Sébastien Bourdreux
Agrégation de Physique
Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand

Dualité onde-corpuscule
Relations de Louis de Broglie
Inégalités de Heisenberg
Applications

mai 2004

Table des matières

Chapitre 1

Naissance de la mécanique quantique

Au XVIIème siècle, Newton considérait la lumière comme un jet de corpuscules, qui par exemple rebondissaient lors de la réflexion sur un miroir.
Dans la première moitié du XIXème siècle, démonstration fut faite de la nature ondulatoire de la lumière au travers d'expériences mettant en évidence les phénomènes d'interférences ou de diffraction, ce qui permit par la suite l'intégration de l'optique dans la théorie électromagnétique. Dans ce cadre, la vitesse c de la lumière est reliée à des constantes électriques et magnétiques, et des phénomènes de polarisation lumineuse s'interprètent comme des manifestations du caractère vectoriel du champ électrique.

1.1 Retour aux sources

Une première série de faits expérimentaux impose une révision radicale de la théorie du rayonnement de Maxwell-Lorentz et une retour partiel à l'ancienne théorie corpusculaire. Les premières difficultés apparaissent lorsque l'on étudie la distribution spectrale du rayonnement électromagnétique en équilibre thermodynamique avec la matière. Le cas type est celui du *corps noir*, qui absorbe la totalité du rayonnement qu'il reçoit. Des raisonnements thermodynamiques très généraux montrent que le rayonnement émis par un tel corps dépend uniquement de sa température à l'exclusion de toute autre propriété. Les tentatives de théorisation de cette distribution, relevant de la thermodynamique statistique, déduite de la théorie classique, sont en violent désaccord avec l'expérience.
En 1900, Max Planck parvient à lever la difficulté en renonçant à la loi classique d'interaction entre matière et rayonnement. Il émet l'hypothèse que ces échanges d'énergie matière-rayonnement se font non pas de façon continue mais par des quantités discrètes et indivisibles ou *quanta* d'énergie. Il montre alors que le quantum d'énergie est nécessairement proportionnel à la fréquence ν du rayonnement,

$$E = h\,\nu$$

et obtient ainsi une expression du spectre en accord avec la distribution expérimentale en ajustant convenablement la constante de proportionnalité h, désormais connue sous le nom de *constante de Planck*.
Lors de sa publication, l'hypothèse de Planck parut inacceptable, la quasi-totalité des physiciens se refusant à y voir autre chose qu'un artifice mathématique heureux que l'on parviendrait à

expliquer un jour dans la doctrine classique. En effet, la loi de distribution de Planck

est une loi macroscopique déduite de cette hypothèse par des méthodes statistiques : elle n'en constitue qu'une confirmation indirecte, aussi douteuse que la validité de l'hypothèse atomique avait pu l'être avant sa confirmation à l'échelle microscopique.

1.2 Deux expériences : deux pieds dans le plat

1.2.1 L'effet photoélectrique

Le premier pas vers le retour à une théorie corpusculaire est dû à Einstein et son mémoire de 1905. L'attitude générale vis à vis de la théorie de Planck était de dire que "tout se passe comme si" les échanges d'énergie entre le rayonnement et le corps noir se font par quanta et de s'efforcer de réconcilier cette hypothèse *ad hoc* avec la théorie ondulatoire.
Prenant le contre-pied de cette attitude et allant plus loin que Planck qui se borne à introduire le discontinu dans le mécanisme d'absorption ou d'émission, Einstein postule que le rayonnement lumineux lui-même consiste en un jet de corpuscules, les photons, d'énergie $h\nu$ et de vitesse c. Il montre ensuite comment cette hypothèse surprenante permet de rendre compte d'un certain nombre de phénomènes jusqu'ici demeurés inexpliqués, parmi lesquels figure notamment l'effet photoélectrique.
Il s'agit de l'émission d'électrons observée lorsqu'on irradie sous vide un métal alcalin avec de la lumière ultraviolette. L'intensité du courant électrique produit est proportionnelle à l'intensité du rayonnement reçu par le métal, mais la vitesse des électrons dépend de la fréquence, non pas de l'intensité[1], et ceci quelle que soit la distance de la source lumineuse. Seul le nombre d'électrons émis par seconde est proportionnel à l'intensité, donc inversement proportionnel au carré de la distance à la source.
L'explication d'Einstein est très simple. Quelle que soit la distance parcourue par la lumière depuis son émission, celle-ci se présente sous forme de corpuscules d'énergie $h\nu$. Lorsqu'un de ces photons rencontre un électron du métal, il est entièrement absorbé et l'électron reçoit l'énergie $h\nu$; en quittant le métal, celui-ci doit fournir un travail égal à son énergie de liaison dans le métal, si bien que les électrons observés ont une énergie cinétique bien précise,

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - E_l$$

Cette théorie quantitative est entièrement vérifiée par l'expérience. La constante E_l est - conformément aux prévisions - une caractéristique du métal irradié ; quant à la constante h, elle a bien la même valeur numérique que celle qui figure dans l'expression du spectre du rayonnement de corps noir.

En présence du succès de cette théorie corpusculaire, il faut examiner si cette bonne vieille théorie ondulatoire classique est en mesure d'expliquer elle aussi l'effet photoélectrique. Une onde lumineuse transporte une certaine quantité d'énergie proportionnelle à son intensité et peut céder tout ou partie de cette énergie au fur et à mesure qu'elle pénètre dans le métal. L'énergie progressivement accumulée dans le métal est éventuellement concentrée sur certains

[1] Lénard, 1902.

électrons qui parviennent ainsi à s'échapper. On peut imaginer que, par un mécanisme qui reste à préciser, un électron ne puisse s'échapper avant d'avoir reçu une quantité d'énergie égale à $h\nu$.
La différence essentielle ici avec la théorie corpusculaire réside dans l'accumulation continue et progressive d'énergie dans le métal. En conséquence, l'émission photoélectrique ne peut pas être instantanée et se produire avant que le métal ait au moins reçu l'énergie $h\nu$. Si l'on opère sur des particules métalliques suffisamment fines, ce délai minimum entre le début de l'irradiation et le début de l'émission peut être rendu suffisamment long pour être décelé expérimentalement.

Des expériences ont été conduites dans ce but par Meyer et Gerlach (1914) sur des poussières de métaux. Connaissant l'intensité du rayonnement et les dimensions des poussières, ils pouvaient déterminer le temps d'irradiation minimum pour qu'une poussière absorbe l'énergie $h\nu$ nécessaire à l'émission d'un électron, soit quelques secondes dans les conditions où ils opéraient. Résultat sans appel : l'émission d'électrons démarre dès le début de l'irradiation. Conclusion non moins sèche : la théorie ondulatoire de la lumière, dans sa forme classique du moins, est tout à fait incapable de rendre compte de l'effet photoélectrique.

1.2.2 L'effet Compton

En 1924, Compton observa la diffusion des rayons X par les électrons libres ou faiblement liés. La longueur d'onde du rayonnement diffusé est supérieureà celle du rayonnement incident ; la différence $\Delta\lambda$ varie en fonction de l'angle θ entre l'angle de propagation du rayonnement incident et celle dans laquelle on observe la lumière diffusée, selon la formule

$$\Delta\lambda = 4\pi \frac{\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Cette grandeur est indépendante de λ. Compton et Debye ont montré que le phénomène Compton est une simple collision élastique entre un photon de la lumière incidente et un des électrons de la cible irradiée.

Puisqu'ils ont la vitesse c, les photons sont des corpuscules de masse nulle, conformément à la relation de Relativité

$$E^2 - p^2c^2 = m^2c^4 = 0$$

L'impulsion p et l'énergie E d'un photon sont donc liées par la relation

$$E = p\,c$$

Soit une onde plane monochromatique

$$e^i\, 2\pi(\frac{\vec{e_k} \cdot \vec{r}}{\lambda} - \nu.t)$$

En accord avec l'hypothèse d'Einstein, cette onde représente un jet de photons d'énergie $h\nu$. L'impulsion de ces photons est évidemment dirigée selon $\vec{e_k}$ et son module est

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

On verra que cette relation est un cas particulier de la relation de De Broglie. Introduisons enfin la pulsation $\omega = 2\pi\nu$ et le vecteur d'onde $\vec{k} = (2\pi/\lambda)\,\vec{e_k}$. Ainsi,

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

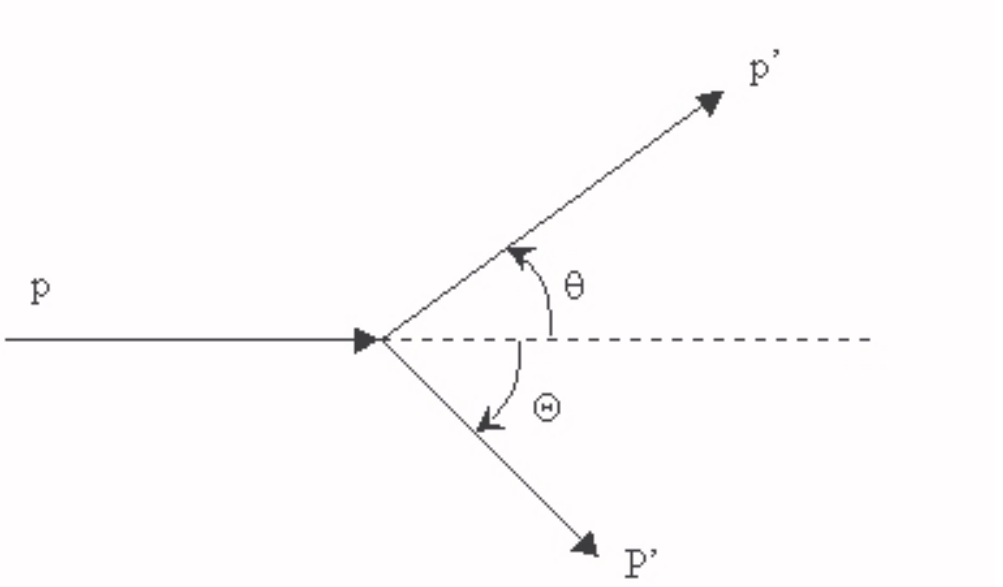
$$E = \hbar\omega$$

La théorie corpusculaire de l'effet Compton consiste à écrire que l'énergie et l'impulsion totale sont conservées dans la collision élastique entre le photon incident et l'électron. Les équations de conservation sont

$$\vec{p} = \vec{p'} + \vec{P'}$$

$$mc^2 + pc = \sqrt{P'^2c^2 + m^2c^4} + p'c$$

où $\vec{p}$,$\vec{p'}$ sont les impulsions initiale et finale du photon, $\vec{P'}$ l'impulsion de recul de l'électron après collision.



Ces équations permettent de définir complètement la collision, connaissant les conditions initiales et la direction d'émission du photon diffusé. On peut aisément déduire la formule de Compton qui se trouve ainsi théoriquement expliquée. Depuis les travaux de Compton, toutes les autres prévisions de cette théorie ont été confirmées expérimentalement : coïncidence de l'émission, etc...
Comparons ces résultats avec la prévision de la théorie classique. La théorie de Maxwell-Lorentz prévoit l'absorption d'une partie de l'énergie électromagnétique incidente par chaque électron soumis à l'irradiation et sa réémission sous forme de radiation de même fréquence. A l'inverse de celle du rayonnement absorbé, l'impulsion totale du rayonnement émis est nulle. Le processus de diffusion de lumière s'accompagne donc d'un transfert continu d'impulsion [2] du rayonnement électromagnétique à l'électron irradié qui subit une accélération progressive dans la direction de propagation de l'onde incidente. La loi d'absorption et de réémission à même fréquence est

[2] C'est la pression de radiation.

valable dans le référentiel où l'électron est au repos. Dès que l'électron est en mouvement, les fréquences observées dans le référentiel du laboratoire en diffèrent par suite de l'effet Doppler. Le déplacement de longueur d'onde $\Delta\lambda$ dépend de l'angle θ d'observation du rayonnement diffusé. Un calcul simple donne

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{P_{cl}.c}{E_{cl} - P_{cl}.c} \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

où P_{cl} est l'impulsion de l'électron (en mouvement dans la direction de propagation), λ la longueur d'onde de l'onde incidente et $E_{cl} = \sqrt{m^2c^4 + P_{cl}^2.c^2}$ son énergie.

1.3 L'expérience des fentes d'Young

Nous voilà donc revenus à une conception corpusculaire de la lumière. Est-ce à dire qu'il faille abandonner la théorie ondulatoire ? Certainement pas : nous allons voir que les phénomènes typiquement ondulatoires mis en évidence par les expériences d'interférence ou de diffraction seraient inexplicables dans un cadre purement corpusculaire.
En analysant l'expérience bien connue des fentes d'Young, nous allons être conduits à la conclusion suivante : une interprétation complète des phénomènes ne peut être obtenue qu'en conservant à la fois l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire de la lumière, bien qu'il paraissent à priori inconciliables. Nous verrons que ce paradoxe peut être résolu par l'introduction de notions quantiques fondamentales.

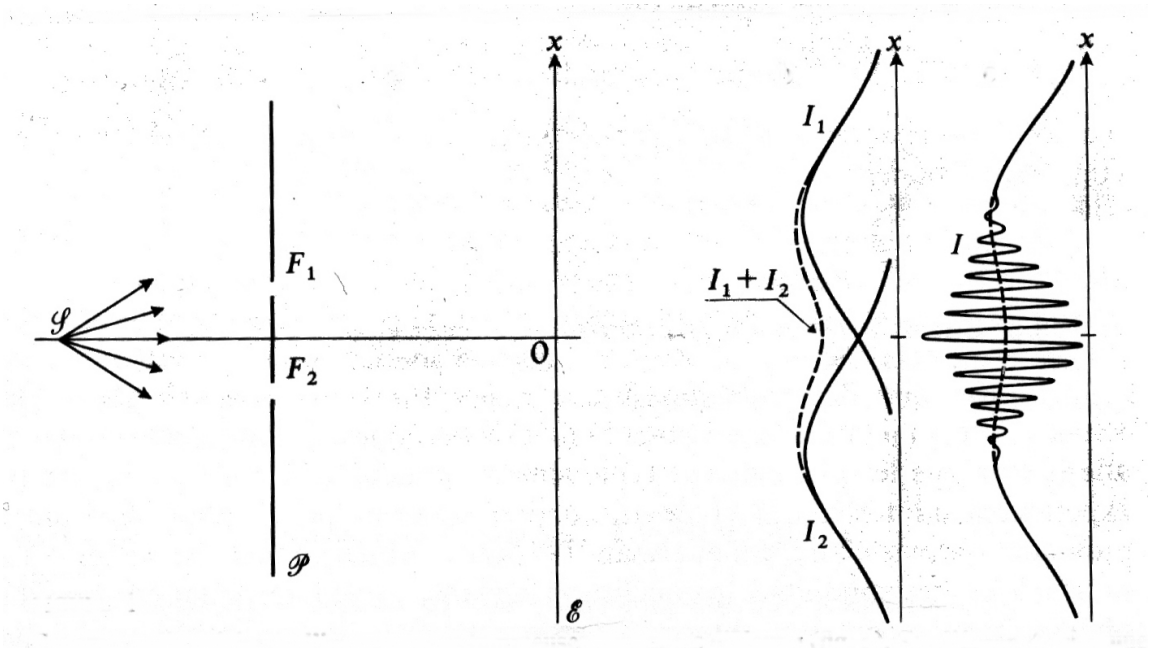
1.3.1 Analyse de l'expérience

La lumière monochromatique émise par la source S tombe sur une plaque opaque P percée de deux fentes fines, F_1 et F_2, qui éclairent l'écran d'observation E (plaque photo par exemple). Si l'on obstrue F_1, on obtient sur E une répartition d'intensité $I_1(x)$ qui est la tache de diffraction de F_1 ; de même, lorsque F_1 est bouchée, la tache de diffraction de F_2 est décrite par $I_2(x)$. Quand les deux fentes F_1 et F_2 sont ouvertes simultanément, on observe sur l'écran un systèmes de franges d'interférence : on constate en particulier que l'intensité I(x) correspondante n'est pas la somme des intensités produites par F_1 et F_2 séparément

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

Comment pourrait-on envisager d'expliquer, au moyen d'une théorie corpusculaire - dont la nécessité est clairement apparue précédemment -, les résultats expérimentaux que nous venons de décrire ? L'existence d'une tache de diffraction, lorsqu'une seule des fentes est ouverte, pourrait par exemple s'expliquer par l'influence des chocs des photons sur les bords de la fente ; une telle explication demanderait bien sûr des précisions et une étude plus détaillée montrerait qu'elle n'est pas suffisante. Mais concentrons plutôt notre attention sur le phénomène d'interférence. On pourrait tenter de l'expliquer en faisant intervenir une interaction entre les photons qui passent par la fente F_1, et ceux qui passent par la fente F_2 ; cette explication conduirait à la prédiction suivante : si l'on diminue l'intensité de la source S [3] jusqu'à ce que les photons arrivent pratiquement un par un sur la plaque puis sur l'écran, l'interaction entre les photons doit diminuer et, à la limite, s'annuler : les franges d'interférence devraient donc disparaître.

[3] C'est-à-dire le nombre de photons qu'elle émet par seconde.



La théorie ondulatoire, elle, fournit une interprétation toute naturelle des franges. L'intensité lumineuse en un point de l'écran E est proportionnelle au carré de l'amplitude du champ électrique en ce point. Si $E_1(x)$ et $E_2(x)$ représentent en notation complexe, les champs électriques produits en x par les fentes F_1 et F_2 respectivement (elles se comportent comme des sources secondaires), le champ total[4] régnant en ce point lorsque F_1 et F_2 sont toutes deux ouvertes est

$$E(x) = E_1(x) + E_2(x)$$

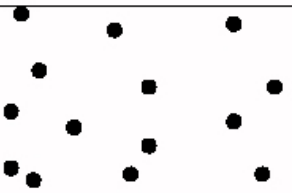
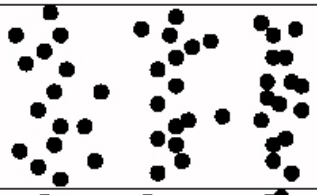
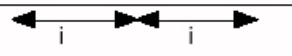
d'où, en utilisant la notation complexe,

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2$$

Comme d'autre part les intensités $I_1(x)$ et $I_2(x)$ sont respectivement proportionnelles à $|E_1(x)|^2$ et $|E_2(x)|^2$, on remarque que I(x) diffère de $I_1(x) + I_2(x)$ par une terme d'interférence, qui dépend de la différence de phase entre E_1 et E_2, et dont la présence explique les franges. La théorie ondulatoire prévoit donc que, si l'on diminue l'intensité de la source S, les franges vont simplement diminuer elles aussi d'intensité, mais persister.
Que se passe-t-il en fait lorsque S émet les photons pratiquement un par un ? Ni les prédictions de la théorie ondulatoire, ni celles de la théorie corpusculaire ne sont vérifiées. En effet,

- si l'on recouvre l'écran E d'une plaque photo, et si l'on augmente suffisamment le temps de pose de façon à recevoir un grand nombre de photons, on constate au développement que les franges n'ont pas disparu : il faut donc rejeter l'interprétation purement corpusculaire selon laquelle les franges sont dues à une interaction entre photons
- on peut au contraire exposer la plaque photo pendant un temps suffisamment court pour qu'elle ne puisse recevoir que quelques photons. ON constate alors que chaque photon produit sur E un impact localisé, et non une figure d'interférence d'intensité très faible : il faut donc aussi rejeter l'interprétation purement ondulatoire.

[4]On ne tient pas compte de la polarisation, c'est-à-dire du caractère vectoriel du champ électrique.

Dans les premiers moments de l'expérience, des impacts nets apparaissent sur la plaque photo. Ils se produisent aléatoirement dans le temps et paraissent disposés au hasard sur le film.	
Au fur et à mesure que le temps s'écoule, les impacts s'accumulent, toujours aléatoirement dans le temps, mais ils semblent concentrés sur certaines régions privilégiées de la plaque photo.	
Dans la limite des temps longs, les régions privilégiées se saturent d'impacts et font apparaître le système de franges calculé classiquement.	
Interfrange de la figure de diffraction classique	

En réalité, au fur et à mesure que les photons arrivent sur la plaque photo, il se produit le phénomène suivant : leurs impacts se produisent de manière *aléatoire*, et ce n'est que lorsqu'un grand nombre d'entre eux est arrivé sur E que la répartition des impacts semble avoir un aspect continu ; la densité des impacts en chaque point de E correspond aux franges d'interférence : elle est maximum sur une frange brillante, nulle sur une frange noire. On peut donc dire que, au fur et à mesure de leur arrivée, les photons *reconstituent* la figure d'interférence.

Le résultat de cette expérience conduit donc apparemment à un paradoxe qui, dans le cadre de la théorie corpusculaire par exemple, peut être explicité comme suit. Puisque l'interaction entre photons différents est exclue, il nous faut considérer chacun d'entre eux séparément. Mais on ne comprend pas alors pourquoi les phénomènes changent tellement suivant qu'une fente est ouverte, ou les deux : comment admettre que, pour un photon passant par l'une des fentes, le fait que l'autre soit fermée ou non ait une importance si cruciale ?
Avant de discuter ce problème, il convient de remarquer cependant que, dans l'expérience précédente, nous n'avons pas cherché à déterminer par laquelle des deux fentes était passé chacun des photons que recevait l'écran. Pour obtenir ce renseignement, on peut envisager de placer des photodétecteurs (photomultiplicateurs) derrière F_1 et F_2. On constatera alors bien que, si les photons arrivent un à un, chacun d'entre eux franchit une fente bien déterminée (on obtiendra un signal sur le détecteur placé derrière F_1, soit sur celui qui couvre F_2, mais pas sur les deux à la fois). Mais, bien évidemment, les photons ainsi détectés seront absorbés et ne parviendront pas jusqu'à l'écran. Supprimons alors le photomultiplicateur qui masque F_1, par exemple. Celui qui reste en F_2 nous indiquera que, sur un grand nombre de photons, environ la moitié franchit F_2. On peut en conclure que les autres, ceux qui peuvent continuer jusqu'à l'écran, passent par F_1 ; mais la figure qu'ils construisent peu à peu sur l'écran n'est pas une figure d'interférence, puisque F_2 est obstrué, c'est seulement la tache de diffraction de F_1.

1.3.2 Unification quantique des deux aspects de la lumière

L'analyse qui précède montre qu'il est impossible d'expliquer tous les phénomènes observés si l'on ne s'attache qu'à l'un des deux aspects, corpusculaire ou ondulatoire, de la lumière. Or, ces deux aspects semblent d'exclure mutuellement
. Pour surmonter cette difficulté, il devient donc indispensable de réviser de manière critique les concepts de la physique classique et d'admettre que, bien que notre expérience quotidienne nous enseigne qu'il sont parfaitement établis, ces concepts peuvent ne plus être valables dans le domaine microscopique qu'on aborde ici. Par exemple, une caractéristique essentielle de ce nouveau domaine est apparue quand on a placé des détecteurs derrière les fentes d'Young : *lorsqu'on effectue une mesure sur un système microscopique, on le perturbe de façon fondamentale.* Il s'agit là d'une propriété nouvelle puisque, dans le domaine macroscopique, nous sommes habitués à ce qu'il soit toujours possible de concevoir des appareils de mesure dont l'influence sur le système est pratiquement aussi faible que l'on veut. Cette révision critique de la physique classique est imposée par l'expérience, et doit bien sûr être guidée par l'expérience.

En ce qui concerne le paradoxe précédent, celui du photon qui passe par une fente mais qui se comporte différemment suivant que l'autre est ouverte ou fermée. Nous avons vu que, si l'on cherche à détecter les photons lorsqu'ils franchissent les fentes, on les empêche d'arriver jusqu'à l'écran. De façon plus générale, une analyse plus détaillée des expériences montre qu'*il est impossible d'observer la figure d'interférence et de savoir en même temps par quelle fente est passé chaque photon.* On est donc obligé, pour résoudre ce paradoxe, de renoncer à l'idée très sûre qu'un photon passe forcément par une fente déterminée. On remet ainsi en cause la notion, fondamentale en physique classique, de trajectoire d'un corpuscule.

D'autre part, lorsque les photons arrivent un à un, leurs impacts sur l'écran reconstituent progressivement la figure d'interférence. Ceci implique que, pour un photon particulier, on ne sait pas à l'avance de façon certaine où il va aller frapper l'écran. Or, ces photons sont tous émis dans les mêmes conditions. Voilà donc détruite aussi l'idée classique suivant laquelle les conditions initiales déterminent complètement le mouvement ultérieur d'une particule. On peut seulement dire, lorsqu'un photon est émis, que la probabilité pour qu'il frappe l'écran en x est proportionnelle à l'intensité $I(x)$ calculée dans la théorie ondulatoire, c'est-à-dire à $|E(x)|^2$.
Après bien des tâtonnements, on en est arrivé à la notion de **dualité onde-corpuscule**, que l'on peut résumer simplement ainsi.

- 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 corpuscule se manifeste
- les prévisions sur le comportement d'un photon ne peuvent être que du type probabiliste
- l'information sur un photon à l'instant t est donnée par l'onde $E(\vec{r}, t)$ solution des équations de Maxwell ; on dira que cette onde caractérise l'état des photons à l'instant t. $E(\vec{r}, t)$ est interprété comme l'*amplitude de probabilité* pour qu'un photon manifeste sa présence, à l'instant t, au point $\vec{r}$. Ainsi la probabilité correspondante est proportionnelle à $|E(\vec{r}, t)|^2$

1.4 Liaison entre les photons et l'amplitude du champ classique

1.4.1 Densité énergétique et nombre de photons

Considérons un faisceau lumineux. Le nombre de photons qu'il transporte s'obtient en divisant l'énergie lumineuse du faisceau par l'énergie $h\nu$ d'un photon. Si $\mathcal{D}$ est le débit des photons par unité de surface (par section droite unité et par seconde), le nombre de photons reçus par la surface S pendant le temps Δt vaut par définition

$$N\mathcal{D}\,\Delta t\,S$$

En introduisant la densité u d'énergie régnant dans le faisceau lumineux, la puissance P transportée par les photons vaut

$$P = S\,u\,c = S\,d\,h\nu$$

Il vient donc

$$D = \frac{u\,c}{h\nu} = \frac{\lambda}{h}\,u$$

En théorie classique de l'électromagnétisme, on établit la relation entre la densité instantanée d'énergie et le champ électromagnétique $(\vec{E}, \vec{B})$ de l'onde

$$u_{instantanée} = \frac{\varepsilon_o}{2}E^2 + \frac{1}{2\mu_o}B^2 = \varepsilon_o\,E^2$$

En rapprochant ces deux résultats, il vient une relation de proportionnalité entre le débit des photons et le carré du champ électrique

$$\mathcal{D}_{instantané} = \frac{\lambda}{h}\,\varepsilon_o E^2$$

En prenant la forme suivante pour le champ électrique,

$$E = E_o(x,y,z,t)\,\cos\left(\omega t - \varphi(x,y,z,t)\right)$$

ou bien encore en introduisant le formalisme complexe

$$\underline{E} = \underline{E_o}(x,y,z,t)\,\exp\left(i[\omega t - \varphi(x,y,z,t)]\right)$$

sachant que l'amplitude E_o du champ réel est égale au module de l'amplitude complexe $\underline{E_o}$. En moyennant sur une période, ce qui est intéressant dans la pratique, on obtient

$$\mathcal{D} = \frac{\lambda}{h}\varepsilon_o\overline{E}^2 = \frac{\lambda}{2\,h}\varepsilon_o E_o^2 = \frac{\lambda}{2\,h}\underline{E}.\underline{E^*}$$

Prenons deux exemples, afin de bien comprendre la signification de ces formules.

Dans la réception des ondes radio

Soit un transistor tout bête. Supposons qu'on se trouve à $r = 100\ km$ d'un émetteur isotrope de puissance $P = 1\ kW$ sous la fréquence de $\nu = 1\ MHz$[5]. Cette puissance se trouve également répartie sur le surface de la sphère de rayon r, d'où la puissance reçue par unité de surface,

$$P_s = \frac{P}{4\pi r^2} \simeq 10^{-8} W.m^{-2}$$

On en déduit le débit surfacique de photons,

$$\mathcal{D} = \frac{P_s}{h\nu} \simeq 10^{19}\ m^{-2}.s^{-1}$$

Pendant un millième seulement de la période, on reçoit donc en moyenne 1 million de photons. On peut alors distinguer les nombres de photons reçus pendant chaque millième de période, c'est-à-dire qu'on peut utiliser la valeur instantanée du débit de photons $D_{instantané}$, et qu'on donne ainsi une signification réelle à la valeur instantanée E du champ électrique.
Il est effectivement possible, dans les mêmes conditions expérimentales, de recueillir sur un oscilloscope la tension électrique $V = V_o \cos(\omega t - \varphi)$ restituée par l'antenne et ainsi visualiser la courbe sinusoïdale représentant les valeurs de E à chaque instant.

Dans la vision d'une source lumineuse faible

Prenons une bougie, en pleine nuit, allumée à $r = 100\ m$ de nous. On peut calculer la puissance rayonnée, en se restreignant à la fréquence où l'oeil est le plus sensible[6] : l'ordre de grandeur est le milliwatt. A la distance r, on en déduit la puissance surfacique

$$P_s = \frac{P}{4\pi r^2} = 10^{-8}\ W.m^{-2}$$

C'est la même valeur que dans le cas précédent ; cependant, les photons sont maintenant 10^9 fois plus gros et on calcule un débit de photons bien inférieur,

$$\mathcal{D} = \frac{P_s}{h\nu} = 3.10^{10} m^{-2}.s^{-1}$$

En prenant pour surface de la pupille [7] $S = 1/3\ cm^{-2}$, le nombre de photons reçus par l'oeil pendant une période $T = 2.10^{-15}\ s$ de l'onde lumineuse est

$$N = \mathcal{D}\, T\, S = 3.10^{-9}$$

Ce nombre n'a cette fois plus aucun sens : il faudrait attendre près d'un milliard de périodes pour recevoir un seul photon ; or le flux très faible qu'on considère ici est encore environ 1000 fois supérieur à la limite de sensibilité de l'oeil[8] ! Seul le débit de photons moyen $\mathcal{D}$ peut avoir du sens, s'il est calculé sur des durées bien supérieures à la période de l'onde. Il semble donc que la valeur instantanée E du champ classique n'ait plus aucun sens : on peut se demander si, dans des conditions d'aussi faible luminosité, la considération de l'onde classique apporte encore quelque chose à la description du rayonnement.

[5] Ce qui correspond à une longueur d'onde de 300 m.
[6] Intervalle de 200 nm autour de $\lambda = 600\ nm$, soit $\nu = 5.10^{14}\ Hz$
[7] C'est une majoration !
[8] On admet qu'un oeil entraîné à l'obscurité est encore sensible à un flux de 100 photons par seconde.

1.4.2 Interférences photon par photon et interprétation probabiliste de l'onde

La signification du champ de l'onde classique est bien mise en évidence par une expérience simple : n'importe quel interféromètre à deux ondes le permet, prenons par exemple le plus simple, le système des fentes d'Young.

Chapitre 2

Corpuscules matériels et ondes de matière

2.1 Les relations de Louis de Broglie

2.1.1 Découvertes révolutionnaires

Parallèlement à la découverte des photons, l'étude des spectres d'émission et d'absorption des atomes mit en évidence un fait fondamental, que la physique classique ne permettait pas de comprendre : ces spectres sont constitués de *raies fines* ; autrement dit, un atome donné n'émet ou n'absorbe que des photons de fréquences (c'est-à-dire d'énergies) bien déterminées. Ce fait s'interprète très bien si on admet que *l'énergie des atomes est quantifiée*, c'est-à-dire qu'elle ne peut prendre que certaines valeurs discrètes E_i (i = 1, 2, ..., n, ...) : l'émission ou l'absorption d'un photon s'accompagne alors d'un "saut" de l'énergie de l'atome d'une valeur permeise E_i à une autre valeur E_j, et la conservation de l'énergie implique que le photon ait une fréquence ν telle que

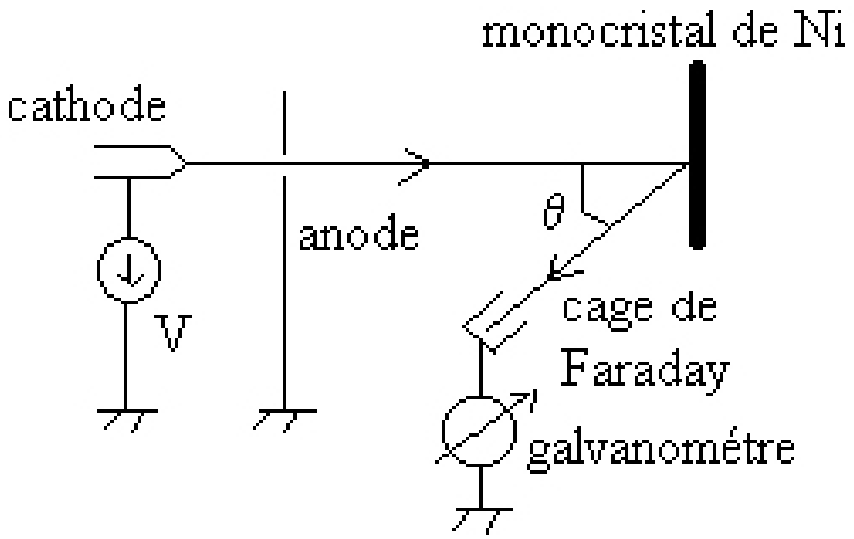
$$h\,\nu_{ij} = |E_i - E_j|$$

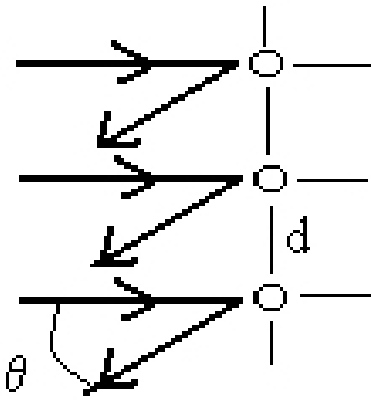
Seules les fréquences vérifiant cette relation peuvent donc être émises ou absorbées par l'atome.

L'existence de tels niveaux d'énergie discrets fut confirmée indépendamment par l'expérience de Franck et Hertz. Bohr la traduisit en termes d'orbites électroniques privilégiées et donna, avec Sommerfeld, une règle empirique permettant de calculer ces orbites dans le cas de l'atome d'hydrogène. Mais l'origine fondamentale de ces règles de quantification restait mystérieuse.
C'est alors qu'en 1923 Louis de Broglie émit l'hypothèse suivante : *les corpuscules matériels, tout comme les photons, peuvent avoir un comportement ondulatoire.* Il retrouva alors les règles de quantification de Bohr-Sommerfeld comme conséquence de cette hypothèse, les divers niveaux d'énergie permis apparaissant de façon analogue aux modes propres d'une corde vibrante ou d'une cavité résonnante. Les expériences de diffraction des électrons [1] vinrent confirmer de façon éclatante l'existence d'un aspect ondulatoire de la matière, en montrant que des figures d'interférence peuvent être obtenues avec des corpuscules matériels tels que des électrons.

Le faisceau d'électrons émis par la cathode est accéléré par la différence de potentiel V de sorte que $E_c = eV$; les électrons se réfléchissent sur le cristal de nickel dans des directions

[1] Davisson et Germer, 1927.





privilégiées - repérées à l'aide d'un galvanomètre -, vérifiant

$$V^{1/2} \sin\theta \simeq 5,70\ V^{1/2}$$

L'interprétation théorique de ce résultat admet que les directions privilégiées correspondent à des différences de phase entre deux ondes successives, associées au faisceau d'électron et réfléchies sur les atomes du monocristal de nickel, multiples entiers de 2π

$$\frac{2\pi\delta}{\lambda} = \frac{2\pi\, d\, \sin\theta}{\lambda} = 2n\pi$$

En utilisant la relation $\lambda = h/p$, on obtient

$$V^{1/2} \sin\theta = n\, \frac{h}{d\,(2me)^{1/2}} = 5,70\, n$$

pour la maille du réseau cristallin de nickel ($d = 2,15\ \mathring{A}$).

Une autre expérience importante fut celle de Möllenstedt sur les interférences.

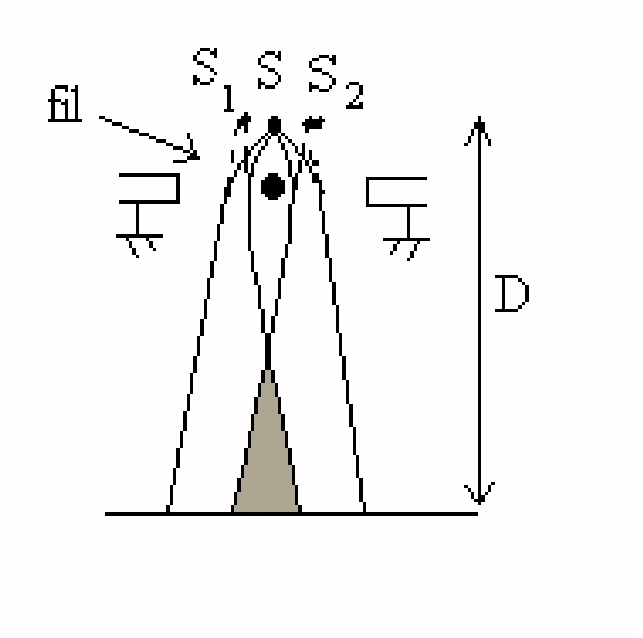
Le fil est à un potentiel de $V = 30.000\ V$; la source d'électrons S a une largeur de 500 $\mathring{A}$. On observe une figure d'interférence (répartition des électrons dans le plan d'observation avec des maxima et des minima). Le système se comporte en fait comme un biprisme de Fresnel où les sources secondaires S_1 et S_2 sont distantes de $a = 10\ \mu m$.
L'interfrange associé est

$$i = \frac{\lambda\, D}{a} = 0,16\ \mu m$$

pour une distance $D = 25\ cm$ et la longueur d'onde associée vaut $\lambda = 0,07\ \mathring{A}$.

2.1.2 Hypothèses de De Broglie

On associe donc, à un corpuscule matériel d'énergie E et d'impulsion $\vec{p}$, une onde dont la pulsation $\omega = 2\pi\nu$ et le vecteur d'onde $\vec{k}$ sont donnés par les mêmes relations que pour les



photons

$$E = h\nu = \hbar\omega$$
$$\vec{p} = \hbar\,\vec{k}$$

Autrement dit, la longueur d'onde correspondante est

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

2.1.3 Ordres de grandeur

La très petite valeur de la constante de Planck h explique que le caractère ondulatoire de la matière soit très difficile à mettre en évidence à l'échelle macroscopique.
Prenons par exemple un grain de matière, de diamètre 1 μm et de masse 10^{-15} kg. Même pour une masse aussi faible et une vitesse $v = 1$ $mm.s^{-1}$, on obtient

$$\lambda \simeq \frac{6,6.10^{-34}}{10^{-15} \times 10^{-3}} = 6,6.10^{-6}\ \mathring{A}$$

Une telle longueur d'onde est complètement négligeable à l'échelle du grain de poussière.
Considérons au contraire un neutron thermique, c'est-à-dire un neutron, de masse $1,67.10^{-27}$ kg, ayant une vitesse v correspondant à l'énergie moyenne d'agitation thermique à la température absolue T

$$\frac{1}{2} m_n\, v^2 = \frac{p^2}{2\, m_n} \simeq \frac{3}{2}\, k_B T$$

La longueur d'onde correspondante est

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3 m_n k_B T}} \simeq 1,4\ \mathring{A}$$

pour une température de 300 K. Cette longueur d'onde est de l'ordre de longueur de la distance entre atomes dans un réseau cristallin. Un faisceau de neutrons thermiques tombant sur un cristal donnera donc naissance à des phénomènes de diffraction analogues à ceux observés avec des rayons X, comme Davisson et Germer l'ont mis en évidence.

Considérons enfin des électrons. Si on les accélère par une différence de potentiel V (exprimée en volts), on leur communique l'énergie cinétique

$$E_c = qV = 1,6.10^{-19}.V \ Joules$$

La longueur d'onde associée vaut

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_c}}$$

c'est-à-dire

$$\lambda \simeq \frac{12,3}{\sqrt{V}} \ \mathring{A}$$

Avec des différences de potentiel de quelques centaines de volts, on obtient cette fois encore des longueurs d'onde comparables à celles des rayons X, et on peut mettre en évidence des phénomènes de diffraction par des cristaux ou poudres cristallines.
Les grands accélérateurs sont capables de communiquer aux particules des énergies considérables. On quitte alors le domaine non-relativiste : on obtient couramment des faisceaux d'électrons dont l'énergie dépasse le giga-électron-volt (GeV), alors que la masse au repos de l'électron est de l'ordre du demi MeV. La vitesse correspondante est voisine de celle de la lumière dans le vide, et la mécanique quantique non relativiste ne s'applique pas. Néanmoins, les relations de Planck-Einstein et de De Broglie restent valables.

2.2 Fonction d'onde

2.2.1 Mise en place du formalisme

Suivant les hypothèses de Louis de Broglie, on peut étendre à toutes les particules matérielles les notions introduites dans le cas du photon. On arrive ainsi à la formulation suivante.

(i) Au concept classique de trajectoire, il faut substituer celui dépendant du temps t. L'état quantique d'un corpuscule est caractérisé par une fonction d'onde $\psi(\vec{r},t)$ qui contient toutes les informations qu'il est possible d'obtenir sur ce corpuscule.

(ii) $\psi(\vec{r},t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence. Etant donné que les positions possibles de la particule forment un continuum, la probabilité pour que la particule soit trouvée, à l'instant t, dans un élément de volume $d\tau$ situé au point $\vec{r}$ doit être proportionnelle à $d\tau$ et donc infinitésimale : $d\mathbb{P}(\vec{r},t)$. On interprète alors $|\psi(\vec{r},t)|^2$ comme la densité de probabilité correspondante en posant

$$dP(\vec{r},t) = C\,|\psi(\vec{r},t)|^2\,d\tau$$

où C est une constante de normalisation.

(iii) Le principe de décomposition spectrale s'applique à la mesure d'une grandeur physique quelconque $\mathcal{A}$
– le résultat trouvé appartient forcément à un ensemble de résultats propres a

- à chaque valeur propre a est associé un état propre, c'est-à-dire une fonction propre $\psi_a(\vec{r})$ telle que, t_o étant l'instant de mesure, si $\psi_a(\vec{r}, t_o) = \psi_a(\vec{r}$, la mesure donne à coup sûr a.
- lorsque $\psi(\vec{r}, t)$ est quelconque, la probabilité $\mathbb{P}_a$ de trouver, lors d'une mesure à l'instant t_o, la valeur propre a s'obtient en décomposant $\psi(\vec{r}, t_o)$ sur les fonction $\psi_a(\vec{r})$

$$\psi(\vec{r}, t_o) = \sum_a c_a \, \psi_a(\vec{r})$$

on a alors

$$\mathbb{P}_a = \frac{|c_a|^2}{\sum_a |c_a|^2}$$

- si la mesure donne effectivement a, la fonction d'onde du corpuscule immédiatement après la mesure est $\psi'(\vec{r}, t_o) = \psi_a(\vec{r})$

(iv) Reste à décrire l'équation d'évolution à laquelle obéit la fonction $\psi(\vec{r}, t)$: lorsque la particule de masse m subit l'action d'un potentiel $V(\vec{r}, t)$, sa fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ obéit à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \, \psi(\vec{r}, t)$$

Cette équation est linéaire et homogène en ψ ; il existe par conséquent pour les particules matérielles un principe de superposition qui, combiné avec l'interprétation de ψ comme amplitude de probabilité, donnera des effets de type ondulatoire. Notons d'autre part que l'équation différentielle précédente est du premier ordre par rapport au temps ; cette conditione est nécessaire pour que l'état du corpuscule à l'instant t_o, caractérisé par $\psi(\vec{r}, t_o)$, détermine son état ultérieur.

Il existe donc une profonde analogie entre matière et rayonnement : dans les deux cas, une description correcte des phénomènes nécessite l'introduction des concepts quantiques, et en particulier la notion de dualité onde-corpuscule.

2.2.2 Remarques

La constante de normalisation C est évidemment définie par

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

La forme de l'équation de Schrödinger entraîne que C est indépendante du temps.

Il faut bien noter la grande différence entre la notion d'état classique et la notion d'état quantique. L'état d'une particule classique est déterminé à l'instant t par la donnée de six paramètres caractérisant sa position et sa vitesse à l'instant t. L'état d'une particule quantique est déterminé par une *infinité* de paramètres : les valeurs aux divers points de l'espace de la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ qui lui est associée. A la notion classique de trajectoire, succession des divers états du corpscule classique au cours du temps, doit être substituée la notion de propagation de l'onde associée à la particule.
Reprenons par exemple l'expérience des franges d'Young, dans le cas des photons, mais qui

est en principe également envisageable pour des particules matérielles comme les électrons ; lorsqu'on observe la figure d'interférence, se poser la question de savoir par quelle fente chaque corpuscule est passé n'a pas de sens, car l'onde qui lui est associée passe par les deux trous à la fois.

Il convient également de remarquer que, à la différence des photons qui peuvent être émis ou absorbés au cours de l'expérience, les corpuscules matériels ne peuvent être créés ou détruits : lorsqu'un filament chauffé émet des électrons, ceux-ci préexistaient dans le métal ; de même, un électron absorbé par un compteur ne disparaît pas, mais se retrouve dans un atome ou participe à un courant électrique.
En réalité, la théorie de la relativité nous enseigne qu'il est possible de créer et d'annihiler des corpuscules matériels : par exemple un photon d'énergie suffisante, passant près d'un atome, peut se matérialiser en une paire électron-positon. En effet, la conservation des normes des quadrivecteurs avant et après la collision permet d'écrire

$$P_1^2 - \frac{(E_1 + m_1 c^2)^2}{c^2} = -\frac{(3m)^2 c^4}{c2}$$

ce qui conduit à

$$E_1 = 4\, mc^2 \simeq 2\ MeV$$

Inversement, le posito, peut s'annihiler avec un électron en donnant des photons. Dans le cadre non-relativiste, comme on l'a traité jusqu'ici en dissymétrisant les coordonées spatiales et temporelles, les particules ne peuvent être ni crées ni annihilées. Cette loi de conservation joue même un rôle de premier plan ; la nécessité de l'abandonner est l'une des difficultés importantes que l'on rencontre lorsqu'on cherche à construire une mécanique quantique relativiste.

2.3 Description quantique d'une particule : le paquet d'ondes

Considérons une particule dont l'énergie potentielle est nulle (ou constante) en tout point de l'espace. La particulee st donc libre, puisque soumise à aucune force.
L'équation de Schrödinger devient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\, \Delta\psi(\vec{r}, t)$$

Cette équation différentielle admet visiblement des solutions de la forme

$$\psi(\vec{r}, t) = A.e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

à condition que $\vec{k}$ et ω soient liés par la relation

$$\omega = \frac{\hbar\, \vec{k}^2}{2m} \qquad (*)$$

Remarquons que d'après les relations de De Broglie, cette condition exprime qe l'énergie E et l'impulsion $\vec{p}$ d'une particule libre vérifient l'égalité classique $E = \vec{p}^2/2m$. Comme

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2$$

une onde plane du type décrit ici représente une particule dont la probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace.
En vertu du principe de superposition, toute combinaison linéaire d'ondes planes vérifiant l'équation (*) sera aussi solution de l'équation de Schrödinger considérée. On écrira cette superposition sous la forme

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

où l'intégrale porte sur l'espace à trois dimensions des vecteurs d'onde. $g(\vec{k})$, qui peut être complexe, doit être suffisamment régulier pour que l'on puisse dériver sous le signe somme[2].
Une telle fonction d'onde, superposition d'ondes planes[3], est appelée **paquet d'ondes** à trois dimensions. Pour simplifier, on se restreindra au cas du paquet d'ondes à une seule dimension, obtenu par superposition d'ondes planes se propageant toutes parallèlement à (Ox) ; la fonction d'onde ne dépend plus alors que de x et de t

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, e^{i(k.x-\omega t)}\, dk$$

En choisissant comme origine des temps un instant donné, on peut remarquer que la fonction d'onde

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k)\, e^{ik.x}\, dx$$

fait apparaître $g(k)$ comme la transformée de Fourier de $\psi(x,0)$,

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x,0)\, e^{-ik.x}\, dx$$

Par suite, la validité de la formulation précédente n'est pas limitée au cas de la particule libre : quel que soit le potentiel, on peut toujours écrire $\psi(x,0)$ sous cette forme. Les conséquences qui vont en découler sont donc parfaitement générales.

2.3.1 Forme du paquet d'ondes à un instant donné

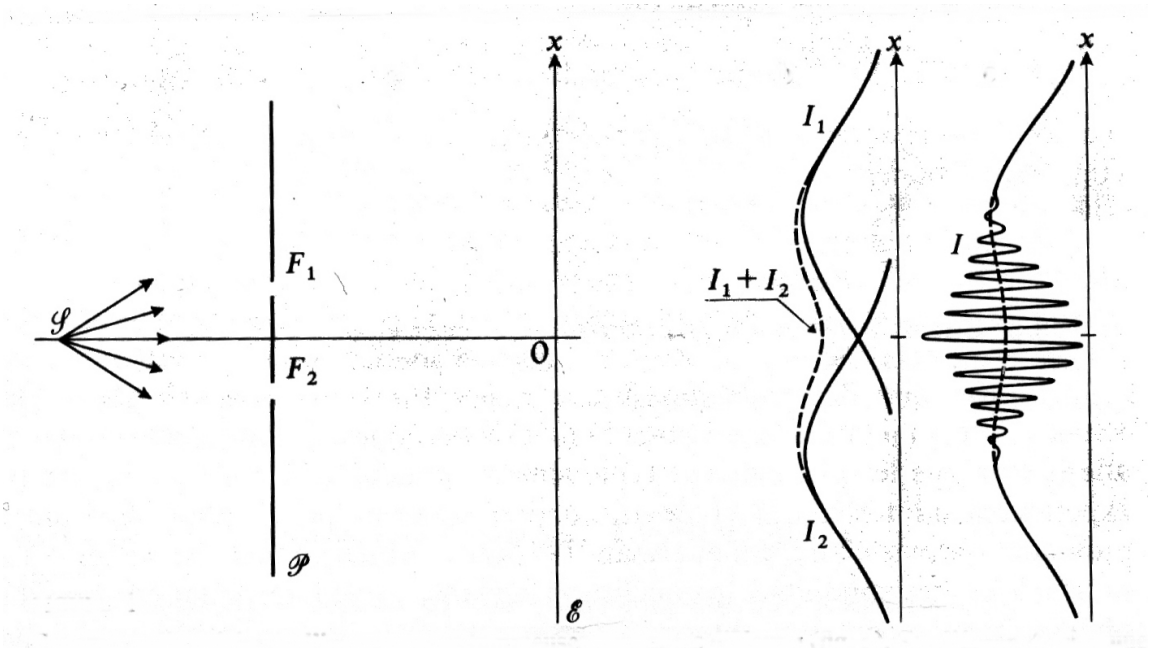
Cette forme est donnée par la dépendance en x de $\psi(x,0)$ définie comme on vient de le voir. Supposons que —g(k)— ait l'allure représentée sur la figure suivante, c'est-à-dire présente un pic prononcé dont le maximum est situé en $k = k_o$ et dont la largeur (à mi-hauteur par exemple) a pour valeur Δk.

On peut essayer de comprendre qualitativement le comportement de $\psi(x,0)$ en étudiant un cas particulier très simple : considérons que $\psi(x,0)$, au lieu d'être la superposition d'une infinité d'ondes planes $e^{ik.x}$, est la somme de trois ondes planes seulement ; ces ondes planes ont pour vecteurs d'onde k_o, $k_o - \frac{\Delta k}{2}$ et $k_o + \frac{\Delta k}{2}$, et leurs amplitudes respectives sont proportionnelles à 1, $\frac{1}{2}$ et $\frac{1}{2}$. On a alors

$$\psi(x) = \frac{g(k_o)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^(iko.x) + \frac{1}{2} e^{i(ko-\frac{\Delta k}{2})x} + \frac{1}{2} e^{i(ko+\frac{\Delta k}{2})x} \right]$$

[2]En particulier, toute solution de carré sommable peut être écrit sous cette décomposition.

[3]Une onde plane, dont le module est constant dans tout l'espace, n'est pas de carré sommable, et ne peut en toute rigueur représenter un état physique pour cette particule (cf. optique). En revanche, une superposition d'ondes planes peut parfaitement être de carré sommable.



soit

$$\psi(x) = \frac{g(k_o)}{\sqrt{2\pi}} e^{iko.x} \left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}\, x\right)\right]$$

On peut voir que $|\psi(x)|$ est maximal lorsque $x = 0$; ce résultat est dû au fait que, lorsque x prend cette valeur, les trois ondes sont en phase et interfèrent constructivement, comme le montre la figure qui suit. Au fur et à mesure que l'on s'écarte de cette valeur, les ondes se déphasent l'une par rapport à l'autre, et $|\psi(x)|$ décroît. L'interférence devient complètement destructive lorsque le déphasage entre $e^{iko.x}$ et $e^{i(ko\pm\Delta k/2)}$ est égal à $\pm\pi$: $\psi(x)$ s'annule alors lorsque $x = \pm\frac{\Delta k}{2}$ où

$$\Delta x\, \Delta k = 4\pi$$

Cette formule indique que la largeur de la fonction $|\psi(x)|^4$ est d'autant plus grande que la largeur Δk de la fonction $|g(k)|$ est plus petite.

Revenons au paquet d'ondes général ; sa forme résulte aussi d'un phénomène d'interférences : $|\psi(x, 0)|$ est maximal lorsque les différentes ondes planes interfèrent de manière constructive. Soit en effet $\alpha(k)$ l'argument de la fonction $g(k)$,

$$g(k) = |g(k)|\, e^{i.\alpha(k)}$$

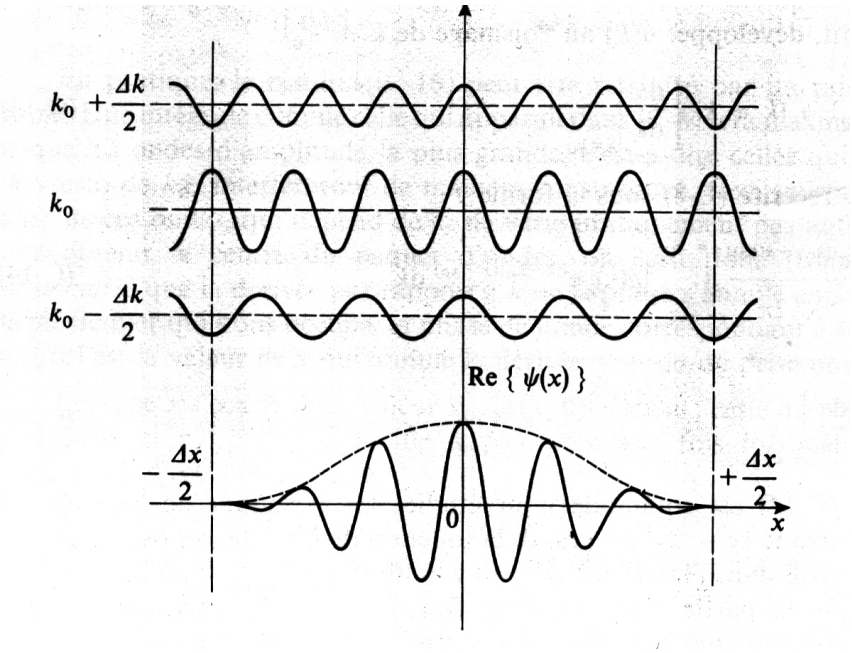
Supposons que cet argument varie de façon suffisamment régulière dans l'intervalle $[k_o - \frac{\Delta k}{2}; k_o + \frac{\Delta k}{2}]$ où $|g(k)|$ est appréciable ; on peut alors, lorsque Δk est suffisamment petit, développer $\alpha(k)$ au voisinage de $k = k_o$

$$\alpha(k) \simeq \alpha(k_o) + (k - k_o) \left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=ko}$$

ce qui permet d'écrire

$$\psi(x, 0) \simeq \frac{e^{i(ko.x+\alpha(ko))}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|\, e^{i(k-ko)(x_x o)}\, dk$$

[4] C'est-à-dire la distance entre deux zéros de $|\psi(x)|$.



en ayant posé

$$x_o = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=ko}$$

Cette forme est commode pour étudier les variations de $|\psi(x,0)|$ en fonction de x : lorsque $|x-x_o|$ est grand, la fonction de k à intégrer oscille un très grand nombre de fois dans l'intervalle Δk ; on voit alors, d'après la figure suivante, que les contributions des oscillations successives s'annulent entre elles et que l'intégrale sur k prend une valeur négligeable. En d'autres termes, lorsque x est fixé à une valeur éloignée de x_o, les phases des diverses ondes qui composent $\psi(x,0)$ varient très rapidement dans le domaine Δk, et ces ondes se détruisent par interférence. Par contre, si $x \simeq x_o$, la fonction à intégrer sur k n'oscille pratiquement plus (cf. figure suivante), et $|\psi(x,0)|$ est maximal.

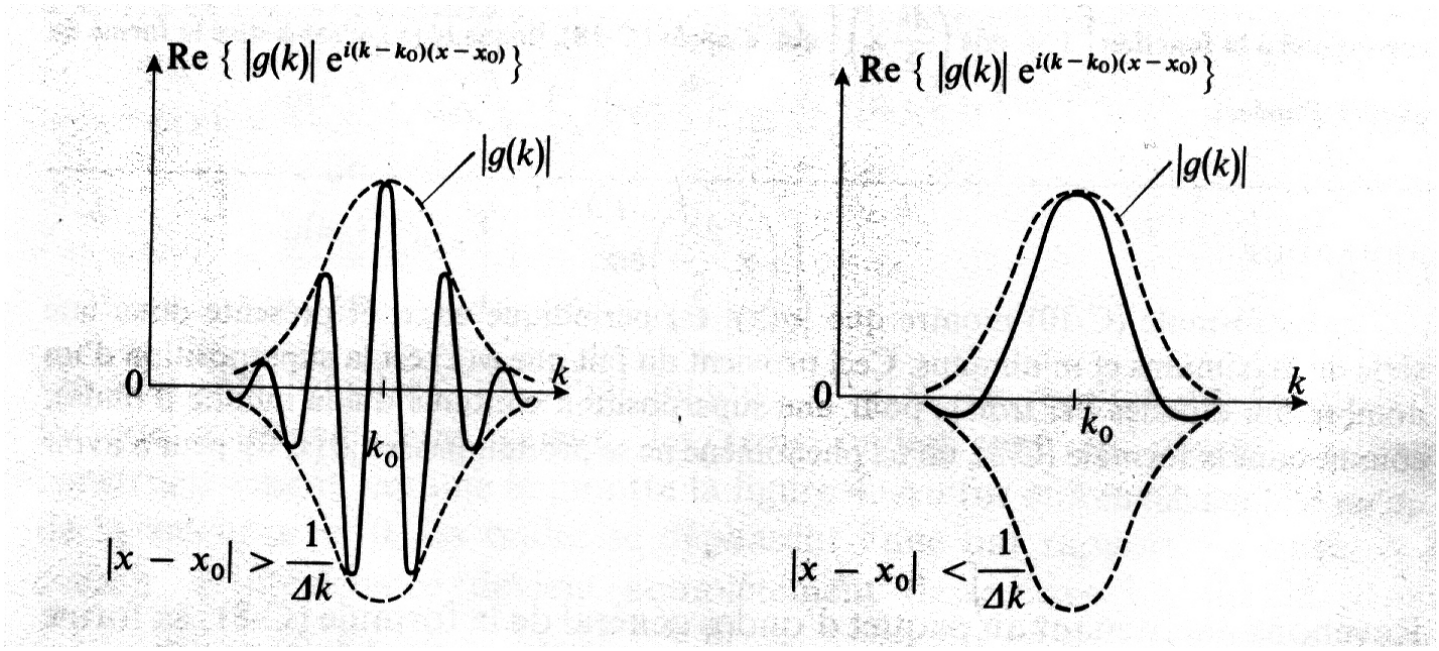
La position $x_M(0)$ du centre du paquet d'ondes est donc

$$x_M(0) = x_o = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=ko}$$

En pratique, ce résultat peut être retrouvé par un raisonnement très simple. Une intégrale comme celle qui apparaît dans l'expression du paquet d'ondes sera maximale (en module) lorsque les ondes d'amplitude la plus grande (ie. celles qui correspondent à k voisin de k_o), interfèreront de manière constructive. Ceci se produit lorsque la phase des ces ondes, qui dépend de k, ne varie pratiquement pas autour de $k = k_o$. Pour obtenir le centre du paquet d'ondes, on écrit donc [5] que la dérivée par rapport à k de la phase s'annule en $k = k_o$. Dans le cas particulier qui nous occupe, la phase de l'onde correspondant à k est $k.x + \alpha(k)$, et $x_M(0)$ est la valeur de x qui annule la dérivée $x + \frac{d\alpha}{dk}$ prise pour $k = k_o$.

Lorsque x s'écarte de la valeur x_o, $\psi(x,0)$ décroît ; cette décroissance devient appréciable si

[5] C'est une condition de phase stationnaire.



$e^{i(k-ko)(x-xo)}$ oscille à peu près une fois lorsque k parcourt le domaine Δk, c'est-à-dire lorsque

$$\Delta k\,(x - x_o) \simeq 1$$

Si Δx est la largeur approximative du paquet d'ondes, on a donc

$$\Delta k\,\Delta x \gtrsim 1$$

On retrouve ici une relation classique entre les largeurs de deux fonctions transformées de Fourier l'une de l'autre. Le fait important est que le produit $\Delta k\,\Delta x$ est borné inférieurement ; la valeur exacte de cette borne dépend bien sûr de la définition précise des largeurs Δx et Δk. Un paquet d'ondes représente donc l'état d'une particule dont la probabilité de présence, à l'instant $t = 0$, est pratiquement nulle en dehors d'un intervalle de largeur approximative Δx centré sur la valeur x_o.

2.3.2 Relation d'incertitude de Heisenberg

L'inégalité précédente a, en mécanique quantique, des conséquences physiques extrêmement importantes ; nous allons les discuter en restant dans le cadre d'un modèle à une dimension.
On a vu qu'une onde plane $e^{i(ko;x-\omega ot)}$ correspond à une densité de probabilité constante sur l'axe (Ox), quel que soit t ; on peut exprimer grossièrement ce résultat en disant que la valeur de Δx correspondante est infinie. Par contre, il y intervient une seule pulsation ω_o et un seul vecteur d'onde k_o ; d'après les relations de De Broglie, cela signifie que l'énergie et l'impulsion de la particule sont bien déterminées

$$E = \hbar\omega_o$$

$$p = \hbar k_o$$

Une telle onde plane peut d'ailleurs être considérée comme un cas particulier de paquet d'ondes à une dimension, pour lequel $g(k)$ est un pic de Dirac

$$g(k) = \delta(k - k_o)$$

La valeur correspondante de Δk est alors nulle.
On peut aussi interpréter ces propriété de la manière suivante : dans le cadre du principe de décomposition spectrale, dire qu'une particule, décrite à $t = 0$ par la fonction d'onde $\psi(x, 0) = A.e^{ik.x}$, possède une impulsion bien déterminée, c'est-à-dire qu'une mesure de l'impulsion à cet instant donnera $p = \hbar k$ à coup sûr. On en déduit que $e^{ik.x}$ caractérise l'état propre correspondant à $p = \hbar k$. Comme il existe, d'autre part, une onde plane pour toute valeur de k, les valeurs propres que l'on peut attendre à priori dans une mesure de l'impulsion sur un état quelconque sont toutes les valeurs réelles (dans ce cas, il n'y a pas de quantification des résultats possible : comme en mécanique classique, toutes les valeurs de l'impulsion permises).
Si on regarde la forme de $\psi(x, 0)$, on peut reconnaître une superposition linéaire des fonctions propres de l'impulsion, dans laquelle le coefficient de $e^{ik.x}$ est $g(k)$. On est donc amené à interpréter $|g(k)|^2$ - à un facteur constant près - comme la probabilité de trouver $p = \hbar k$ si l'on trouve à $t = 0$ l'impulsion d'une particule dont l'état est décrit par $\psi(x, t)$. En réalité, les valeurs possibles pour p comme pour x forment un ensemble continu, et $|g(k)|^2$ est proportionnel à une densité de probabilité : la probabilité $d\mathbb{P}(k)$ d'obtenir une valeur comprise entre $\hbar k$ et $\hbar(k + dk)$ est, à un facteur près, $|g(k)|^2 dk$. Plus précisément,

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}(p)\, e^{i\frac{px}{\hbar}}\, dp \qquad (*)$$

D'après l'égalité de Bessel-Parseval, on a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$$

Si la valeur commune de ces intégrales est C, alors

$$dP(x) = \frac{1}{C} |\psi(x, 0)|^2 dx$$

est la probabilité pour que la particule soit trouvée, à $t = 0$, entre x et $x + dx$; de même,

$$d\tilde{P}(p) = \frac{1}{C} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp$$

est la probabilité pour que la mesure de l'impulsion donne un résultat compris entre t et $t + dt$.
Nous pouvons maintenant écrire

$$\Delta x\, \Delta p \gtrsim \hbar$$

où $\Delta p = \hbar \Delta k$ est la largeur de la courbe représentative de $|\tilde{\psi}(p)|$. Soit une particule dont l'état est définir par le paquet d'ondes (**) ; sa probabilité de présence, à $t = 0$, est appréciable seulement dans une région de largeur Δx autour de x_o : sa position est connue avec une incertitude Δx. Si l'on mesure l'impulsion de cette particule au même instant, on peut trouver une valeur comprise entre $p_o + \Delta p_o/2$ et $p_o - \Delta p_o/2$, puisque $|\tilde{\psi}(p)|^2$ est pratiquement nul en dehors de cet intervalle : l'incertitude sur l'impulsion est donc Δp.
L'interprétation de la relation

$$\Delta x\, \Delta \gtrsim \hbar p$$

est alors la suivante : il est impossible de définir à un instant donné à la fois la position de la particule et son impulsion avec une précision arbitraire ; lorsque la limite inférieure imposée par cette relation est atteinte, augmenter la précision sur la position (soit faire décroître Δx)

implique que la précision sur l'impulsion diminue (Δp augmente), et vice-versa. Cette relation porte le nom de *relation d'incertitude de Heisenberg*.
On ne connaît rien de tel en mécanique classique. La limitation exprimée par la relation de Heisenberg provient du fait que h n'est pas nulle ; c'est la très petite valeur de h à l'échelle macroscopique qui rend cette limitation totalement négligeable en mécanique classique.

2.3.3 Contraintes imposées par la relation de Heisenberg

Système macroscopique

Considérons notre grain de poussière, de diamètre un micron environ, et de masse $m \simeq 10^{-15}\ kg$, animé d'une vitesse $v = 10^{-3}\ m.s^{-1}$[6]. Son impulsion vaut alors

$$p = mv = 10^{-18}\ kg.m.s^{-1}$$

Si l'on mesure sa position au centième de micron près, l'incertitude Δp sur son impulsion doit vérifier

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \frac{10^{-34}}{10^{-8}} = 10^{-26}\ kg.m.s^{-1}$$

La relation d'incertitude n'introduit donc pratiquement aucune restriction dans ce cas puisque, en pratique, un appareil de mesure est totalement incapable d'atteindre cette précision relative de 10^{-8} sur l'impulsion.
Quantiquement, on décrira le grain de poussière par un paquet d'ondes dont la vitesse de groupe est $10^{-3}\ m.s^{-1}$ et l'impulsion moyenne $p = 10^{-18}\ kg.m.s^{-1}$. Mais on peut prendre alors pour ce paquet d'onde une extension spatiale Δx, et une dispersion en impulsion Δp, tellement petites qu'elles sont totalement inappréciables. Le maximum du paquet d'ondes représente alors la position du grain de poussière, et son mouvement est identique à celui du corpuscule classique.

Système microscopique

Considérons maintenant un électron atomique. Le modèle de Bohr le décrit comme une particule classique. Les orbites permises sont définies par des règles de quantification posées à priori : par exemple, le rayon r d'une orbite circulaire et l'impulsion $p = mv$ de l'électron qui la parcourt doivent vérifier

$$pr = n\hbar$$

où n est un nombre entier.
Pour qu'on puisse ainsi parler de trajectoire de l'électron en termes classiques, il faudrait que les incertitudes sur sa position et son impulsion soient négligeables devant r et p respectivement

$$\Delta x \ll r$$

$$\Delta p \ll p$$

ce qui entraînerait que

$$\frac{\Delta x}{r}\frac{\Delta p}{p} \ll 1 \qquad (a)$$

[6]Soit environ $4.10^{-4}\ km/h$

Or, la relation d'incertitude de Heisenberg impose que

$$\frac{\Delta x}{r}\,\frac{\Delta p}{p} \gtrsim \frac{\hbar}{rp}$$

En introduisant la condition de quantification de Bohr, cette inégalité se réécrit

$$\frac{\Delta x}{r}\,\frac{\Delta p}{p} \gtrsim \frac{1}{n}$$

On voit alors que ce résultat est totalement incompatible avec (a), sauf si $n \gg 1$: la relation d'incertitude nous fait donc rejeter l'image semi-classique des orbites de Bohr.

2.3.4 Paramètres atomiques et relation d'incertitude

Si la relation de Heisenberg enlève toute réalité physique à la notion d'orbite de Bohr, on peut montrer comment elle permet de comprendre la stabilité des atomes, et même retrouver simplement l'ordre de grandeur des dimensions et de l'énergie de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental.
Soit un électron évoluant dans le champ coulombien d'un proton, que nous supposerons immobile à l'origine du système de coordonnées. Lorsque les deux particules sont séparées par une distance r, l'énergie potentielle de l'électron vaut

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_o\, r} = -\frac{K}{r}$$

Supposons que l'état de l'électron soit décrit par une fonction d'onde à symétrie sphérique, dont l'extension spatiale est caractérisée par r_o[7]. L'énergie potentielle correspondant à cet état est donc de l'ordre de

$$\overline{V} \simeq -\frac{K}{r_o}$$

Pour qu'elle soit la plus basse possible, il faut prendre r_o le plus petit possible, c'est-à-dire une fonction d'onde concentrée au maximum autour du proton.
Mais il faut également tenir compte de l'énergie cinétique. C'est là qu'intervient le principe d'incertitude : en effet, si l'électron est confiné dans un volume de dimension linéaire r_o, l'incertitude Δp sur son impulsion est au moins de l'ordre de $\hbar/r_o$. Autrement dit, même si l'impulsion moyenne est nulle, l'énergie cinétique $\overline{T}$ associée à l'état considéré ne l'est pas :

$$\overline{T} \gtrsim \overline{T}_{min} = \frac{1}{2m}\,(\Delta p)^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2m\, r_o^2}$$

Si l'on diminue r_o pour faire décroître l'énergie potentielle, l'énergie cinétique minimal augmente.
L'énergie la plus basse compatible avec le relation d'incertitude est donc le minimum de la fonction

$$E_{min} = \overline{T}_{min} + \overline{V} = \frac{\hbar^2}{2mr_o^2} - \frac{K}{r_o}$$

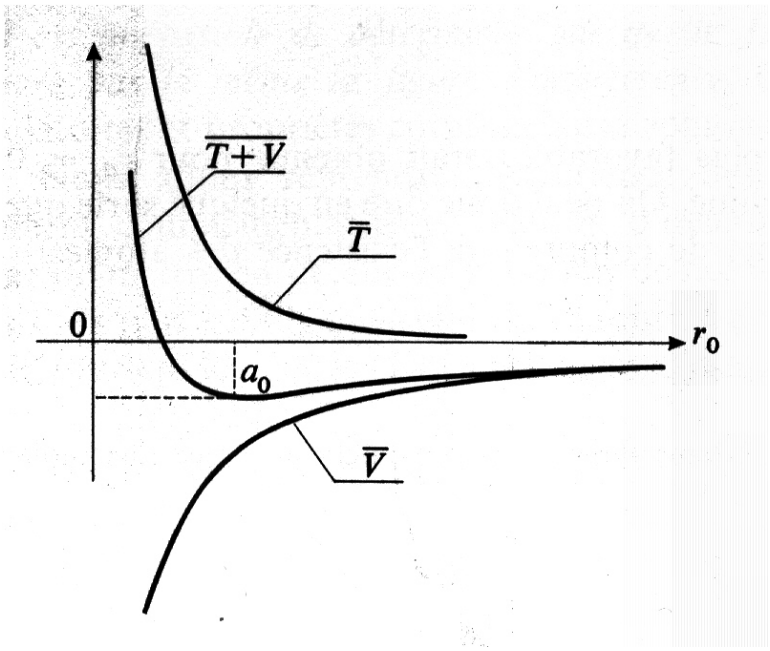
[7] On supposera donc que la probabilité de présence de l'électron est pratiquement nulle au-delà de deux ou trois r_o.

Ce minimu est obtenu pour

$$r_o = a_o = \frac{\hbar^2}{mK}$$

et vaut

$$E_o = -\frac{mK^4}{2\hbar^2}$$



Les expressions obtenues sont identiques à celles décrites dans le modèle de Bohr. Un tel accord quantitatif ne peut être qu'accidentel, étant donné que nous avons raisonné sur des ordres de grandeur. Cependant, le calcul précédent permet de dégager une idée physique importante : à cause de la relation d'incertitude, l'énergie cinétique de l'électron est d'autant plus grande que sa fonction d'onde a une extension plus faible ; l'état fondamental de l'atome résulte alors d'un compromis entre énergie cinétique et énergie potentielle.
Ce compromis, basé sur la relation d'incertitude, est totalement différent de ce qu'on attendrait en mécanique classique[8]. En effet, si l'électron se déplaçait sur une orbite circulaire classique de rayon r_o, son énergie potentielle vaudrait

$$V_{cl} = -\frac{K}{r_o}$$

L'énergie cinétique correspondante s'obtient en égalant force électrostatique et force centrifuge

$$\frac{K}{r_o^2} = m\,\frac{v^2}{r_o}$$

ce qui donne

$$T_{cl} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\,\frac{K}{r_o}$$

[8]Les lois de l'électromagnétisme classique indiquent qu'un électron accéléré rayonne, ce qui interdit déjà qu'il puisse exister de telles orbites stables.

L'énergie totale vaudrait alors

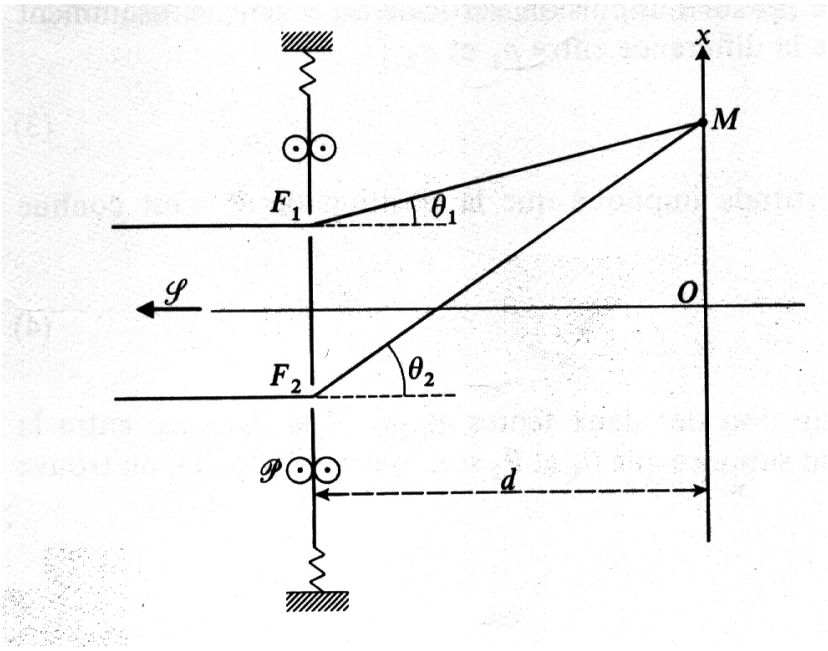
$$E_{cl} = T_{cl} + V_{cl} = -\frac{1}{2}\frac{K}{r_o}$$

La situation énergétiquement la plus favorable sera obtenue pour $r_o = 0$, qui donnerait une énergie de liaison infinie. On peut donc dire en quelque sorte que c'est la relation d'incertitude qui permet de comprendre l'existence des atomes.

2.3.5 Un expérience illustrative

L'expérience des fentes d'Young conduit à dire que
- d'une part les apsects ondulatoire et corpusculaire de la lumière sont tous deux indispensables à l'explication des phénomènes observés
- d'autre part, ils semblent s'exclure mutuellement, en ce sens qu'il est impossible de déterminer par quelle fente chaque photon est passé sans détruire par là même la figure d'interférence

On dit quelquefois que propriétés ondulatoires et corpusculaires de la lumière sont complémentaires. Cette notion de complémentarité est intimement liée à la relation d'incertitude de Heisenberg. Pour tenter de mettre en défaut cette notion, imaginons le dispositif suivant.



Supposons donc que la plaque P dans laquelle sont percées les fentes soit montée de manière à pouvoir se déplacer verticalement dans son plan, et qu'il soit ainsi possible de mesurer les impulsions verticales qui lui sont transférées.
Considérons donc un photon qui vient frapper l'écran E au point M[9]. L'impulsion de ce photon change lorsqu'il passe à travers P ; la conservation de l'impulsion implique que la plaque absorbe la différence. Mais l'impulsion ainsi transférée à P dépend du trajet du photon ; suivant qu'il a franchi F_1 ou F_2, elle vaut

$$p_1 = -\frac{h\nu}{c}\sin\theta_1 \qquad (1)$$

[9]On supposera, pour simplifier, que la source S est rejetée à l'infini.

ou

$$p_2 = -\frac{h\nu}{c}\,\sin\theta_2 \tag{2}$$

On laisse alors les photons arriver un à un et construire progressivement la figure d'interférence sur l'écran E. Pour chacun d'eux, on détermine par quelle fente il est passé en mesurant l'impulsion qu'a acquise la plaque P. Il semble donc possible de continuer à observer sur l'écran E des phénomènes d'interférence tout en sachant, au niveau de la plaque P, par quel trou est passé chaque photon.
En fait, il n'en est rien : nous allons voir que les franges d'interférence ne sont pas plus visibles avec ce dispositif. En effet, l'erreur du raisonnement précédent consiste à supposer que seuls les photons sont des objets de nature quantique ; en réalité, il ne faut pas oublier que la mécanique quantique s'applique aussi à la plaque P, objet macroscopique. Si l'on veut savoir par quel trou est passé un photon, il faut que l'incertitude Δp sur l'impulsion verticale de P soit suffisamment faible pour que l'on puisse faire la différence entre p_1 et p_2 :

$$\delta p \ll |p_1 - p_2|$$

mais la relation d'incertitude implique que la position de P n'est connue qu'à Δx près, avec

$$\Delta x \gtrsim \frac{h}{|p_1 - p_2|}$$

Si a désigne la séparation des deux fentes, et d la distance entre la plaque P et l'écran E, et en supposant que θ_1 et θ_2 sont petits (soit que $d/a \gg 1$), on trouve

$$\sin\theta_1 \simeq \theta_1 \simeq \frac{x - \frac{a}{2}}{d}$$

$$\sin\theta_2 \simeq \theta_2 \simeq \frac{x + \frac{a}{2}}{d}$$

si x repère la position du point d'impact M sur E. En utilisant les expression (1) et (2), on obtient

$$|p_1 - p_2| \simeq \frac{h\nu}{c}\,|\theta_2 - \theta_1| \simeq \frac{h}{\lambda}\,\frac{a}{d}$$

où $\lambda = c/\nu$ est la longueur d'onde de la lumière. En reportant cette valeur dans la relation d'incertitude, on obtient

$$\Delta x \gtrsim \frac{\lambda\, d}{a}$$

Cependant, $\frac{\lambda d}{a}$ représente précisément l'interfrange attendu sur E. Si la position verticale des fentes F_1 et F_2 n'est définie qu'avec une incertitude supérieure à l'interfrange, il ne peut être question d'observer la figure d'interférence.
La discussion précédente montre qu'il est impossible de bâtir une théorie quantique valable pour la lumière, et non pour les systèmes matériels, sans se heurter à de graves contradictions. Ainsi, dans l'exemple ci-dessus, si l'on pouvait traiter la plaque P comme un système matériel classique, on mettrait en défaut la complémentarité des deux aspects de la lumière et, par suite, la théorie quantique du rayonnement. Inversement, d'ailleurs, une théorie quantique de la matière seule se heurterait à des difficultés analogues. pour obtenir un ensemble cohérent, il faut appliquer les idées quantiques à tous les systèmes physiques.

2.3.6 Etalement du paquet d'ondes : exemple du paquet d'ondes gaussien

Généralités

Dans un modèle à une dimension, considérons une particule libre ($V(x) \doteq 0$) décrite à l'instant $t = 0$ par la fonction d'onde

$$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-ko)^2}\, e^{ik.x}\, dk$$

Ce paquet d'ondes est obtenu par superposition d'ondes planes $e^{ik.x}$ avec des coefficients

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, g(k,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}\, e^{-\frac{a^2}{4}(k-ko)^2}$$

qui correspondent à une fonction gaussienne centrée en $k = k_o$ (et multipliée par un coefficient numérique destiné à normer la fonction d'onde) ; c'est pourquoi le paquet d'ondes est dit *gaussien*.

Remarque : Dans les calculs qui suivent, nous rencontrerons à plusieurs reprises des intégrales du type

$$I(\alpha,\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2} d\xi$$

où α et β sont des nombres complexes. En supposant que $Re(\alpha^2) > 0$ de manière à ce que l'intégrale converge, la méthode des résidus permet de montrer que cette intégrale ne dépend pas de β

$$I(\alpha,\beta) = I(\alpha,0)$$

et que, lorsque la condition $-\frac{\pi}{4} < arg(\alpha) < +\frac{\pi}{4}$ est vérifiée (elle l'est toujours si $Re(\alpha^2) > 0$), on a

$$I(\alpha,0) = \frac{1}{\alpha}\, I(1,0)$$

L'intégrale $I(1,0)$ s'évalue très classiquement grâce à une intégrale double dans le plan (xOy) en coordonnées polaires

$$I(1,0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$$

Calculons $\psi(x,0)$. Pour cela, nous écrirons

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_o)^2 + ik.x = -\frac{a^2}{4}\left[k - k_o - \frac{2ix}{a^2}\right]^2 + ik_o x - \frac{x^2}{a^2}$$

Ainsi, par identification,

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_o x}\, e^{-x^2/a^2}$$

On vérifie bien que la transformée de Fourier d'un gaussienne est une gaussienne. A l'instant initial, la densité de probabilité de la particule est donc donnée par

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}}\, e^{-2x^2/a^2}$$

La courbe représentant cette fonction est la classique courbe en cloche. Le centre du paquet d'ondes, maximum de cette fonction, est situé au point $x = 0$; c'est bien ce que l'on aurait trouvé en appliquant la formule générale vie précédemment

$$x_M(0) = x_o = -\left[\frac{d\alpha}{dk}\right]_{k=ko}$$

puisque dans ce cas particulier, la fonction $g(k)$ est reélle

Relation d'incertitude

Lorsqu'on étudie une fonction de Gauss $f(x) = e^{-x^2/b^2}$, il est commode de définir sa largeur par

$$\Delta x = \frac{b}{\sqrt{2}}$$

Lorsque x varie de 0 à $\pm\Delta x$, $f(x)$ est réduite dans le rapport $\sqrt{e}$; cette définition, qui est bien sûr arbitraire, a l'avantage de coïncider avec celle de l'écart quadratique moyen de la variable x. Avec cette convention, on peut calculer la largeur Δx du paquet d'ondes,

$$\Delta x = \frac{a}{2}$$

On peut procéder de même pour calculer la largeur Δk, puisque $|g(k,0)|^2$ est aussi une gaussienne, ce qui donne

$$\Delta k = \frac{1}{a}$$

ou encore

$$\Delta p = \frac{\hbar}{a}$$

On obtient ainsi

$$\Delta x\, \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

résultat bien compatible avec la relation d'incertitude de Heisenberg.

Evolution du paquet d'ondes