

Chapitre II : Dualité onde-corpuscule

Introduction

Les études menées sur la nature de la lumière montrent que suivant les conditions de l'expérience réalisée, la lumière peut être décrite soit par une onde électromagnétique soit par une assemblée de corpuscules : les photons. L'aspect ondulatoire de la lumière se manifeste par des phénomènes d'interférences et de diffraction tandis que l'aspect corpusculaire apparaît relativement dans l'effet photoélectrique.

Dans le cas de la lumière, on peut donc dire qu'il y a une dualité onde corpuscule bien établie.

Pour les particules matérielles les choses ne semblent pas a priori aussi évidentes : La nature corpusculaire des particules est une vérité de Lapalisse, toute particule est un corpuscule et se manifeste donc comme telle, alors qu'une manifestation ondulatoire d'un corpuscule n'est pas une réalité physique tangible.

C'est à Louis Victor De Broglie qu'on doit l'association des propriétés ondulatoires aux corpuscules : ce qui est vrai pour les photons devrait l'être pour tout type de particule, c'est à dire que la matière doit posséder comme la lumière la double entité ondulatoire et corpusculaire.

La physique moderne devra donc rendre compte de deux aspects différents du même objet pour ne pas se heurter aux difficultés rencontrés par la physique classique qui est intégrée dans un schéma figé à deux objets distincts : L'onde et le corpuscule.

Nous allons montrer dans ce chapitre que la lumière et la matière ont la double entité ondulatoire et corpusculaire et que ces deux aspects sont complémentaires.

1. Cas de la lumière

1.1. Aspect ondulatoire

1.1.1. Mise en évidence

La *théorie ondulatoire de Maxwell* n'est pas en contradiction avec l'optique géométrique qui en est une approximation (domaine où la longueur d'onde λ est petite devant les dimensions du système considéré, et en particulier des diaphragmes qu'il contient). La théorie de Maxwell trouve une confirmation expérimentale dans les phénomènes de propagation, d'interférence et de diffraction. Cette théorie postule l'existence de *champs* (\vec{E}) et (\vec{B}) qui sont des variables d'espace et de temps. Ces champs vérifient une *équation de propagation*.

L'aspect ondulatoire de la lumière est révélé par l'existence des phénomènes de diffraction et d'interférences. De tels phénomènes se retrouvent d'ailleurs dans de nombreux domaines de la physique (mécanique, acoustique,...) et trouvent une interprétation générale dans un même formalisme mathématique.

L'onde, qu'elle soit scalaire ou vectorielle est, avant tout, le déplacement à vitesse finie de la variation d'une grandeur physique.

Pour l'onde acoustique par exemple la grandeur qui se propage est la variation de la pression et pour l'onde lumineuse la grandeur qui se propage est la variation vectorielle du champ électrique ou magnétique.

A ce titre c'est essentiellement un processus de transport d'énergie : L'énergie transportée est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde.

L'onde est décrite par une fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ qui satisfait à une équation différentielle aux dérivées partielles du second ordre de la forme :

$$\Delta\Psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (2.1)$$

et qui constitue l'équation de propagation.

Δ est l'opérateur laplacien et \mathbf{V} la vitesse de propagation de l'onde.

Lorsque, à un instant t , la fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ a même valeur en tous les points d'un plan normal à une direction de propagation, l'onde est dite plane. Si en plus, elle est une fonction périodique simple du temps, l'onde est dite plane et monochromatique et sa représentation la plus commode est donnée par :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \tag{2.2}$$

Où Ψ_0 est l'amplitude de l'onde, ω sa pulsation et $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_r$ le vecteur d'onde, \vec{u}_r étant le vecteur unitaire de la direction de propagation.

Si l'onde se propage suivant \vec{Ox} , cette expression devient :

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - k \cdot x)} \quad , \quad \vec{k} = k \vec{u}_r \tag{2.3}$$

Ce formalisme permet de rendre compte convenablement des phénomènes d'interférences et de diffraction lumineuse.

1.1.2. Exemple : Expérience d'interférences des fentes d'Young :

Dans cette expérience une lumière monochromatique émise par une source S tombe sur une plaque opaque percée de deux fentes fines F_1 et F_2 qui éclairent un écran d'observation E disposé à une grande distance D de la plaque P (fig. 2. 1).

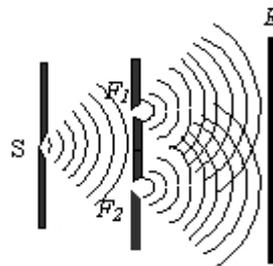


Figure 2.1 : Expérience d'interférences des fentes d'Young

Dans ce cas les grandeurs physiques oscillantes sont les composantes du champ électrique ou magnétique, de sorte qu'on peut prendre pour fonction d'onde le champ \vec{E} tel que :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cdot e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \tag{2.4}$$

Ainsi les champs issus de F_1 et F_2 sont :

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_{10} \cdot e^{-i(\omega t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1)} \tag{2.5}$$

$$\vec{E}_2 = \vec{E}_{20} \cdot e^{-i(\omega t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)} \tag{2.6}$$

Comme l'écran d'observation est loin de la plaque (fig. 2.2), on a :

$$\vec{k}_1 \approx \vec{k}_2 \approx \vec{k}$$

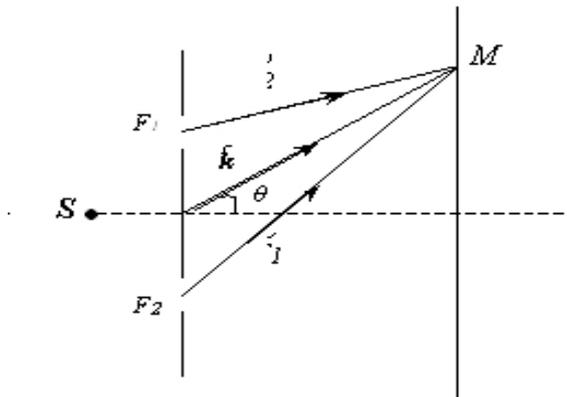


Figure 2.2 : Illustration du calcul de l'intensité lumineuse en un point M de l'écran

Le champ résultant au point M sur l'écran E est :

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \vec{E}_1 + \vec{E}_2 = \vec{E}_{10}.e^{-(\omega t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1)} + \vec{E}_{20}.e^{-(\omega t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)} \\ &= e^{-\omega t} (\vec{E}_{10}.e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} + \vec{E}_{20}.e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2}) \end{aligned} \tag{2.7}$$

L'intensité lumineuse I en M est telle que : $I \propto \|\vec{E}(M)\|^2$, soit :

$$\|\vec{E}(M)\|^2 = \vec{E} \times \vec{E}^* = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2E_{10}E_{20} \cos \vec{k}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \tag{2.8}$$

qui s'écrit :

$$I = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2E_{10}E_{20} \cos \delta \tag{2.9}$$

Où
$$\delta = \vec{k}(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \vec{k} \cdot 2\vec{a} = 2ka \sin \theta = \frac{4\pi}{\lambda} a \sin \theta = \frac{4\pi}{\lambda} a \frac{x}{D} \tag{2.10}$$

et E_{10} et E_{20} sont les amplitudes des ondes à la sortie des deux fentes F_1 et F_2 distantes de $2a$.

* Si $\cos \delta = 1 \Rightarrow \delta = 2n\pi \Rightarrow I = (E_{10} + E_{20})^2$: on aura interférence constructive (maximum de lumière).

* Si $\cos \delta = -1 \Rightarrow \delta = (2n + 1)\pi \Rightarrow I = (E_{10} - E_{20})^2$: on aura interférence destructive (minimum de lumière ou même obscurité si $E_{10} = E_{20}$).

Lorsque $E_{10} = E_{20}$ on aura au point M :

Une frange obscure pour : $\frac{4\pi}{\lambda} a \frac{x}{D} = 2\pi n$

Une frange lumineuse pour : $\frac{4\pi}{\lambda} a \frac{x}{D} = (2\pi + 1)n$

L'interfrange i est telle que : $2\pi = \frac{4\pi}{\lambda} a \frac{i}{D} \Rightarrow i = \frac{\lambda D}{2a}$

1. 2. Aspect corpusculaire

Nous avons vu précédemment que certains phénomènes ne s'interprètent convenablement que dans le cadre d'une structure corpusculaire du rayonnement *électromagnétique*. Pour rendre compte du rayonnement du corps noir, Planck a postulé la quantification des échanges d'énergie entre rayonnement et matière. Cette hypothèse fut considérée tout d'abord comme un artifice mathématique conduisant à un résultat en accord avec l'expérience, mais sans fondement physique. Planck introduisait une condition sur les échanges d'énergie entre matière et rayonnement, mais ne formulait aucune hypothèse sur la constitution de ce rayonnement. Einstein accomplit en 1905 un grand pas dans cette direction. Pour expliquer le phénomène de l'effet photoélectrique, il postule

que le rayonnement électromagnétique consiste en un jet de particules, les photons d'énergie $h\nu$ et de vitesse C .

1.2.1. Effet Compton

Expérimentalement, on réalise la diffusion Compton en envoyant un faisceau de rayon X dont la longueur d'onde est de quelques angströms) sur une substance contenant un certain nombre d'électrons libres (calcite, Aluminium,...).

Si la cible est assez mince, on observe, par transmission des rayons X diffusés en dehors de la direction incidente avec une longueur d'onde légèrement plus élevée c'est à dire une fréquence plus basse (fig. 2. 3) :

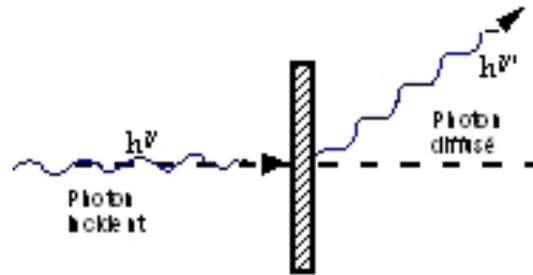


Figure 2.3 : Diffusion Compton

Compton a trouvé également que la longueur d'onde λ' des rayons diffusés est fonction de l'angle θ que font ces rayons avec la direction incidente (fig. 2.4).

La relation entre λ' , λ et θ étant :
$$\lambda' = \lambda + A \sin^2 \frac{\theta}{2} \tag{2. 11}$$

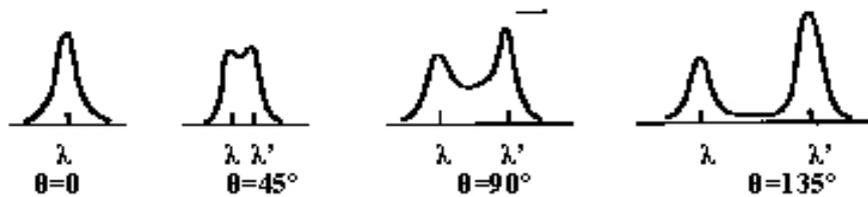


Figure 2.4 : Spectre de rayonnement diffusé par effet Compton pour quatre angles de diffusion différents

1.2.2. Interprétation

La théorie classique de la diffusion des rayons X développée par J.J Thomson ne peut rendre compte de la relation trouvée par Compton $\lambda' \neq \lambda$.

Pour expliquer ces résultats, Compton a supposé que les photons X sont des corpuscules qui entrent en collision avec les électrons de la cible. Dans une telle collision, il y a **conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie** et la théorie élémentaire des collisions peuvent donc fournir une interprétation même quantitative des résultats expérimentaux.

Comme les photons, se déplacent à la vitesse de la lumière, les équations de conservation doivent s'écrire dans un formalisme relativiste.

On a alors pour la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement les équations suivantes :

$$\varepsilon + E_0 = \varepsilon' + E_e \tag{2. 12}$$

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e \tag{2. 13}$$

Où ε , \vec{p} et ε' , \vec{p}' sont respectivement l'énergie et quantité de mouvement des photons incident et diffusé et E_0 l'énergie de l'électron au repos et E_e et \vec{p}_e son énergie et sa quantité de mouvement après le choc avec le photon.

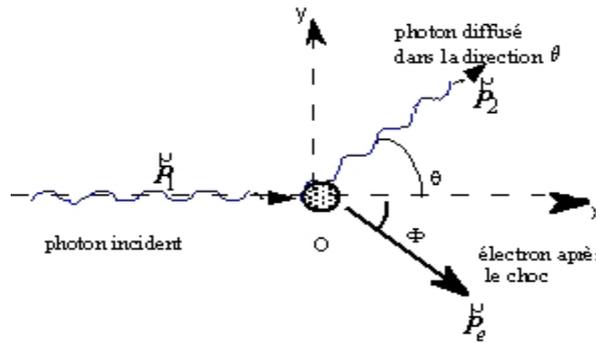


Figure 2. 5 : Collision entre un photon et un électron libre au repos

En relativité restreinte l'énergie E d'une particule et sa quantité de mouvement \vec{p} sont reliés par :

$$p = E \frac{V}{C^2} \tag{2.14}$$

$$E^2 = C^2(p^2 + m^2C^2) \tag{2.15}$$

de sorte qu'on a pour l'électron de masse m et de vitesse \vec{v} et pour le photon de masse nulle et de vitesse C :

$$\begin{cases} E_0 = mC^2 & , & E_e = \gamma mC^2 & \text{et } \vec{p}_e = \gamma m\vec{V} \\ \varepsilon = hv & , & \varepsilon' = hv' & \text{et } \|\vec{p}\| = \frac{hv}{C} \end{cases} \tag{2.16}$$

En explicitant les différents termes et en projetant la conservation de la quantité de mouvement sur les axes \vec{ox} et \vec{oy} d'un référentiel orthonormé (fig. 2.5), on obtient le système d'équations suivant :

$$hv + mC^2 = hv' + \gamma mC^2 \tag{2.17}$$

$$\frac{hv}{C} = \frac{hv'}{C} \cos \theta + \gamma mV \cos \varphi \tag{2.18}$$

$$0 = \frac{hv'}{C} \sin \theta - \gamma mV \sin \varphi \tag{2.19}$$

Où V est la vitesse de l'électron, m sa masse, c la célérité de la lumière et

$$\gamma = (1 - \frac{V^2}{C^2})^{-1/2} \tag{2.20}$$

Les équations (2.18) et (2.19) conduisent après élimination de φ , élévation au carré et addition, à l'équation :

$$\frac{h^2v^2}{C^2} + \frac{h^2v'^2}{C^2} - \frac{2h^2vv'^2}{C^2} \cos \theta = \gamma^2 m^2 C^2 \tag{2.21}$$

L'équation (2.17) donne, après élévation au carré et division par C^2 , l'équation :

$$\frac{h^2 v^2}{C^2} + \frac{h^2 v'^2}{C^2} - \frac{2h^2 v v'}{C^2} + m^2 C^2 + 2mh(v - v') = \gamma^2 m^2 C^2 \quad (2.22)$$

La différence entre (2.21) et (2.22) divisée par mhv' conduit alors à :

$$\frac{1}{v'} - \frac{1}{v} = \frac{h}{mC^2} (1 - \cos \theta) \quad (2.23)$$

Soit encore :

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{mC} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.24)$$

qui est la formule de Compton et qui rend exactement compte des observations expérimentales.

Il est facile de vérifier que la quantité h/mc est homogène à une longueur, c'est la longueur d'onde Compton λ_c . Sa faible valeur ($\lambda_c \approx 0,025 \text{ \AA}$) explique pourquoi l'effet n'est sensible que pour les très petites longueurs d'onde (quelques angströms).

Il est également possible de calculer l'angle ϕ et l'énergie cinétique de l'électron éjecté, on trouve :

$$\text{Cotg} \phi = (1 + \alpha) \text{tg} \frac{\theta}{2} \quad (2.25)$$

$$E_c = \frac{2\alpha \cos^2 \phi}{(1 + \alpha)^2 - \alpha^2 \cos^2 \phi} \quad (2.26)$$

Avec

$$\alpha = \frac{hv}{mC^2} \quad (2.27)$$

1.3. Dualité onde-corpuscule de la lumière

Nous avons vu que la lumière est formée d'une assemblée de photons qui se manifeste soit de manière ondulatoire soit de manière corpusculaire. Elle lumière se comporte à la fois comme une onde et comme un flux de particules, l'onde permettant de calculer la probabilité pour qu'un photon se manifeste. Ces aspects sont inséparables. Nous introduirons alors le lien statistique entre ces deux aspects et nous dégagerons quelques notions quantiques fondamentales : amplitude de probabilité, état du système,...

Le dispositif de cette expérience a été présenté sur la **figure 2.1**.

1.3.1. Analyse en terme de corpuscule

Nous allons considérer successivement trois expériences : F_1 ouverte F_2 fermée, F_1 fermée F_2 ouverte, F_1 et F_2 ouvertes (**fig. 2. 6**).

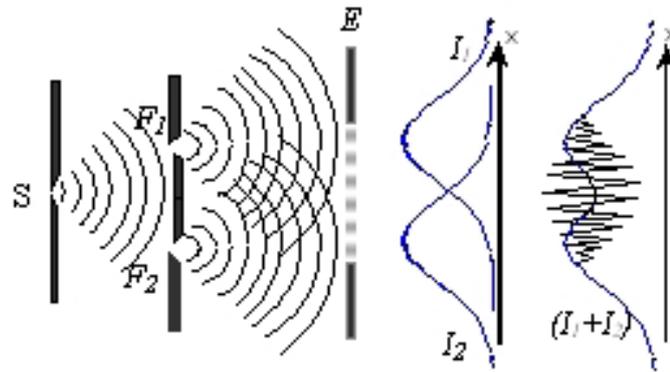


Figure 2.6 : Complémentarité entre aspect corpusculaire et aspect ondulatoire dans l'expérience d'interférences lumineuses des fentes d' Young

- En fermant la fente F_2 , on voit sur l'écran une tache de diffraction P_1 plus grande que l'ombre portée de la fente F_1 et d'intensité décrite par $I_1(x)$: on peut interpréter cette diffraction par des effets de bord de F_1 sur les photons.
- Si l'on ferme F_1 et on laisse F_2 ouverte, on obtient une tache P_2 semblable à P_1 décrite par $I_2(x)$.
- Si les fentes F_1 et F_2 sont ouvertes, on s'attend à trouver une tache provenant de la somme des deux taches précédentes ($P_1 + P_2$) décrite par $I_1(x) + I_2(x)$. Il n'en est rien et on trouve **un système de franges** (fig. 2.6).

Le fait que F_2 soit ouvert modifie donc l'histoire des photons qui passent par F_1 (et réciproquement), au point qu'en certains endroits de l'écran, on observe de l'obscurité là où l'on attendait un renforcement de la lumière.

On peut tenter d'expliquer ces franges en invoquant une interaction entre les photons passant par F_1 et ceux passant par F_2 . Diminuons alors l'intensité I de la source et augmentons le temps de pose t de façon que le produit ($I \cdot t$) reste constant. L'interaction devrait diminuer et à la limite s'annuler lorsque les photons seront émis un par un, mais on n'observe aucune variation de la figure d'interférences.

Les interférences ne peuvent donc s'interpréter à partir d'une interaction entre photons !!

1.3.2. Analyse en terme d'onde

Lorsque les deux fentes sont ouvertes, l'onde lumineuse tombant en un point de l'écran E provient de la superposition en ce point de l'onde issue de F_1 et de l'onde issue de F_2 . Nous avons vu dans 1.1.2 que l'intensité I de la tâche est donnée par (2. 9), soit :

$$I = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2E_{10}E_{20} \cos \delta \tag{2. 28}$$

Ou encore

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta \tag{2. 29}$$

I_1 et I_2 correspondent respectivement aux intensités issues des fentes F_1 et F_2 et le terme croisé est le terme d'interférence.

Diminuons l'intensité de la source, l'intensité des franges devrait décroître de façon continue, or pour une intensité suffisamment faible, on voit apparaître sur la plaque des impacts localisés : l'aspect corpusculaire réapparaît ! (fig. 2.7)

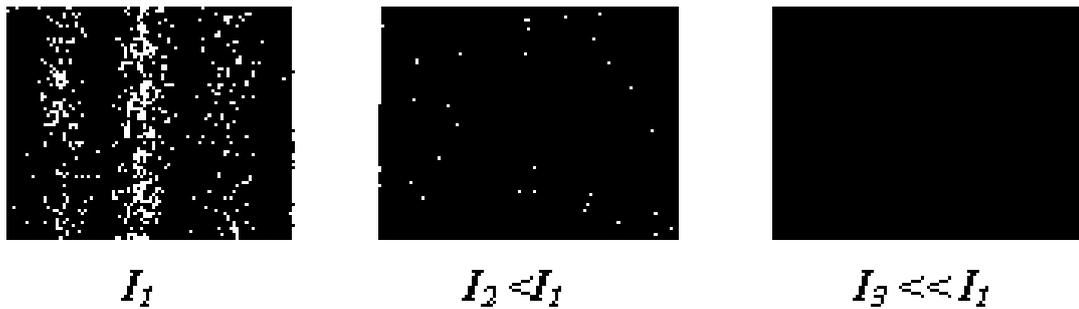


Figure 2.7 : Evolution des franges d'interférences en fonction de l'intensité I de la source lumineuse

1.3.3. Unification quantique des deux aspects

Dans son interaction avec l'écran, la lumière manifeste son aspect corpusculaire, mais la répartition d'un grand nombre de ces corpuscules, c'est à dire leur comportement statistique est lié à l'onde électromagnétique. Cette onde permet de calculer la probabilité pour que le corpuscule se manifeste.

On admettra alors l'hypothèse de Max Born (1924) selon laquelle :

- $\vec{\Psi}(\vec{r}, t)$ est la fonction d'onde du photon, elle caractérise entièrement son état à l'instant t et représente "l'amplitude de probabilité" de trouver le photon au point \vec{r} à l'instant t .
- $\|\vec{\Psi}(\vec{r}, t)\|^2$ est la densité de probabilité de trouver le photon au point \vec{r} à l'instant t .

1.3.4. Conclusion

- Les aspects corpusculaire et ondulatoire de la lumière sont inséparables.

La lumière se comporte à la fois comme une onde et comme un flux de particules, l'onde permettant de calculer la probabilité pour qu'un photon se manifeste.

Les prévisions sur le comportement d'un photon ne peuvent être que de type probabiliste.

- Au concept classique de trajectoire, il faut substituer celui d'état. L'état quantique du photon est caractérisé par la fonction d'onde $\vec{\Psi}(\vec{r}, t)$
- Enfin, toute mesure perturbe le système de façon fondamentale. Il est impossible d'observer à la fois les franges et de savoir par quelle fente est passé le photon !

2- Cas de la matière

La matière est formée d'un ensemble infini mais dénombrable de particules. L'aspect corpusculaire de ces particules (électrons, protons,...) est un fait acquis et l'étude de leur mouvement est décrite convenablement par les principes de la mécanique classique. Toutefois des difficultés sérieuses apparaissent à l'échelle atomique où on trouve que certaines grandeurs physiques comme l'énergie, le moment angulaire,... sont quantifiées. Un pas important est franchi lorsque Louis Victor de Broglie (1924) suggère théoriquement l'existence d'un aspect ondulatoire pour les particules matérielles.

2. 1. Onde de De Broglie

D'après De Broglie, la matière comme la lumière doit posséder la double entité corpusculaire et ondulatoire : les relations d'Einstein valables pour le photon doivent l'être également pour la particule.

Ainsi à une particule dont les grandeurs dynamiques sont l'énergie **E** et l'impulsion \vec{p} , correspond une onde plane de pulsation ω et de vecteur d'onde \vec{k} . De Broglie démontra de façon très séduisante que les couples (E, \vec{p}) et (ω, \vec{k}) sont reliés par :

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \times 2\pi\nu = \hbar\omega \quad (2.30) \quad \text{avec} \quad \omega = 2\pi\nu$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (2.31) \quad p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \times \frac{2\pi}{\lambda}$$

Soit encore en module :

$$p = mV = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

Ce qui donne pour la longueur d'onde :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV} \quad (2.32)$$

qui est la célèbre relation de De Broglie et qui exprime la longueur d'onde associée à une particule de masse **m** se déplaçant à la vitesse **V**.

La longueur d'onde sera d'autant plus grande que la masse est petite.

Lorsque les particules se déplacent à une vitesse **V** voisine de celle de la lumière on montre que la relation (2.32) devient :

$$\lambda = \frac{h}{mc} \frac{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{\frac{V}{c}} \quad (2.33)$$

Avec la relation de De Broglie on comprend mieux la signification de la condition de quantification de Bohr rencontrée dans le **chapitre I**. En effet, dans le cas d'une orbite électronique circulaire, la circulation de \vec{p} est :

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{l} = 2\pi r p = nh \quad (2.34)$$

Soit :

$$\int \frac{h}{\lambda} 2\pi r = nh \quad (2.35)$$

Ou encore :

$$2\pi r = n\lambda \quad (2.36)$$

Cette relation exprime simplement l'établissement d'un système d'ondes stationnaires sur l'orbite (**fig. 2. 8**) comme c'est le cas pour une corde vibrante.

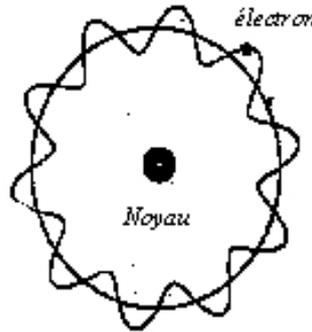


Figure 2. 8 : Onde stationnaire de De Broglie pour l'électron de l'atome d'hydrogène

Cette conception du comportement dynamique des particules a constitué une autre importante nouveauté. Ayant l'habitude d'appréhender à l'aide de nos sens tout objet matériel, nous sommes naturellement conduits à lui attribuer une forme et des dimensions bien définies, ainsi qu'une localisation dans l'espace. Ceci nous amène à penser que les constituants les plus élémentaires (nucléons, électrons, ...) ont également une géométrie et une position bien déterminées. Cependant, il s'agit là d'une extrapolation loin de notre domaine habituel de perception. De nombreuses expériences ont révélé que cette extrapolation n'était pas correcte, et confirmé les idées de **De Broglie**, la plus célèbre d'entre elles étant l'expérience de diffraction d'électrons par un réseau cristallin effectuée en 1926 par Clinton Davisson et Lester Germer.

2. 2. Mise en évidence expérimentale de l'onde de De Broglie

Dans une expérience d'optique, pour mettre en évidence les propriétés ondulatoires de la lumière et donc pour déterminer la longueur d'onde λ , il faut s'arranger pour que les dimensions des instruments de mesure (largeur de fentes, pas du réseau, ...) soient comparables à λ . C'est à ce moment que l'on peut observer des déviations par rapport à l'optique géométrique sous forme d'effets d'interférences ou de diffraction.

Pour un électron de quantité de mouvement \vec{p} et donc d'énergie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$, la longueur d'onde associée λ est :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} \tag{2. 37}$$

Soit en utilisant les valeurs numériques de **h** et **m** :

$$\lambda (\text{\AA}) = \sqrt{\frac{150}{E_c (eV)}} \approx \frac{12.26}{\sqrt{V (\text{Volt})}} \tag{2. 38}$$

Ainsi, pour une énergie raisonnable de l'ordre de **100 eV** correspondant à une tension accélératrice de **100V** et à une vitesse de l'ordre de **5.106 m/s**, la longueur d'onde associée à l'électron serait de l'ordre **1\AA**. Il est donc impossible de confectionner un réseau de diffraction ayant ce pas ou une fente ayant cette largeur.

Si on considère que l'électron sort avec l'énergie thermique $E_c = \frac{1}{2}k_B T$ par degré de liberté.

On peut écrire :

$$E_C = \frac{1}{2}mV^2 = \frac{3}{2}k_B T \quad \text{d'où} \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}$$

La longueur d'onde sera d'autant plus grande que la température est petite.

Clinton Joseph Davisson et Lester Halbert Germer (1927) détournèrent cette difficulté. Ils dirigèrent un faisceau d'électrons qui, contrairement aux photons, ont une masse vers un réseau de diffraction cristallin. En effet, dans un cristal la distance des plans réticulaires est d'environ 1 à 3Å et on peut effectuer des expériences de diffraction des électrons comme on effectue des expériences de diffraction des rayons X.

Comme le montre la **figure 2.9**, chaque plan réticulaire du cristal se comporte comme un miroir plan pour le faisceau d'électrons incidents.

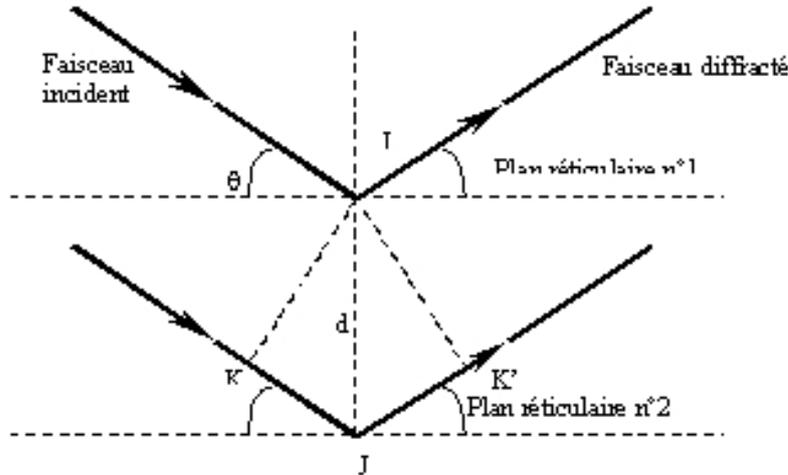


Figure 2.9 : Diffraction d'un faisceau d'électrons sur les plans réticulaires d'un cristal

Ainsi pour deux plans réticulaires adjacents les faisceaux diffractés présentent une différence de marche de $2d \sin\theta$ de sorte que les fonctions d'onde associées aux électrons incidents et diffractés s'écrivent :

$$\Psi_1 = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} \tag{2.39}$$

$$\Psi_2 = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx - 2kd \sin\theta)} \tag{2.40}$$

et il y aura maximum de diffraction dans les directions θ_n telles que les ondes Ψ_1, Ψ_2, \dots soient toutes en phase, c'est à dire qu'on a :

$$2kd \sin \theta_n = 2n\pi \tag{2.41}$$

Ou encore :

$$2d \sin \theta_n = n\lambda \tag{2.42}$$

qui est la relation de Bragg utilisée en cristallographie X.

Davisson et Germer utilisèrent un monocristal de Nickel ($d = 2,55 \text{ \AA}$) bombardé par des électrons de 54 eV (**fig. 2.10**) et virent le premier maximum de diffraction pour $\theta_1 = 50^\circ$ ce qui donne $\lambda = 1,65 \text{ \AA}$, en parfait accord avec la valeur qu'on obtient par la relation de De Broglie : $\lambda_D = 1.67 \text{ \AA}$.

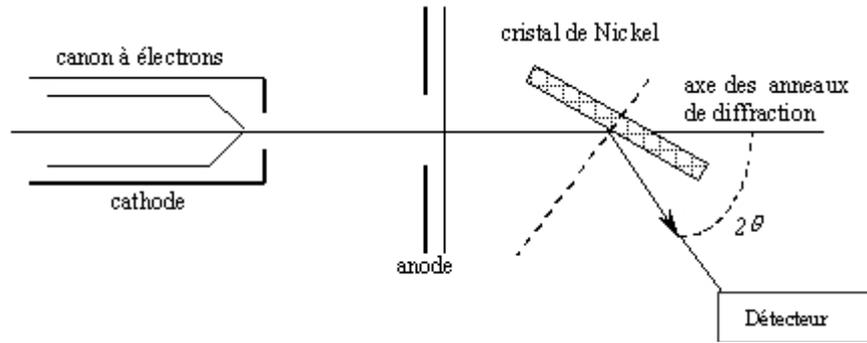


Figure 2.10 : Schéma de l'expérience de Davisson et Germer

Il est également possible de réaliser avec des électrons une expérience d'interférences analogue à celle du biprisme de Fresnel qui met en évidence des franges d'interférence électroniques (fig. 2. 11).

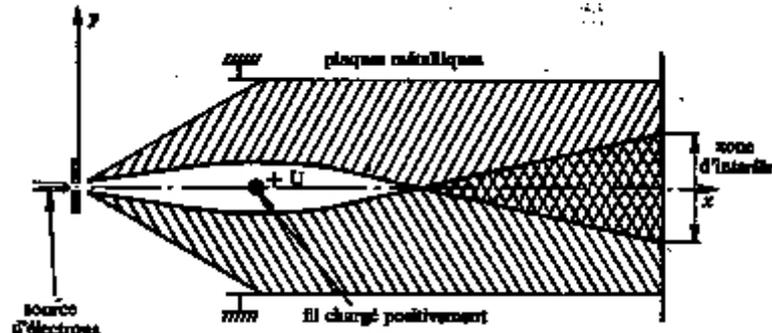


Figure 2.11 : Schéma de l'expérience d'interférences électroniques

Les deux faisceaux issus de la même source sont d'abord séparés l'un de l'autre, puis déviés par une électrode positive de façon à se recouvrir partiellement. Dans la partie commune aux deux faisceaux il y a interférence, le calcul de l'interfrange donne bien une longueur d'onde coïncidant avec la longueur d'onde de De Broglie.

2. 3. Fonction d'onde d'une particule matérielle

Comme pour le photon, nous caractériserons l'état d'une particule matérielle à l'instant t par la donnée d'une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ qui contient toutes les informations sur la particule. $\Psi(\vec{r}, t)$ est en général une fonction complexe.

$$(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$$

$$(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi(\vec{r}, t)$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence de la particule au point \vec{r} à l'instant t.

$|\Psi(\vec{r})|^2 = \Psi(\vec{r}) \times \Psi^*(\vec{r})$ est la densité de probabilité de présence de la particule.

Avec Ψ^* conjugué complexe de Ψ

$$dP = |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r \tag{2. 43}$$

est la probabilité de trouver la particule à l'instant t dans l'élément de volume $d^3r = dx dy dz$.

Il est évident que la probabilité totale pour trouver la particule n'importe où dans l'espace, à l'instant t, doit être finie et égale à l'unité:

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r = 1 \tag{2. 44}$$

La fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ dont l'intégrale sur tout l'espace du carré de l'amplitude est finie est dite fonction de carrée sommable.

2. 4. Equation d'onde pour les particules

Les particules étant assimilées à des ondes, les scientifiques ont alors cherché à écrire une équation d'onde s'appliquant à ces fonctions d'onde. Pour cela, dérivons d'une part par rapport au temps, et d'autre part par rapport à l'espace la fonction d'onde décrite précédemment. Nous obtenons ainsi :

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \int \frac{-iE}{\hbar} \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = - \int \frac{p^2}{\hbar^2} \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk$$

Or pour une particule dans un potentiel $U(x)$, et dans le cas non relativiste, on a :

$$E(k) = \frac{1}{2} mV^2 + U(x) = \frac{p^2(k)}{2m} + U(x)$$

Nous avons rajouté explicitement la dépendance en \mathbf{k} pour ne pas faire d'erreur dans l'intégration. En reprenant les deux termes dérivés précédents, et en remarquant que l'intégration s'effectue sur \mathbf{k} , on aboutit ainsi à l'équation :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= \int (E - \frac{p^2}{2m}) \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk \\ &= \int U(x, t) \psi_0 e^{i(p \cdot x - Et)/\hbar} dk = U(x, t) \Psi(x, t) \end{aligned}$$

C'est une équation d'onde simple valable dans le cas d'une particule soumis à un potentiel à une dimension :

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

C'est la célèbre équation de Schrödinger. Bien sûr, ceci ne constitue en rien une démonstration de cette équation. D'autres équations d'onde ont été proposées, mais c'est cette équation qui a permis d'obtenir des résultats en accord avec l'expérience.

Elle peut s'écrire à trois dimensions comme suit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \tag{2. 45}$$

On remarque qu'il s'agit d'une équation aux dérivées partielles linéaire. Le premier membre représente l'action sur la fonction d'onde d'un opérateur \mathbf{H} défini par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \tag{2. 46}$$

\mathbf{H} est appelé hamiltonien de la particule de masse m en mouvement dans le champ de forces dérivant du potentiel $U(\vec{r}, t)$. Δ étant l'opérateur laplacien. Avec $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Le deuxième membre représente l'action sur la fonction d'onde de l'opérateur dérivation par rapport au temps multiplié par $i\hbar$.

$$H\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \tag{2. 47}$$

On peut justifier le bien fondé de l'équation de Schrödinger en considérant, pour simplifier, une fonction d'onde plane et monochromatique.

On a :

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \Psi_0 e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} \tag{2.48}$$

L'énergie totale E de la particule s'écrit :

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \tag{2.49}$$

Considérons les dérivées partielles de $\Psi(\vec{r}, t)$ par rapport au temps et aux coordonnées de position on a :

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(\vec{r}, t) \tag{2.50}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{i}{\hbar} p_y \Psi \quad ; \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar} p_z \Psi \tag{2.51}$$

En introduisant l'opérateur gradient $\vec{\nabla}$, les trois dernières équations peuvent s'écrire simplement sous la forme :

$$\vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \Psi(\vec{r}, t) \tag{2.52}$$

En effectuant une deuxième dérivée partielle par rapport à x, y et z on obtient :

$$\Delta \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}, t) \tag{2.53}$$

En utilisant les relations (2.49), (2.50) et (2.53) on peut écrire :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)\right) \Psi = E \Psi \tag{2.54}$$

Soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{2.55}$$

qui est l'équation de Schrödinger postulée plus haut.

Les équations (2.49), (2.50) et (2.53) permettent également d'établir des règles de correspondance entre l'énergie et la dérivation par rapport au temps et entre l'impulsion et la dérivation par rapport à l'espace :

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{et} \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \tag{2.56}$$

Soit encore :

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad ; \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad ; \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \tag{2.57}$$

Enfin à la quantité \vec{p}^{-2} , module au carré de l'impulsion, correspondrait l'opérateur $-\hbar^2 \Delta$:

$$\vec{p}^{-2} = -\hbar^2 \Delta = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \tag{2.58}$$

Cas particulier d'une particule libre c'est une particule dont l'énergie est purement cinétique (pas de potentiel $U(\vec{r}, t)=0$), l'équation de Schrödinger sera :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{2.55a}$$

Cette équation admet pour solution : $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$

Avec $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, $\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $E = \frac{p^2}{2m}$

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi_0|^2$: Densité de probabilité de présence uniforme dans tout l'espace ! ce résultat n'est pas physique. Une telle onde ne peut pas représenter une particule car elle n'est pas de carré sommable. $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dr^3$ diverge.

2. 5. Dualité onde-corpuscule de la matière

Le même raisonnement conduit dans l'expérience des fentes d'Young, peut se transposer pour l'expérience des interférences électroniques décrites dans la figure 2.2. Pour rendre compte convenablement des résultats observés, il faut considérer le double aspect ondulatoire et corpusculaire des particules matérielles. La figure 2.7 montre d'ailleurs la manifestation des deux aspects.

3. Le paquet d'ondes

3.1. Définition

L'onde plane monochromatique d'étendue illimitée, ne peut être une solution physiquement acceptable de l'équation de propagation. D'abord une onde de ce type représente une particule dont la densité de probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace, ensuite l'énergie qu'elle véhicule n'est pas une quantité finie.

On ne peut cependant abandonner complètement l'onde monochromatique en raison de sa simplicité mathématique et du potentiel de généralisation qu'elle contient, et dans la recherche d'une "bonne solution", l'idée la plus simple consiste à superposer plusieurs ondes monochromatiques en raison même du caractère linéaire de l'équation d'onde. Il reste alors à déterminer la superposition convenable.

Montrons en effet que la densité de probabilité cesse d'être uniforme lorsqu'on superpose deux ondes de fréquences voisines et de même amplitude.

On a :

$$\begin{cases} \Psi_1 = \Psi_0 e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} \\ \Psi_2 = \Psi_0 e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)} \end{cases} \text{ Avec } \begin{cases} \omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega_0 & \text{et} & \omega_2 = \omega_0 + \Delta\omega \\ k_1 = k_0 - \Delta k_0 & \text{et} & k_2 = k_0 + \Delta k \end{cases}$$

L'onde résultante en chaque point de l'espace est définie dans ce cas par :

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 = \Psi_0 (e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)}) \tag{2.59}$$

Soit :

$$\Psi(x, t) = 2\Psi_0 \cos(\Delta\omega t - \Delta k x) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \tag{2.60}$$

L'amplitude de l'onde résultante est donc $2\Psi_0 \cos(\Delta\omega.t - \Delta k.x)$ et une photographie instantanée de cette onde donne une image telle que celle représentée sur la figure 2.12.

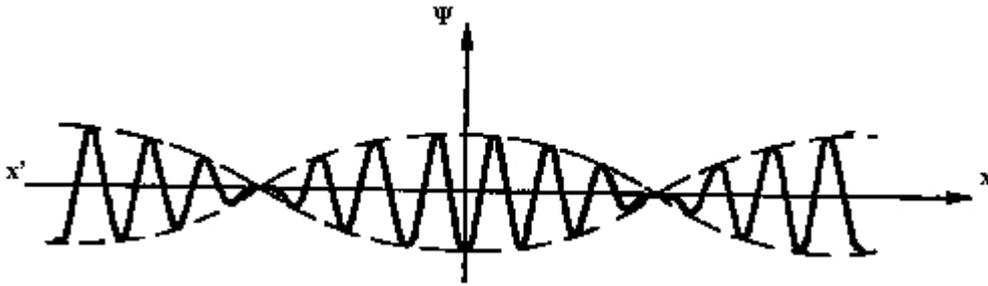


Figure 2.12 : Paquet résultant de la superposition de deux ondes monochromatiques de fréquences voisines

On remarque que la densité de probabilité cesse d'être uniforme dans tout l'espace puisqu'elle est maximale dans certaines régions et nulle dans d'autres.

L'énergie demeure toutefois infinie car la particule est délocalisée sur tout l'axe x' .

On peut penser que le modèle s'améliore en superposant un plus grand nombre d'ondes de fréquences voisines de sorte que $\Psi(x, t)$ s'écrive :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^N g_n e^{-i(\omega_n t - k_n x)} \tag{2.61}$$

On montre cependant qu'une telle superposition d'un nombre fini d'ondes planes conduirait toujours à une délocalisation de la particule et à une divergence de l'énergie. La solution du problème ne peut être qu'une superposition infinie d'ondes planes ayant des vecteurs d'ondes k très voisins. On parvient ainsi à la définition du paquet d'ondes dont l'expression est :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk \tag{2.62}$$

où $g(k)$ est une fonction généralement complexe de la variable k et qui est localisée autour d'une valeur k_0 et $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ est un facteur multiplicatif utilisé pour la normalisation des fonctions.

Une photographie du train d'onde à l'instant $t = 0$ conduit à :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \tag{2.63}$$

On remarque que $\Psi(x, 0)$ et $g(k)$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre :

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \tag{2.64}$$

On a, par conséquent la relation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk \tag{2.65}$$

Cette relation est appelée relation de Parseval et montre que si $g(k)$ est une fonction de carré sommable $\Psi(x, 0)$ l'est aussi. On peut donc pallier les insuffisances de l'onde plane monochromatique en construisant des paquets d'ondes à partir de fonctions $g(k)$ adéquates.

Ce formalisme se généralise dans l'espace à trois dimensions et on aura :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k} \tag{2.66}$$

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{k} \tag{2.67}$$

On utilise souvent en mécanique quantique l'impulsion à la place du vecteur d'onde ce qui conduit à :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int G(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)/\hbar} d\vec{p} \tag{2.68}$$

Où $\vec{p} \rightarrow \hbar\vec{k}$, $G(\vec{p}) = g(\vec{p}/\hbar) / \sqrt{\hbar}$ et $E = \hbar\omega$

3. 2. Exemple : Paquet d'ondes carré

Prenons pour $g(k)$ la fonction créneau représentée sur la figure 2.13 et décrite par :

$$g(k) = \begin{cases} g_0 & \text{pour } k_0 - \frac{\Delta k}{2} \leq k \leq k_0 + \frac{\Delta k}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \tag{2.69}$$

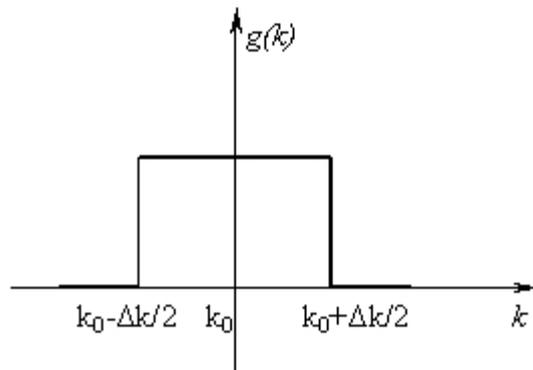


Figure 2.13 : Variation de l'amplitude $g(k)$ en fonction du module du vecteur d'onde pour un paquet d'ondes carré quasi-monochromatique

Une photographie du paquet d'ondes à l'instant $t = 0$ est donnée par :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} g_0 e^{ikx} dk \tag{2.70}$$

Le calcul de l'intégrale donne :

$$\Psi(x, 0) = \frac{g_0}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{ikx}}{ix} \right]_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} g_0 \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} e^{ik_0 x} \tag{2.71}$$

Soit

$$\Psi(x, 0) = \Psi_0 \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} e^{ik_0 x} \tag{2.72}$$

Avec
$$\Psi_0 = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} g_0$$

L'image de ce paquet est représentée sur la figure 2. 14 et montre que cette distribution des ondes est centrée en $x = 0$. Bien que $\Psi(x, 0)$ possède une infinité de maxima et de minima, ceux-ci sont très petits comparés aux maxima et minima principaux et on peut considérer que la particule est essentiellement localisée au voisinage de $x = 0$ avec une étendue Δx égale à la largeur à mi-hauteur du pic central soit :

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k} \tag{2.73}$$

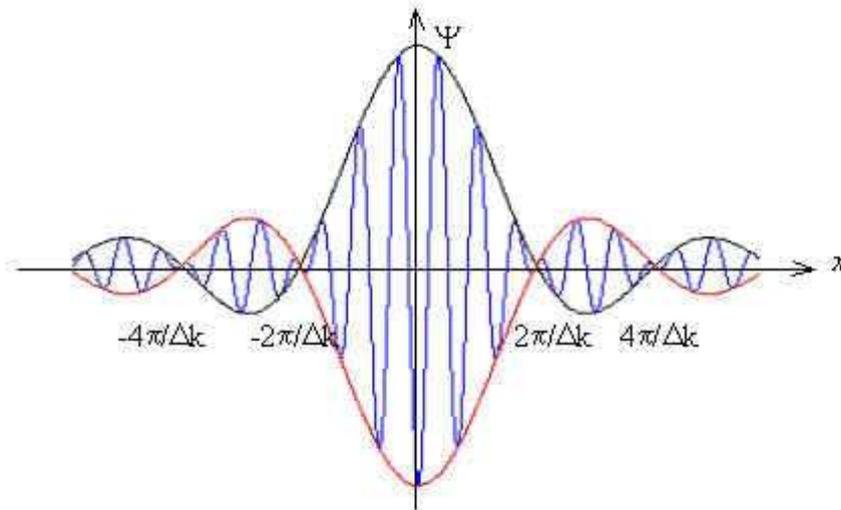


Figure 2.14 : Image à l’instant $t = 0$ d’un paquet d’ondes carré quasi-monochromatique

La densité de probabilité s’écrit :

$$|\Psi(x, 0)|^2 = \Psi(x, 0)\Psi^*(x, 0) = \Psi_0^2 \left(\frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} \right)^2 \tag{2.74}$$

L’énergie véhiculée par la particule est alors telle que :

$$W = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \Psi_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} \right)^2 dx = \frac{2\Psi_0^2}{\Delta k} \tag{2.75}$$

Car
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 du = 1 \tag{2.76}$$

4. Vitesse de phase et vitesse de groupe

4. 1. Vitesse de phase

A l'intérieur du paquet d'ondes se superposent plusieurs ondes monochromatiques de phase $\alpha = k.x - \omega t$. Chaque plan d'onde, caractérisé par une phase constante, évolue au cours du temps et sa vitesse de propagation le long de la direction du vecteur d'onde \vec{k} s'obtient en écrivant :

$$\frac{d\alpha}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0 \tag{2. 77}$$

Soit

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} \tag{2. 78}$$

Cette vitesse est appelée vitesse de phase car c'est la vitesse de propagation du lieu des points ayant une phase constante. On la note V_φ :

$$V_\varphi = \frac{\omega}{k}$$

Son expression vectorielle s'écrit dans le cas général :

$$\vec{V}_\varphi = \frac{\omega}{k^2} \vec{k}$$

A l'intérieur du paquet d'ondes, chaque onde a sa propre vitesse V_φ . La vitesse de phase est constante et donc identique pour toutes les ondes planes uniquement dans le cas où l'expression reliant ω à k , appelée relation de dispersion, est linéaire. Dans ce cas on dit que le milieu est non dispersif et le paquet se déplace comme un solide rigide.

C'est le cas d'un paquet d'ondes électromagnétique (photon) se propageant dans le vide

$$V_\varphi = \frac{\omega}{k} = C .$$

4. 2. Vitesse de groupe

Lorsque le milieu est dispersif et c'est le cas le plus général, la propagation de l'onde centrale s'effectue à une vitesse différente de celle des ondes latérales participant au paquet. Pour déterminer la vitesse à laquelle se propage le centre du paquet nous allons développer $\omega(k)$ en une série de Taylor autour du nombre d'onde moyen k_0 et dans l'intervalle Δk mesurant l'étendue de $g(k)$, soit :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} (k - k_0) + \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} \frac{(k - k_0)^2}{2!} + \dots \tag{2. 79}$$

En se limitant au premier terme du développement et en posant :

$$\omega(k_0) = \omega_0 \quad \text{et} \quad \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = V_g \tag{2. 80}$$

On a

$$\omega(k) = \omega(k_0) + V_g (k - k_0) \tag{2. 81}$$

En introduisant cette expression dans le paquet d'ondes décrit par (2.62) et en utilisant pour simplifier un paquet carré, on obtient après un calcul simple :

$$\Psi(x, t) = g_0 e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{+\frac{\Delta k}{2}} g(k) e^{-i(k - k_0)(V_g t - x)} dk \tag{2. 82}$$

Le calcul de l'intégrale conduit en définitive à :

$$\Psi(x, t) = A(x, t) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \tag{2. 83}$$

Où

$$A(x, t) = g_0 \Delta k \frac{\sin\left[\frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)\right]}{\frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)} \tag{2.84}$$

On peut considérer $A(x, t)$ comme l'amplitude d'une onde approximativement monochromatique et $k_0 x - \omega_0 t$ comme sa phase. Cette amplitude varie comme $\frac{\sin z}{z}$ avec $z = \frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)$. Elle passe alternativement par des maxima et des minima dont les valeurs sont faibles comparées à celles du maximum principal à $z = 0$ et converge rapidement vers zéro (fig. 2.15).

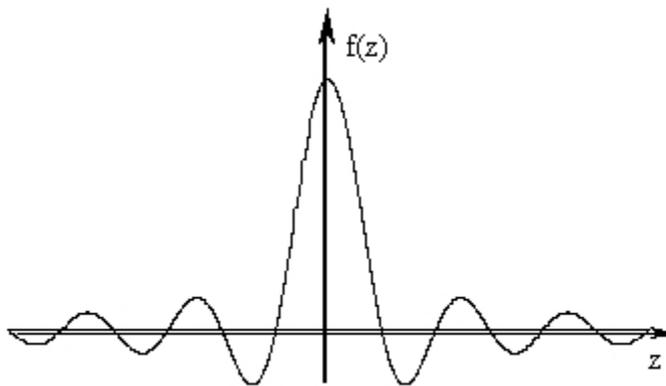


Figure 2.15 : Variation de la fonction $f(z) = \frac{\sin z}{z}$ en fonction de z

Nous pouvons donc conclure que la superposition génère un paquet d'ondes dont l'amplitude est différente de zéro uniquement dans une région limitée de l'espace et décrite par $\frac{\sin z}{z}$. Ce facteur de modulation prend la valeur maximale 1 pour z tendant vers zéro, donc pour $V_g t - x = 0$ ce qui signifie que le centre du paquet d'ondes se propage à la vitesse $\frac{dx}{dt} = V_g$.

V_g est appelée vitesse de groupe :

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} \tag{2.85}$$

Ce résultat peut d'ailleurs être trouvé intuitivement à partir d'une superposition de deux ondes (relation (2.59)) où on remarque que la phase de l'amplitude $A(x, t)$ est $(\Delta\omega t - \Delta k x)$, ce qui conduit à une vitesse de groupe $V_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$.

La vitesse de groupe correspond donc à la vitesse de déplacement du centre du paquet d'ondes pour lequel toutes les ondes sont en phase. Le résultat que nous venons d'obtenir est très général. Pour un paquet d'ondes à trois dimensions on aurait :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} d\vec{k} \tag{2.86}$$

et la vitesse de groupe serait égale à :

$$V_g = \left| \vec{\nabla}_k \omega(\vec{k}) \right|_{k=k_0} \quad (2.87)$$

Comme la densité d'énergie transportée par l'onde est toujours proportionnelle au carré de l'amplitude, la propagation de l'énergie se fera toujours avec une vitesse égale à la vitesse de groupe qui est donc la seule vitesse accessible directement à l'expérience. D'ailleurs on peut s'en convaincre en écrivant V_g sous la forme :

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} \quad (2.88)$$

4.3. Cas d'une particule libre

Pour une particule libre de masse m on :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \quad (2.89)$$

Soit
$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (2.90)$$

* La vitesse de groupe associée au paquet d'ondes est alors :

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \quad (2.91)$$

Cette vitesse est dans ce cas, égale à la vitesse classique de la particule et le centre du paquet d'ondes se déplace donc à la vitesse qu'aurait la particule en mécanique classique.

* La vitesse de phase est quant à elle donnée par :

$$V_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{p} = \frac{E}{p} \quad (2.92)$$

Où E est l'énergie totale de la particule. Ainsi pour une particule relativiste de masse au repos m_0 et d'énergie $E = \sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4}$, la vitesse de phase est :

$$V_\varphi = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{\sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4}}{p} = C \left(\sqrt{1 + \frac{m_0^2 C^2}{p^2}} \right) > C \quad (2.93)$$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(\sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4})}{dp} = \frac{2pC^2}{2\sqrt{p^2 C^2 + m_0^2 C^4}}$$

$$= \frac{2pC^2}{2pC \sqrt{1 + \frac{m_0^2 C^4}{p^2 C^2}}} = \frac{C}{\sqrt{1 + \frac{m_0^2 C^4}{p^2 C^2}}} < C$$

On obtient donc une vitesse de phase supérieure à la vitesse de la lumière C ! ce qui signifie que la vitesse de phase ne peut d'aucune façon représenter la vitesse de déplacement de la particule. Seule la vitesse de groupe a donc un sens physique.

5. Relations d'incertitude de Heisenberg

En mécanique classique la mesure de la position ou de la vitesse d'une particule peut être très précise et parfaite. Elle n'est en fait limitée que par la performance de l'instrument et la dextérité de l'opérateur. Un opérateur appliqué utilisant un instrument de qualité peut rendre la mesure aussi précise que possible. On peut donc atteindre aisément la trajectoire du mouvement qui est définie par la connaissance en tout point du vecteur position $\vec{r}(t)$ et de sa dérivée qui est la vitesse $\vec{V}(t)$.

En mécanique quantique, nous avons vu que la particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ qui représente l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point \vec{r} à l'instant t . Il est donc exclu de connaître avec certitude la position ou la vitesse et de définir une trajectoire du mouvement. Donc, une mesure perturbe le système *par principe* de sorte que l'on ne peut pas connaître simultanément toutes les grandeurs relatives au système quantique. Ainsi, il ne sera pas possible de connaître à la fois temps et énergie ou position et quantité de mouvement (impulsion).

La mécanique quantique impose donc une "limite fondamentale" à la précision avec laquelle on peut spécifier et mesurer des variables de ce type. Cette limite fut établie en 1927 par Heisenberg et est traduite par le principe d'incertitude dont l'expression spécifique et quantitative dans chaque cas particulier s'appelle une relation d'incertitude.

5. 1. Relation position – impulsion (Inégalité spatiale)

Nous verrons plus loin que cette relation peut se déduire de façon rigoureuse à partir du formalisme de la mécanique quantique. A ce stade nous allons l'établir de façon approximative à partir de situations relativement simples.

5. 1. 1. Train d'onde à une dimension

Considérons les trois trains d'onde particuliers d'étendue Δx et constitués d'un certain nombre n de périodes (fig. 2.16). Les longueurs d'onde associées à ces trains sont les longueurs

d'onde de De Broglie : $\lambda = \frac{h}{p}$.

On voit clairement sur la figure 2.16 que mieux on définit la position, moins bien on définit la quantité de mouvement (c.à.d. λ)

Soit Δx l'incertitude sur la position x . Comme mesure grossière on peut prendre pour Δx la longueur du train d'onde :

$$\Delta x = n\lambda = n \frac{h}{p} \tag{2.94}$$

Comme mesure grossière de l'incertitude sur la longueur d'onde on peut prendre $\Delta\lambda = \frac{\lambda}{n}$, car il est certain que λ est d'autant mieux définie que le nombre d'oscillations complètes dans le train est grand.

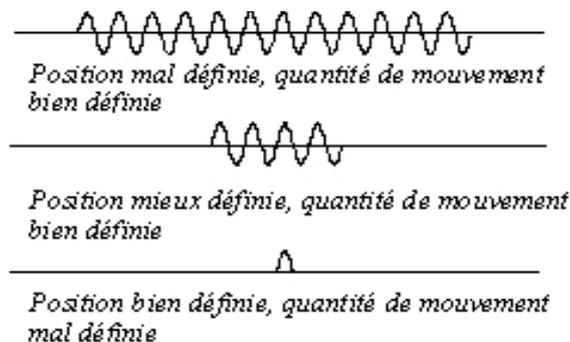


Figure 2.16 : Illustration de la relation d'incertitude position-quantité de mouvement

Or d'après la relation de De Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$ on a :

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta p}{p} = \frac{1}{n} \quad (2.95)$$

Soit donc d'après (2.93)

$$\frac{\Delta p}{p} = \frac{h}{p\Delta x} \quad (2.96)$$

Ou encore $\Delta p \cdot \Delta x \sim h$ (2.97)

Cette relation obtenue de façon purement qualitative est appelée **inégalité** (ou **incertitude**) **spatiale d'Heisenberg**.

On dit que quantité de mouvement et position sont des quantités conjuguées.

5.1.2. Paquet d'ondes carré

La relation de Heisenberg peut être obtenue à partir du paquet d'ondes carré formé de la superposition d'une infinité d'ondes de vecteur d'onde k compris entre $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ et $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$ dans ce cas l'étendue du paquet assimilé à sa partie centrale (fig. 2.14) est égale approximativement à

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k} \text{ soit } \Delta x \cdot \Delta k \approx 2\pi.$$

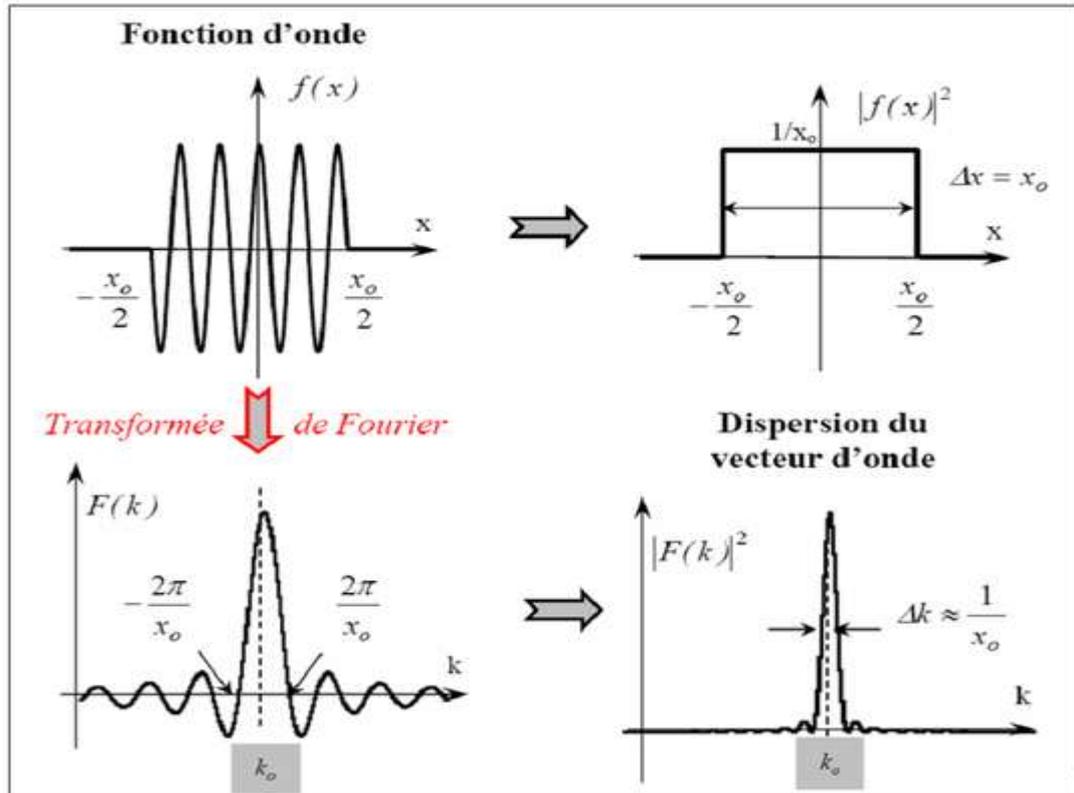
En multipliant à droite et à gauche par \hbar on a :

$$\Delta x \cdot (\hbar \Delta k) \approx 2\pi \hbar \quad (2.98)$$

$$\text{Soit } \Delta x \cdot \Delta p \approx h \quad (2.99)$$

5.1.3. Transformée de Fourier

On peut également atteindre la relation position - impulsion en utilisant la propriété reliant la largeur d'une fonction et de sa transformée de Fourier.



En effet si Δx est la largeur de $\Psi(x, 0)$ et Δk la largeur de $g(k)$, on a toujours $\Delta x \cdot \Delta k \geq 1$, soit,

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \tag{2.100}$$

Cette dernière relation est compatible avec la précédente et se généralise pour les deux autres directions \vec{Oy} et \vec{Oz} .

On aura alors les trois inégalités :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \tag{2.101}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar \tag{2.102}$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar \tag{2.103}$$

qui constituent les relations d'incertitude position-impulsion de Heisenberg.

Ainsi, ces relation d'indétermination montrent que si on connaît parfaitement la vitesse de la particule selon x par exemple, alors $\Delta p_x = 0$ et donc $\Delta x \rightarrow \infty$ pour satisfaire la relation d'indétermination. La description ondulatoire des particules impose donc l'impossibilité de connaître simultanément et avec une grande précision la position et la quantité de mouvement d'une particule matérielle. La réciproque est évidemment identique.

5. 2. Relation temps - énergie (Inégalité temporelle)

Nous avons vu que le maximum central du paquet d'ondes se déplace à la vitesse de groupe

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$$

Un observateur verra donc passer quelque chose de tangible pendant l'intervalle de temps Δt tel que :

$$\Delta t \sim \frac{\Delta x}{V_g} \sim \frac{\Delta k}{\Delta \omega} \Delta x \tag{2.104}$$

D'où
$$\Delta t \cdot \Delta \omega \sim \Delta k \cdot \Delta x \tag{2.105}$$

et en multipliant par \hbar on a :

$$\Delta E \cdot \Delta t = \Delta p \cdot \Delta x \tag{2. 106}$$

Soit d'après précédemment :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \tag{2. 107}$$

dont la généralisation est appelée **inégalité (ou incertitude) temporelle d'Heisenberg**.

La signification de cette relation est surprenante, elle nous enseigne que l'incertitude sur la mesure de l'énergie d'une particule est inversement proportionnelle à la durée de la mesure. Ainsi plus la durée de la mesure est brève, plus l'incertitude sur la valeur de l'énergie est grande. Cela constitue une violation de la loi de conservation de l'énergie de la mécanique classique, violation d'autant plus grande que la durée de la mesure est brève.

Cette relation, propre à la physique microscopique permet d'atteindre la durée de vie d'un phénomène en connaissant sa plage énergétique. Elle nous permet par exemple d'estimer la durée de vie τ d'un niveau d'énergie atomique de largeur naturelle ΔE . τ vaut approximativement :

$$\tau = \frac{\hbar}{\Delta E} \tag{2. 108}$$

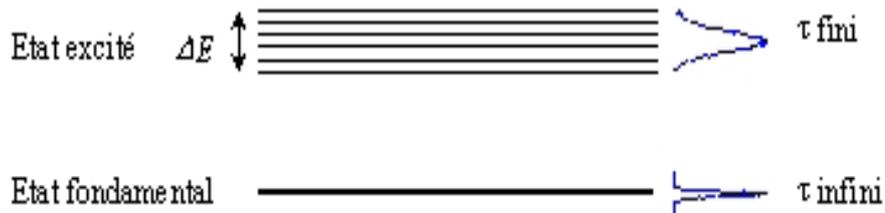


Figure 2.17 : Niveau fondamental et niveau excité d'un atome

Ainsi et comme le montre la figure 2.17, le niveau fondamental pour lequel $\Delta E = 0$ a une durée de vie infinie alors que le niveau excité de largeur ΔE a une durée de vie τ donnée par (2. 108).

Comparaison physique classique/quantique

La mécanique classique est une théorie générale qui explique des phénomènes lorsque la mécanique classique échoue. La physique quantique se ramène à la physique classique lorsque les systèmes étudiés possèdent des masses, des énergies ou des températures suffisamment élevées, ou, formellement, lorsque la constante de Planck devient infiniment petite : $h \rightarrow 0$. Le tableau suivant résume les principales différences entre la mécanique classique et la mécanique quantique.

Classique	Quantique
Position et quantité de mouvement sont toujours exactement déterminés	$\Delta r \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ $\Psi(r, t), P(r, t)$
Spectres d'énergie continus	Énergie quantifiée
$E_c(T = 0) = 0$	$E_c(T = 0) > 0$
Lois de Newton $\vec{f} = m\vec{a} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$	Équation de Schrödinger $\hat{H}\Psi(r, t) = i\hbar\frac{d\Psi}{dt}$