux milieux différents dont l'un au moins est un conducteur ionique (sels dissous ou fondus) ou un semi-conducteur. C'est le cas, par exemple, de lames d'or dans une solution d'acide chlorhydrique (conducteur ionique), ou d'oxyde cuivreux formé sur une lame de cuivre (semi-conducteur) dans de l'eau salée. [...]

Analyse du document

- 1) Quelles sont les principales caractéristiques de l'effet photoélectrique relevées dans le document ?
- 2) Quelles sont les limites de l'interprétation ondulatoire classique vis-à-vis de l'effet photoélectrique ?
- 3) En quoi l'hypothèse de photons d'A. Einstein remet-elle en cause la physique classique ?

Approche documentaire 2

À propos des ondes de matière

Des ondes de matière pour tester les lois de l'Univers

Pour la science n° 409, novembre 2011, page 106,

Rémi Geiger, Vincent Ménoret, Philippe Bouyer

Les atomes se comportent parfois comme des ondes, que l'on peut faire interférer. Cette propriété offre de nouveaux outils plus précis pour mesurer la gravité, se repérer en vol ou éprouver la théorie... d'Einstein.

La matière est une onde et les ondes sont composées de particules (photons pour la lumière, phonons pour le son) : c'est un des principes clefs de la mécanique quantique. Il prédit qu'à toute particule on peut associer une onde, et réciproquement. Ainsi, de même qu'on peut faire interférer des photons, mettant ainsi en évidence leur caractère ondulatoire, il est possible de réaliser des interféromètres avec des particules de matière.

Les physiciens américains Clinton Davisson et Lester Germer en ont fait la première démonstration en 1927 en reproduisant avec des électrons l'expérience des fentes de Young : un faisceau d'électrons est dirigé vers deux fentes très fines et très rapprochées. Derrière les fentes, un détecteur enregistre les points d'impact des électrons. Dans le cas de corpuscules, on s'attendrait à observer l'image des deux fentes sur l'écran, c'est-à-dire deux lignes. Or on obtient un tout autre résultat. Les impacts se répartissent selon un motif périodique – un interférogramme –, qui ne peut s'expliquer que par un phénomène d'interférences, et donc un comportement ondulatoire des électrons (fig. ci-après). Depuis cette preuve de principe, des interférences ont été observées avec des neutrons, des atomes et, récemment, des molécules organiques comportant plusieurs centaines d'atomes, confirmant que la mécanique quantique est encore valable à l'échelle macroscopique.

Cependant, mettre en évidence le comportement ondulatoire de la matière n'est pas chose aisée. Dans les conditions habituelles, la longueur d'onde associée aux particules – la longueur d'onde de de Broglie, inversement proportionnelle à la vitesse et à la masse de la particule – est très faible (environ 0,1 nanomètre pour un atome d'hélium se déplaçant à une vitesse de 1 000 mètres par seconde). À une telle longueur d'onde, les phénomènes ondulatoires – les figures d'interférences – sont tellement faibles qu'ils sont masqués par le comportement corpusculaire.

Depuis près de 25 ans, on refroidit des gaz d'atomes à des températures extrêmement basses, de l'ordre de quelques millièmes de degré au-dessus du zéro absolu. Ces « atomes froids » se déplaçant lentement, leur longueur d'onde de de Broglie augmente, et les interférences deviennent détectables. Loin d'être une simple curiosité quantique, ces ondes de matière ont de nombreuses applications, à la fois parce qu'elles sont de formidables outils pour sonder la matière à l'échelle atomique, et parce qu'elles permettent de concevoir des instruments de mesure d'une grande précision, telles des horloges atomiques qui mesurent la seconde avec 17 chiffres significatifs.

Un des principaux champs d'application des interféromètres à atomes froids, ou interféromètres atomiques, est la réalisation de senseurs inertiels, qui mesurent des accélérations ou des rotations. Depuis quelques années, les applications de ces senseurs se multiplient, dans des champs aussi variés que la mesure des variations de la gravité terrestre en fonction des marées, la navigation ou la vérification, avec une précision inégalée, de questions de physique fondamentale, tel le principe d'équivalence d'Einstein. Avant de nous intéresser à ces diverses applications, examinons le principe de fonctionnement d'un senseur inertiel.

à nous fournir

Analyse du document

- 1) Quels phénomènes sont mis en évidence par l'expérience des fentes d'Young?
- 2) Quelle est l'originalité de l'expérience de Davisson et Germer?
- 3) Comment caractériser les ondes de matière? Peut-on toujours mettre facilement en évidence le caractère ondulatoire des ondes de matière?
- 4) Proposer une méthode pour utiliser les propriétés ondulatoires de la matière en capteur inertielle.