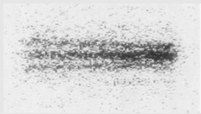
Partie III : Structure de la matière
Chapitre 1

Description quantique de la matière

Plan schématique du cours

I Dualité onde-corpuscule pour la matière

1 - Mise en évidence expérimentale
- Interférence avec des électrons, atomes...



2 - Relation de de Broglie $p = h/\lambda$
($E_c = h\nu$)

II Description quantique d'une particule

1 - Nécessité d'une description quantique ?
inutile si taille système $\gg \lambda$

2 - Fonction d'onde
matière = particule + onde $\Psi(x,t)$
$|\Psi(x,t)|^2$= probabilité de présence

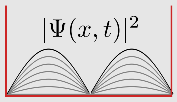
+confinement

3 - Inégalité de Heisenberg
mesure simultanée : $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

III Particule quantique confinée et quantification de l'énergie

1 - Énergie minimale imposée par l'inégalité de Heisenberg

2 - Quantification de l'énergie imposée par la nature ondulatoire
$E_n = \ldots$, n nombre quantique



Ce qu'il faut connaître

(cours : I)

►1 Citer une expérience qui nécessite de décrire la matière en termes ondulatoires. (par ex. les interférences de Young avec des électrons, ou des atomes)

►2 Comment s'écrit la relation de de Broglie qui relie la quantité de mouvement d'une particule à sa longueur d'onde ?

Comment se nomme la constante qui y intervient, et quel est son ordre de grandeur et son unité ?

Rappeler l'expression de la quantité de mouvement d'une particule de masse m et de vitesse v.

(cours : II)

►3 Savoir qu'une particule est décrite par une fonction d'onde, et qu'il y a donc à la fois nature corpusculaire (la particule) et ondulatoire (l'onde de probabilité de présence décrite par la fonction d'onde, qui explique interférences et diffraction).

Quelle est la signification du module au carré de la fonction d'onde $|\Psi(x,t)|^2$?

►4 Comment s'écrit l'inégalité de Heisenberg reliant les indéterminations Δx et Δp_x lors d'une mesure conjointe de position et de quantité de mouvement ?

Ce qu'il faut savoir faire

(cours : II)

►5 Estimer une longueur d'onde de de Broglie, conclure sur la nécessité d'un traitement quantique. → **EC1**, TD I

►6 Évaluer les contraintes imposées par l'inégalité de Heisenberg. → **EC2**

(cours : III)

►7 Expliquer sans calculs pourquoi le confinement et la nature ondulatoire imposent des niveaux d'énergie quantifiés.

Exercices de cours

Exercice C1 – Estimer une longueur d'onde de de Broglie, conclure sur la nécessité d'un traitement quantique

Un joueur de tennis sert à 200 km/h. Son adversaire réceptionne le service. Une description quantique est-elle nécessaire ?
On évalue $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{mv} = 2 \times 10^{-34}$ m (on a pris 60 g pour la balle). Cette longueur d'onde est inférieure à toute distance caractéristique du problème, la description quantique est donc inutile.

Exercice C2 – Évaluer les contraintes imposées par l'inégalité de Heisenberg

1 - On considère une balle de tennis de vitesse 200 km/h. On suppose qu'on mesure sa vitesse avec une incertitude de 10^{-2} m/s. On donne sa masse : $m = 60$ g.

Quelle est l'indétermination sur sa position imposée par l'inégalité de Heisenberg ? Commentaire ?

2 - Par des techniques de refroidissement laser et de confinement magnétique, on peut piéger un nuage d'atomes de sodium. En étudiant les positions des atomes du nuage, on mesure une dispersion $\Delta x \simeq 3\,\mu$m. En étudiant les vitesses de ces atomes, on mesure une dispersion $\Delta v \simeq 2\,\mathrm{mm}\cdot\mathrm{s}^{-1}$. On donne la masse d'un atome de sodium : $m = 4 \times 10^{-26}$ kg.

À quel point peut-on améliorer le piégeage en gardant la même dispersion des vitesses ?

Cours

Constantes utiles

Constante de Planck : $h = 6{,}63 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$ (nom, unité et OG à connaître).
Constante de Planck réduite : $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1{,}05 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}$.
Un électron-volt est une unité d'énergie utilisée en physique atomique. $1\,\mathrm{eV} = 1{,}602 \times 10^{-19}$ J.

I – Dualité onde-corpuscule pour la matière

Dans un précédent chapitre (Modéliser la lumière), nous avons vu que la lumière a un comportement à la fois ondulatoire et corpusculaire : nous avions parlé de dualité onde-corpuscule. Nous nous tournons maintenant vers la matière, et nous allons voir que la dualité onde-corpuscule s'applique aussi aux électrons, aux atomes, et de manière générale aux particules massives, qui donc peuvent se comporter comme des ondes !

1 – Mise en évidence expérimentale

Document 1 : Interférence avec des atomes

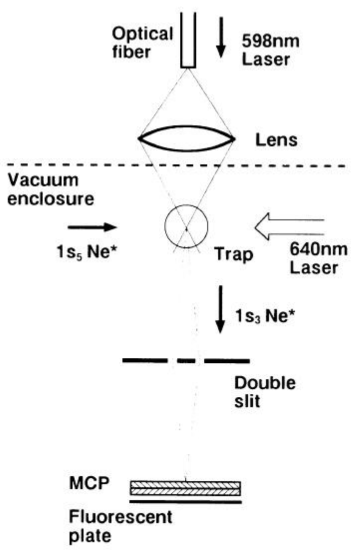


FIG. 1. Schematic experimental configuration. Details of the trap are not shown.

FIG. 2. The interference fringe pattern on the MCP for atoms with the initial velocity of approximately zero. The vertical length of the slit image is 2.8 mm. The spatial resolution of the picture is 20 and 32 μm for the horizontal and vertical directions, respectively. The narrowing of the fringe separation on the upper part is due to the damage of the double-slit structure. This figure contains approximately 6×10^3 atomic counts.

Dès 1927, des expériences ont mis en évidence que la matière peut se comporter de manière ondulatoire : d'une part par une expérience de diffraction d'électrons (G. P. Thomson), et d'autre part via des interférences avec des électrons (Davison et Germer). Nous décrivons ici une expérience plus récente, réalisée en 1992 ("Double-slit interference with ultracold metastable neon atoms", Shimizu et al., Physical Review A).

Il s'agit de piéger quelques millions d'atomes de néon (masse individuelle $m = 3{,}3 \times 10^{-26}$ kg), d'abord situés dans une enceinte à vide, puis envoyé dans un piège laser où ils sont refroidit à quelques millikelvins. La taille du piège est de l'ordre de 1 mm. Les atomes sont ensuite libérés, et ils chutent vers deux fentes séparées d'une distance $a = 6{,}0\,\mu$m ("double slit" sur la figure). La largeur de chaque fente est de $2{,}0\,\mu$m. Le piège est situé à $d = 76$ mm au dessus des fentes, elles-mêmes situées à $D = 113$ mm d'un écran ("microchannel plate detector"). L'écran enregistre l'impact de chaque atome individuellement, cf figure 2. Ces impacts se distribuent suivant un système de franges semblable à celui obtenu dans le cas des interférences lumineuses ou acoustiques : des zones sombres (beaucoup d'impacts donc flux d'atomes intense), parallèles à la direction des fentes, alternent avec des zones claires (peu ou pas d'impacts donc flux d'atomes faible).
On donne l'expression de l'interfrange (espacement entre deux minimum successifs des franges) dans le cas d'une expérience des trous d'Young avec de la lumière : $i = \dfrac{\lambda D}{a}$, avec D la distance entre les fentes et l'écran, a l'écart entre les deux fentes, et λ la longueur d'onde de la lumière utilisée.

$\rightarrow$ On pourra aussi regarder la vidéo mise en lien sur le site de la classe.

$\rightsquigarrow_1$ En quoi cette expérience montre-t-elle que les atomes se comportent de façon ondulatoire ?

2 – Relation de de Broglie

Rappels : dans la théorie quantique, la lumière est décrite par des photons, associés à des ondes (fonction d'onde $\Psi(x,t)$).

$\rightsquigarrow_2$ Rappeler la relation entre la fréquence ν de l'onde et l'énergie du photon, et celle entre la longueur d'onde λ de l'onde et la quantité de mouvement du photon.
$E = h\nu$ et $p = \dfrac{h}{\lambda}$

En 1923, de Broglie (se prononce De "Breuille") propose d'étendre ces relations à toute particule, même massive. Ceci sera rapidement justifié expérimentalement par des expériences de diffraction ou d'interférences d'électrons, comme nous allons le voir ensuite.

Hypothèses de de Broglie

On considère une particule de masse m et de vitesse $\vec{v}$.

Du point de vue corpuscule :

- Sa quantité de mouvement est $\vec{p} = m\vec{v}$, soit en norme $p = mv$ (cours de mécanique).
- Son énergie cinétique est $E_c = \dfrac{1}{2}mv^2$.

Du point de vue ondulatoire, elle est associée à une onde :

- De fréquence ν qui vérifie $\boxed{E_c = h\nu.}$
- De longueur d'onde qui vérifie $\boxed{p = \dfrac{h}{\lambda}.}$

Remarque : En remplaçant λ par $\dfrac{2\pi}{k}$, on obtient $p = \dfrac{h}{2\pi}k = \hbar k$, soit pour les vecteurs $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Exemple de vérification expérimentale :
On considère à nouveau l'expérience du document 1. Les atomes arrivent au niveau de l'écran avec une vitesse donnée par celle atteinte après une chute libre d'environ $h = 190$ mm, donc $v = \sqrt{2gh} \simeq 2$ m/s.

$\rightsquigarrow_3$ En utilisant la relation de de Broglie entre λ et p, en déduire une expression de p puis la valeur de la vitesse v des atomes. Cette vitesse est-elle bien égale à 2 m/s environ ?
On sait que la vitesse des atomes est de l'ordre de $v = 2$ m/s.
Déterminons cette vitesse à partir de la figure d'interférence, sur laquelle on estime que $i = 0{,}2$ mm. On a la relation $i = \dfrac{\lambda D}{a}$. On utilise $\lambda = h/p$, d'où $i = \dfrac{hD}{pa} = \dfrac{hD}{mva}$, et on isole $v = \dfrac{hD}{mia} = 1{,}9$ m/s.
Les deux résultats sont bien cohérents, ce qui valide (en tout cas pour cette expérience) la relation de de Broglie liant p et λ.
Rq : on peut aussi calculer que $\lambda = 0{,}01\,\mu$m.

II – Description quantique d'une particule

1 – Quand une description quantique est-elle nécessaire ?

Nécessité de la description quantique

Une description quantique est nécessaire lorsque la longueur d'onde de de Broglie est comparable ou supérieure à la taille caractéristique du système étudié.
Inversement, si λ est très inférieure à cette taille, une description classique (mécanique classique) est suffisante.
En résumé :
Description quantique inutile si $\lambda \ll$ taille système.

$\rightsquigarrow_4$ **EC1**

Exemples :

Objet	Ordre de grandeur utilisé	Longueur d'onde de de Broglie	À comparer à...	Quantique nécessaire ?
Balle de tennis	vitesse $200\,\mathrm{km/h}$	$2 \times 10^{-34}\,\mathrm{m}$	$1\,\mathrm{cm}$ (corde raquette)	
Molécules dans un gaz de dioxygène	$T = 20\,°\mathrm{C}$, $p = 1\,\mathrm{bar}$	$0{,}026\,\mathrm{nm}$	$3{,}5\,\mathrm{nm}$ (distance entre molécules)	
Électron dans un atome	$E_c \simeq 10\,\mathrm{eV}$	$4 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$	$10^{-10}\,\mathrm{m}$ (taille d'un atome)	

2 – Fonction d'onde

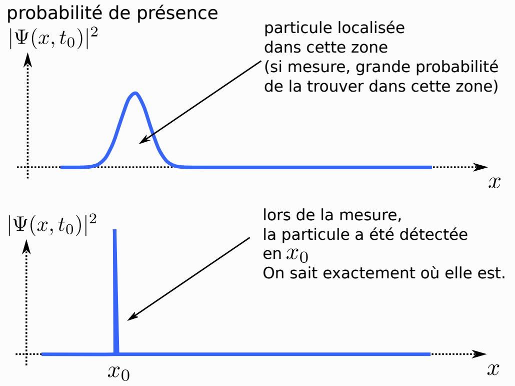
En mécanique classique, les particules sont décrites par leur position et leur vitesse à un instant t. La notion de trajectoire existe. Si on se donne la position initiale et la vitesse initiale, alors on peut prédire exactement toute la suite du mouvement.

En mécanique quantique, ce n'est plus le cas. C'est en effet ce que montrent les expériences d'interférence : en préparant les particules de la même façon initialement, elles arrivent en des points aléatoires sur l'écran. L'explication de ces figures d'interférence ou de diffraction est obtenue de la même façon que pour le photon (chapitre 1, optique) :

Fonction d'onde

Une particule possède un comportement à la fois ondulatoire et corpusculaire (on parle de dualité onde-particule).

- Une particule est associée à une onde $\Psi(x,t)$ (appelée fonction d'onde).
  $\Psi(x,t) \in \mathbb{C}$.
- La probabilité de mesurer la particule entre les points x et $x + \mathrm{d}x$ à un instant t est donnée par $\mathrm{d}P = |\Psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$.



La notion de trajectoire $t \mapsto \vec{OM}(t)$ est donc remplacée par celle de la fonction d'onde $(x,t) \mapsto \Psi(x,t)$.

On dit aussi que $|\Psi(x,t)|^2$ est la probabilité de présence de la particule en x.

Remarques :

- Le fait de ne pas pouvoir attribuer de position exacte avant de faire une mesure est une caractéristique de la matière elle-même, et n'est **pas du tout** liée une éventuelle imprécision des appareils de mesure. D'ailleurs l'acte de mesurer permet de connaître aussi précisément que souhaité où se situe la particule (avec des appareils précis). Mais on ne pouvait pas prédire, avant la mesure, où cela serait.

- La fonction d'onde est normalisée, car la somme de toutes les probabilités est égale à 1 :

$$\sum_{\text{espace}} \mathrm{d}P = 1, \quad \text{donc} \quad \int_{x=-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x = 1.$$

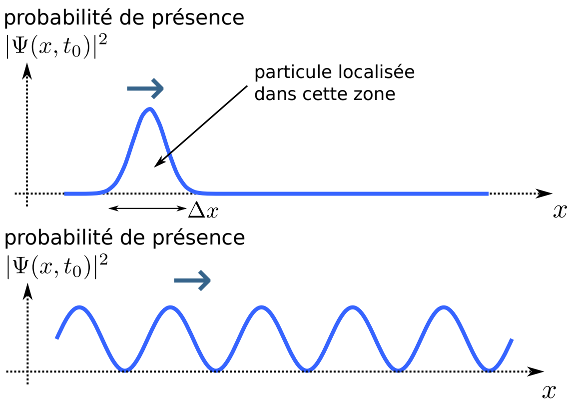
- En mécanique classique, l'équation qui donne l'évolution de la position est la loi de Newton (le PFD). En mécanique quantique, cette loi d'évolution est l'équation de Schrödinger, qui s'écrit $\mathrm{i}\dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$, avec V le potentiel d'interaction. Elle n'est pas au programme.

  L'existence de la fonction d'onde, son interprétation en terme de probabilité, et l'équation d'évolution de Schrödinger, sont les postulats de base de la théorie de la mécanique quantique. Ils sont justifiés par le succès avec lequel cette théorie permet de prédire et d'expliquer des phénomènes.

3 – Inégalité de Heisenberg

En mécanique classique, il est possible de mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement mv d'une particule, avec autant de précision que souhaité.

En mécanique quantique, ce n'est plus le cas. La nature ondulatoire et le lien entre p et $1/\lambda$ imposent ceci (schémas ci-dessous).



- En haut : la localisation x de la particule est assez précise.

  Mais sa longueur d'onde λ est mal définie, et donc sa quantité de mouvement $p = h/\lambda$ également.

  $\rightarrow$ Δx petit et Δp grand.

- En bas : la longueur d'onde λ est bien définie, donc sa quantité de mouvement $p = h/\lambda$ également.

  Mais la probabilité de présence est très étalée, donc la position mal définie.

  $\rightarrow$ Δp petit et Δx grand.

Inégalité de Heisenberg

On considère une particule. On note Δx l'indétermination sur sa position x, et Δp_x l'indétermination sur sa quantité de mouvement p_x (c'est la composante selon x de $\vec{p}$).
Il est impossible de réduire en même temps ces deux indéterminations, car elles sont contraintes par l'inégalité suivante :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Dans les systèmes fortement quantique, l'inégalité est souvent saturée et on peut utiliser, en ordre de grandeur, une égalité.

Attention, rien n'empêche de mesurer la position ou la quantité de mouvement d'une particule aussi précisément que possible : l'inégalité interdit juste la connaissance des deux **simultanément**.

$\rightsquigarrow_5$ **EC2**

Document 2 : Une application de l'inégalité d'Heisenberg

Nous allons interpréter la diffraction à l'aide de l'inégalité de Heisenberg. On considère un faisceau de particules (ou de photons) décrit de façon ondulatoire, dont on note λ la longueur d'onde.

Ce faisceau est diffracté par une ouverture de taille a. On note θ le demi-angle d'ouverture du cône de diffraction.

Considérons une particule. Le passage par une fente de largeur a implique que l'on contraint sa position à être dans l'ouverture, donc dans un intervalle de largeur $\Delta x = a$. D'après l'inégalité de Heisenberg, ceci va imposer une indétermination Δp_x sur la composante selon x de sa quantité de mouvement.

Notons donc la quantité de mouvement $\vec{p}$ de la particule, et p sa norme. Sa composante selon x est donnée par $p_x = p\sin\alpha \simeq p\alpha$.

L'indétermination sur p_x se traduit donc par une indétermination sur l'angle α pris par la direction de la particule : $\Delta p_x \simeq p\,\Delta\alpha$.

Or l'ensemble des valeurs prises par l'angle α est donné par l'ouverture θ du cône de diffraction : $\Delta\alpha = \theta$.

On a donc $\Delta p_x \simeq p\theta$.

Il est alors possible de montrer, en utilisant la relation de de Broglie et l'inégalité d'Heisenberg saturée (donc sous forme d'égalité approchée), qu'on retrouve bien la formule de l'optique ondulatoire : $\theta \simeq \dfrac{\lambda}{a}$.

$\rightsquigarrow_6$ Démontrer l'affirmation de la dernière phrase du document.

On a $\Delta p_x \simeq p\theta = \dfrac{h}{\lambda}\theta$.

Avec l'inégalité d'Heisenberg il vient : $\dfrac{\hbar}{2} \leq \Delta x \Delta p_x \simeq a \times \dfrac{h}{\lambda}\theta$, soit donc $\theta \geq \dfrac{\lambda}{a}$ (en oubliant le facteur 4π car ordre de grandeur).

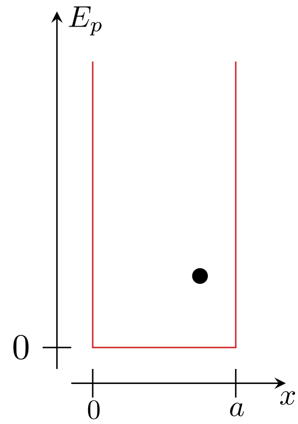
On trouve donc que la restriction du passage par une fente de taille a impose, via l'inégalité d'Heisenberg, une indétermination sur la quantité de mouvement, donc sur l'angle du faisceau en sortie, qui est au moins égale à la formule donnée par l'optique ondulatoire.

III – Particule quantique confinée et quantification de l'énergie

Une particule est dite confinée lorsqu'elle est contrainte de rester dans une zone limitée de l'espace.

Exemples : bille dans une cuvette, mobile accroché à un ressort, molécule de gaz dans un récipient, électron dans un atome, etc.

En mécanique classique, cela n'impose rien de remarquable. Nous allons voir que ce n'est pas le cas en mécanique quantique.



1 – Énergie minimale imposée par l'inégalité de Heisenberg

Considérons une particule confinée dans une zone de taille caractéristique a.

$\rightsquigarrow_7$ Montrer que l'utilisation de l'inégalité d'Heisenberg impose une quantité de mouvement minimale, et donc une vitesse et une énergie minimale.

On a $\Delta x \simeq a$ et $\Delta p \simeq p = mv$. D'où $p \geq \dfrac{\hbar}{2\Delta x} \simeq \dfrac{\hbar}{2a}$.

On a donc $p_{\min} = \dfrac{\hbar}{2a}$,

$v_{\min} = \dfrac{\hbar}{2ma}$,

$E_{c,\min} = \dfrac{1}{2}mv_{\min}^2 = \dfrac{\hbar^2}{8ma^2}$.

Cette énergie minimale est appelée énergie fondamentale. On constate que plus le confinement est étroit (a petit), plus cette énergie minimale est grande.

2 – Quantification de l'énergie imposée par la nature ondulatoire

Poussons plus loin le raisonnement, dans le cas particulier où la particule est confinée dans un puit infini à une dimension qui s'étend de $x = 0$ à $x = a$.

- La particule confinée est décrite par sa fonction d'onde $\Psi(x,t)$.
- Par "puit infini" on veut dire que la probabilité de présence de la particule est nulle en dehors du puit.

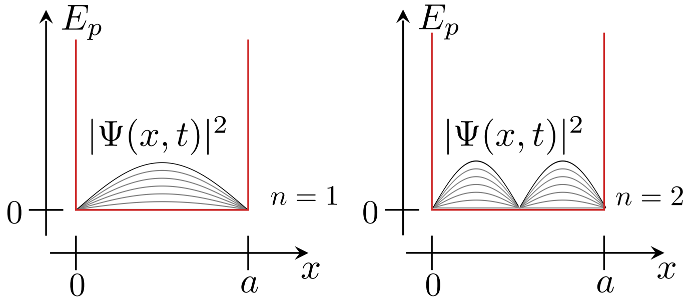
  $\rightsquigarrow_8$ Qu'est-ce que cela impose sur $\Psi(x = 0,t)$ et $\Psi(x = a,t)$?

  Qu'ils sont nuls.
- Classiquement, la particule, de vitesse non nulle (cf sous-partie 1.) va faire des allers-retours en rebondissant contre les parois.

  Quantiquement, cela signifie qu'il y a une onde $\Psi(x,t)$ se propageant vers la droite, et une autre se propageant vers la gauche. Les deux se superposent.

$\rightarrow$ Toutes les conditions sont réunies pour que $\Psi(x,t)$ soit une onde stationnaire, exactement comme dans le cas de la corde de Melde.

On a donc le schéma ci-contre (pour les deux premiers modes).



$\rightsquigarrow_9$ Montrer que la longueur d'onde de de Broglie de la particule ne peut prendre que des valeurs discrètes, repérées par un indice entier $n \in \mathbb{N}^*$ (on dit qu'elle est quantifiée). Puis que la quantité de mouvement est également quantifiée, tout comme l'énergie.

Il y a $\lambda/2$ entre deux nœuds, et vu les conditions aux limites il y a un nombre entier de ventres, donc on a

$$a = n \times \frac{\lambda}{2}, \quad \text{soit} \quad \lambda_n = \frac{2a}{n},\, n \in \mathbb{N}^*.$$

Ensuite, on en déduit la quantité de mouvement $p_n = \dfrac{h}{\lambda_n} = \dfrac{nh}{2a}$ et l'énergie cinétique $E_n = \dfrac{p_n^2}{2m} = n^2 \times \dfrac{h^2}{8a^2}$ $(n \in \mathbb{N}^*)$.

Conclusion : l'énergie de la particule ne peut prendre que certaines valeurs, repérées par un entier n.

Ce raisonnement a été appliqué au cas simple du puit infini. Il est possible de l'appliquer au cas d'un électron piégé dans le champ électrique d'un noyau, et de montrer rigoureusement (en cherchant les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger) que l'énergie de l'électron est quantifiée selon une certaine formule $E_n = ...$
Ceci permet d'expliquer les spectres de raies des atomes !

Quantification et confinement

On retiendra que la nature quantique + le confinement impliquent une quantification de l'énergie : l'énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes, repérées par un entier n.

n est appelé un “nombre quantique”. Il permet de repérer l'état quantique dans lequel est la particule.