Pourquoi enseigner la mécanique quantique en tronc commun de l'X ?

Révolution conceptuelle

Une particule est à la fois un corpuscule et une onde

Remise en cause des concepts de « bon sens »: trajectoires, mesures

Révolution technologique

Plus de 50% du PIB des pays développés découle directement de la technologie à base quantique

Composants électroniques, lasers, nucléaire, systèmes d'imagerie, …

Démarche, outils et buts du cours

Point de départ : expériences « fondatrices »

Interférences de particules matérielles, effet tunnel

Les outils mathématiques

Distributions de probabilité,
Transformation de Fourier
Algèbre linéaire

Perspectives

Expliquer des points fondamentaux comme la stabilité de la matière, la radioactivité, la liaison chimique

Comprendre le fonctionnement de dispositifs *high tech* comme le laser, le microscope à effet tunnel, l'imagerie par résonance magnétique

Le cours de mécanique quantique

Cours en amphi :
Philippe Grangier & Jean Dalibard

J-L Basdevant, J. D.

Petites classes :
Francis Bernardeau
Ulrich Bockelmann
Fabien Bretenaker
Antoine Browaeys
Michel Brune
Frédéric Daigne
Mathieu de Naurois
Marc Oliver Goerbig
Riad Haïdar
Thierry Mélin
Luca Perfetti
Pierre Vanhove

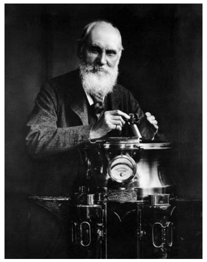
Un CD-rom : illustrations et simulations du cours, Manuel Joffre

Une page web : http://www.lkb.ens.fr/~dalibard/PHY311.htm

QCM : en ligne le mercredi matin, réponse avant le lundi suivant 23h59
https://www.enseignement.polytechnique.fr/profs/physique/Manuel.Joffre/qcm/index.php

Onde ou corpuscule ? La particule quantique dans l'espace libre

Chapitre 1 et début du chapitre 2



1.

Des nuages de Lord Kelvin à l'onde de Louis de Broglie

Les deux nuages de Lord Kelvin

27 avril 1900, Lord Kelvin :
« La beauté de la théorie dynamique, qui pose que la chaleur et la lumière sont des modes de mouvement, est actuellement obscurcie par deux nuages… »

Détection du mouvement de la terre par rapport à l'éther ?

Résultat négatif de l'expérience de Michelson et Morley

théorie de la relativité

technologie nucléaire

abandon de la notion de temps absolu

Equipartition de l'énergie à l'équilibre thermodynamique ?

Gaz de molécules, rayonnement du corps noir

mécanique quantique

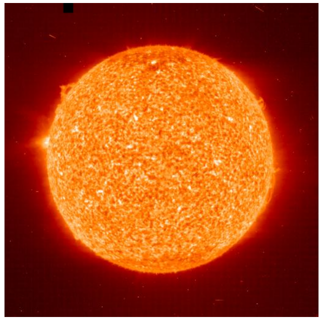
électronique & lasers

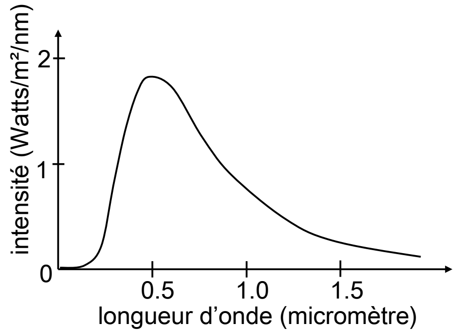
abandon du déterminisme

Le rayonnement du « corps noir »

Lumière émise par un corps matériel quand il est en équilibre thermique à la température *T*

Exemple : la surface du soleil

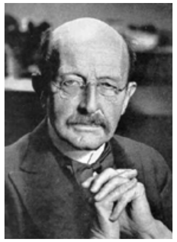




Courbe universelle, ne dépendant que de *T*, que la physique classique ne sait pas expliquer

Les premiers quanta : Planck (1900)

Explique le rayonnement du corps noir en faisant l'hypothèse que des oscillateurs mécaniques chargés, de fréquence ν, ne peuvent émettre ou absorber l'énergie lumineuse que par quantités discrètes



$$\Delta E = nh\nu = n\hbar\omega \qquad \omega = 2\pi\,\nu$$

$$h \simeq 6.63\ 10^{-34}\,\mathrm{Js} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \simeq 1.05\ 10^{-34}\,\mathrm{Js}$$

Le photon d'Einstein (1905)

La lumière elle-même a des propriétés quantiques.
Pour une lumière de pulsation ω et de vecteur d'onde $\vec{k}$, le quantum de rayonnement (baptisé « photon » par Lewis en 1926) a une énergie et une impulsion:

$$E = \hbar\omega \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- Cette nature granulaire est-elle en contradiction avec une équation d'onde qui est continue (Maxwell) ?
- Comment comprendre cette dualité des propriétés de la lumière qui peuvent être à la fois ondulatoires (expériences des fentes d'Young) et corpusculaires?
- Cette dualité existe-t-elle également pour les particules matérielles ?

L'hypothèse de Louis de Broglie (1923)

A toute particule matérielle de masse m et d'impulsion $p=mv$, on peut associer une onde de vecteur d'onde

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

soit une longueur d'onde

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$ ou encore $$\lambda = \frac{h}{p}$$

Einstein à Langevin:
« Le travail de Louis de Broglie m'a grandement impressionné.
Il a soulevé un coin du grand voile […] Si vous le voyez, veuillez lui témoigner toute mon estime et ma sympathie. »

2.

Les ondes de matière et leurs interférences

$\overbrace{\hspace{10em}}^{\text{diffraction d'électrons 1927}}$

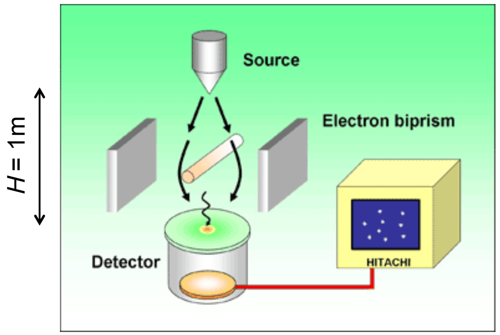
Davisson & Germer

George Thomson

prix Nobel 1937

Expériences d'interférences avec des électrons

A. Tonomura et son équipe
Hitachi Research Laboratory

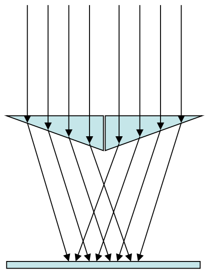


énergie E = 50 keV
vitesse v = c/4

10 électrons par seconde

filament de diamètre de l'ordre de 1mm

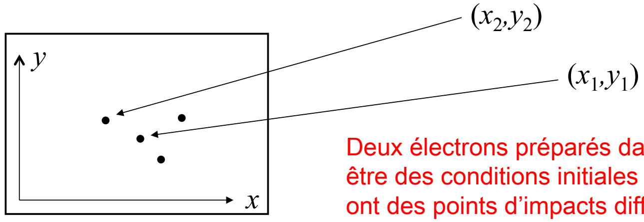
dispositif voisin de l'expérience du « bi-prisme » de Fresnel



La détection des électrons

Un électron est détecté en un point de l'écran, et pas sur une tache étendue : particule ponctuelle

Le point d'impact (x,y) d'un électron donné semble aléatoire.



Deux électrons préparés dans ce qui paraît être des conditions initiales identiques ont des points d'impacts différents.

La fonction d'onde et son interprétation probabiliste

Principe 1:

La description complète de l'état d'une particule de masse m dans l'espace à l'instant t se fait au moyen d'une fonction d'onde complexe :

$\psi(\vec{r}, t)$: fonction continue des variables d'espace $\vec{r} = (x, y, z)$

La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un volume d^3r entourant le point $\vec{r}$ est :

$$d^3P = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, d^3r$$

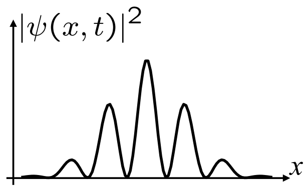
ψ : amplitude de probabilité

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, d^3r = 1$$

fonction d'onde « normée »

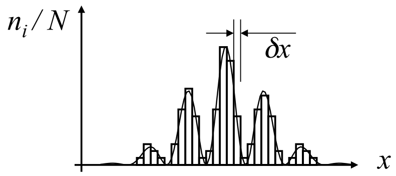
Interprétation probabiliste

On prépare successivement N particules, toutes dans la même fonction d'onde $\psi(x, t)$



Pour chaque particule, on fait une mesure de position avec un détecteur de résolution spatiale δx, et on fait un histogramme des résultats :

n_i : nombre d'atomes détectés dans le canal i

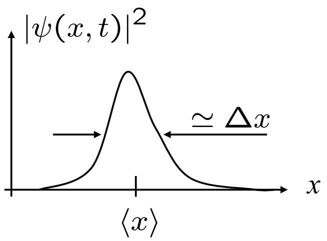


On pourra reconstruire $|\psi(x, t)|^2$ avec une bonne précision si $N >> 1$

Valeur moyenne et écart type

Position moyenne :

$$\langle x \rangle = \int x \, |\psi(x, t)|^2 \, dx$$



Variance : $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2$

avec $\langle x^2 \rangle = \int x^2 \, |\psi(x, t)|^2 \, dx$

Ecart-type: $\Delta x = \sqrt{\Delta x^2}$

Point-clé du principe 1

« La description **complète** de l'état d'une particule de masse m dans l'espace à l'instant t se fait au moyen d'une fonction d'onde »

La fonction d'onde contient toute l'information disponible : il n'y a pas d'autre élément dans le formalisme quantique qui pourrait permettre de savoir, avant de faire la mesure, où la particule va être détectée.

Le caractère probabiliste et aléatoire ne résulte pas d'une mauvaise connaissance des conditions initiales (comme en théorie cinétique des gaz par exemple), mais fait partie intégrante du formalisme quantique.

Einstein (« Dieu ne joue pas aux dés ») s'opposait à ce rôle central de l'aléatoire au sein de la théorie quantique.

Point-clé du principe 1 (suite)

« La fonction d'onde est une **amplitude** de probabilité… »

Si ψ_1 et ψ_2 sont deux fonctions d'onde possibles, correspondant aux lois de probabilité $P_1=|\psi_1|^2$ et $P_2=|\psi_2|^2$, alors

$$\psi \propto \psi_1 + \psi_2$$

est également une fonction d'onde possible, correspondant à la loi

$$P = |\psi|^2 \propto P_1 + P_2 + \underbrace{\psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*}_{\text{Interférences !}}$$

Principe de superposition

Ce principe sera essentiel quand on étendra le formalisme
à un système physique quelconque

3.

L'équation de Schrödinger

(particule libre)

Quelle équation pour cette onde ?

Equations de Maxwell dans l'espace libre : 6 fonctions réelles

$\vec{E}(\vec{r},t),\ \vec{B}(\vec{r},t)$ telles que $\vec{\nabla}\cdot\vec{E}=0,\ \vec{\nabla}\cdot\vec{B}=0$ avec

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\vec{E}\\ \vec{B}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^2\,\vec{\nabla}\times\vec{B} \\ -\vec{\nabla}\times\vec{E}\end{pmatrix}$$

On va chercher de même une équation pour ψ sous la forme:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = F(\psi)$$

où $F(\psi)$ fait intervenir ψ et/ou ses dérivées par rapport aux variables d'espace x,y,z.

Une piste pour chercher l'équation d'onde

On va utiliser la « relation de dispersion » qui relie :

- la fréquence et le vecteur d'onde $\omega \longleftrightarrow \vec{k}$

ou, d'une manière équivalente :

- l'énergie et l'impulsion $E \longleftrightarrow \vec{p}$

sachant que le lien onde-corpuscule se fait par: $E=\hbar\omega \qquad \vec{p}=\hbar\vec{k}$

	Lumière	Matière
Corpuscule	$E = cp$ Einstein	$E = \dfrac{p^2}{2m}$
Onde	$\omega = ck$	$\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ de Broglie

Une piste pour chercher l'équation d'onde (suite)

On veut que l'onde plane progressive $\psi(\vec{r},t) = \psi_0 \, e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)}$

avec $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ soit solution de $\dfrac{\partial \psi}{\partial t} = F(\psi)$

où $F(\psi)$ fait intervenir ψ et/ou ses dérivées par rapport à x,y,z.

Pour l'onde plane progressive, on a : $\dfrac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\,\psi = -i\dfrac{\hbar k^2}{2m}\,\psi$

et il faut donc : $-i\dfrac{\hbar k^2}{2m}\,\psi = F(\psi)$

Sachant que gradient et laplacien vérifient :

$$\vec{\nabla}\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = i\vec{k}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \Delta\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\right) = -k^2\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

une possibilité simple apparaît : $F(\psi) = i\dfrac{\hbar}{2m}\,\Delta\psi$

L'équation de Schrödinger

Imposer aux ondes de de Broglie d'être solutions de l'équation d'onde conduit donc au choix :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i\frac{\hbar}{2m}\,\Delta\psi$$

On multiplie les deux membres par $i\hbar$ et on arrive au :

Principe 2

Si la particule est dans le vide et ne subit aucune interaction, la fonction d'onde satisfait l'équation aux dérivées partielles

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

Points-clé du principe 2

⇨ Conservation de la norme :

en utilisant $\dfrac{\partial \psi}{\partial t} = i\dfrac{\hbar}{2m}\,\Delta\psi$ et $\dfrac{\partial \psi^*}{\partial t} = -i\dfrac{\hbar}{2m}\,\Delta\psi^*$

on vérifie que $\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int |\psi(\vec{r},t)|^2\, d^3r = 0$

Essentiel pour l'interprétation de $|\psi|^2$ comme une densité de probabilité

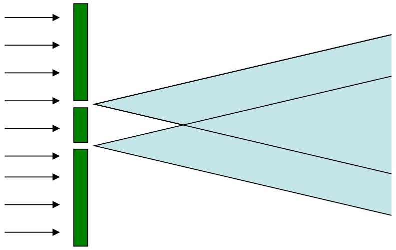
⇨ Les ondes planes de de Broglie

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_0\, e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)} = \psi_0\, e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar}$$

sont solutions de l'équation de Schrödinger, mais ne sont pas normalisées : cas limite d'une onde normalisée très étalée (comme en électromagnétisme).

Points-clé du principe 2 (suite)

Traitement quantitatif du phénomène d'interférence



principe de superposition

La résolution numérique exacte de $\dfrac{\partial \psi}{\partial t} = i\dfrac{\hbar}{2m}\,\Delta\psi$ avec les conditions aux limites appropriées (en particulier ψ nulle sur l'écran hormis les deux trous) rend bien compte du phénomène observé :

⇨ Diffraction par chacune des fentes

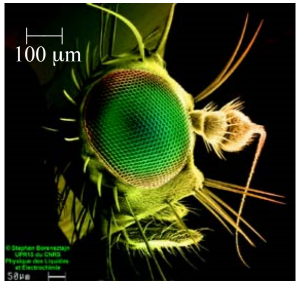
⇨ Valeur de l'interfrange dans la zone de recouvrement

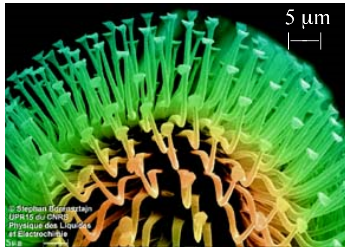
Utilisation des ondes de de Broglie (I)

Le pouvoir de résolution d'un microscope est limité par la longueur d'onde qu'on utilise : en lumière visible, une fraction de micromètre.

Microscope électronique : avec des « rayons électroniques » de longueur d'onde beaucoup plus courte, on peut voir des détails beaucoup plus fins qu'avec un microscope optique.

$E_{\mathrm{cin}} = 150$ eV $\qquad v = 7\ 10^6$ m/s $\qquad \lambda = 1$ Å



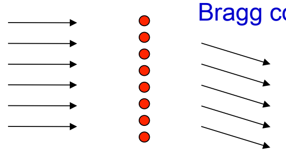


S. Borensztajn, CNRS

Utilisation des ondes de de Broglie (II)

Utilisation de particules (ex: électrons, neutrons) dont la longueur d'onde est bien ajustée à l'échelle de longueur qu'on veut sonder

Diffraction de Bragg cohérente



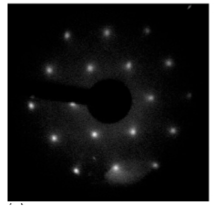
cristal de période de quelques angströms

$\lambda = 1$ Å

électrons : $v = 7.3\ 10^6$ m/s $\quad E = 150$ eV

neutrons : $v = 4000$ m/s $\quad E = 0.1$ eV

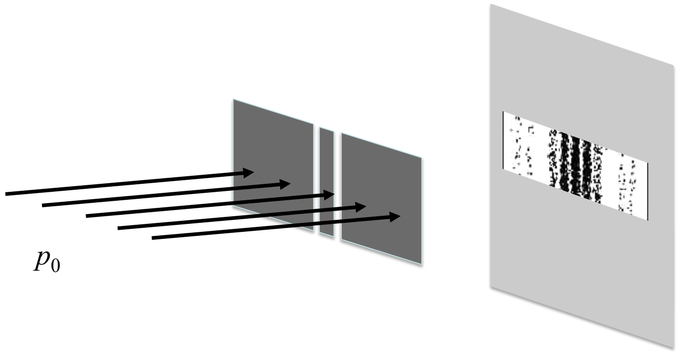
diffraction d'une couche d'atomes de potassium sur du graphite



Penn. State University, PRB 70, 245407 (2007)

4.

Peut-on savoir par quelle fente passe chaque particule ?



Les implications d'une information sur le chemin suivi

Une telle information, si elle était disponible, « ruinerait » la logique de la théorie relativement simple que nous sommes en train de construire.

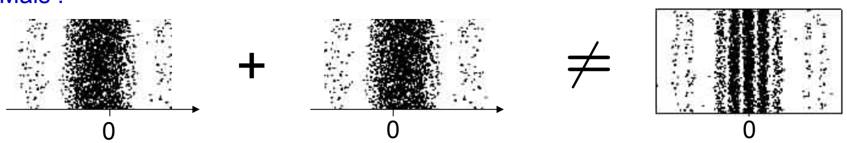
Si la fente 1 seulement est ouverte, on n'observe pas d'interférences, seulement de la diffraction.

Même conclusion si on ouvre seulement la fente 2

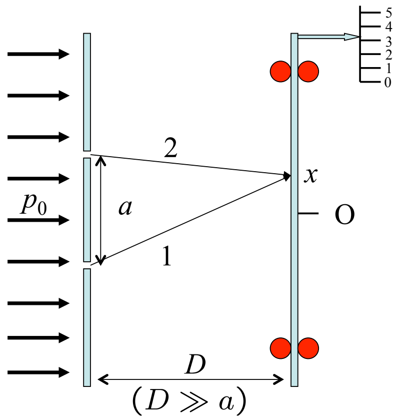
Si on pouvait savoir par quelle fente passe chaque particule, on pourrait classer chaque événement de détection dans une des deux catégories :

- ⟶ la particule est passée à gauche (figure ci-dessus),
- ⟶ la particule est passée à droite (même figure décalée de a).

Mais :



Une tentative pour détecter le chemin suivi



On mesure simultanément le point d'impact x de la particule et la direction du recul de l'écran le long de l'axe $\mathrm{O}x$

Chemin 1 : $p_x^{(1)} = p_0 \dfrac{x + \frac{a}{2}}{D}$

Chemin 2 : $p_x^{(2)} = p_0 \dfrac{x - \frac{a}{2}}{D}$

Différence entre les impulsions de recul : $p_x^{(1)} - p_x^{(2)} = \dfrac{a p_0}{D}$

Comment distinguer entre les deux chemins ?

Pour distinguer entre les deux événements :
« la particule passe par la fente 1 »
« la particule passe par la fente 2 »
il faut connaître l'impulsion de l'écran avant chaque détection avec une précision :

$$\Delta p_{x,\text{ecran}} \ll \frac{a p_0}{D}$$

Pour observer les franges d'interférence, il faut positionner l'écran avant chaque détection avec une précision :

$$\Delta x_{\text{ecran}} \ll \text{interfrange} = \frac{\lambda D}{a}$$

$$\lambda = \frac{h}{p_0} \quad \Longrightarrow \quad \Delta x_{\text{ecran}} \; \Delta p_{x,\text{ecran}} \ll h$$

L'inégalité de Heisenberg au secours de notre théorie

Nous verrons dans la suite qu'il est impossible de préparer un système (particule, écran, …) dans un état où les précisions de notre connaissance de sa position et son impulsion sont simultanément arbitrairement bonnes.

Plus précisément : $\Delta x \; \Delta p_x > \dfrac{\hbar}{2}$

Mettre l'écran sur roulettes ne permet donc pas de connaître le chemin suivi tout en observant des franges d'interférence.

En physique quantique plus qu'ailleurs, il importe de préciser parfaitement le protocole expérimental envisagé :

- on peut faire une expérience où on sait par quelle fente passe la particule,
- on peut faire une expérience où on voit des interférences,

mais on ne peut pas faire les deux à la fois…

Physique d'une particule ponctuelle libre

	Mécanique classique	Mécanique quantique
caractéristiques intrinsèques	masse m charge q	masse m charge q
Etat de la particule	position $\vec{r}(t)$ impulsion $\vec{p}(t)$	fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$
Equation du mouvement	$\dfrac{d\vec{r}}{dt} = \dfrac{\vec{p}}{m}$ $\dfrac{d\vec{p}}{dt} = 0$	$i\hbar \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$
Type de connaissance	déterministe $\vec{r}, \; \vec{p}$	aléatoire $d^3P = \lvert\psi(\vec{r}, t)\rvert^2 \; d^3r$