

LP 38 : Aspects ondulatoires de la matière. Notion de fonction d'onde.



proposée par :

CHARLOTTE MESMACQUE & GRÉGOR Y GREDAT

corrigée par :

Loïc AUVRAY

Le 10 Janvier 2014

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Introduction | 2 |
| I Aspects ondulatoires de la matière | 2 |
| I.1 L'intuition de DE BROGLIE (1923) | 2 |
| I.2 L'expérience de DAVISSON et GERMER (1927) | 4 |
| I.3 Interférences des ondes de matière | 5 |
| II Vers la description quantique de la matière | 6 |
| II.1 Dualité onde–corpuscule et interprétation probabiliste | 6 |
| II.2 La fonction d'onde | 6 |
| II.3 Les ondes libres de DE BROGLIE | 7 |
| II.4 Le principe de superposition | 8 |
| III Dynamique de la fonction d'onde | 8 |
| III.1 L'équation de SCHRÖDINGER | 8 |
| III.2 Nécessité du paquet d'onde et son évolution | 9 |
| III.3 Mesures d'impulsion et relations d'HEISENBERG | 12 |
| Conclusion | 14 |
| Bibliographie | 15 |

Introduction

✧ Niveau : L3 .

- ✧ Pré-requis : ★ Physique ondulatoire (Interférences, diffraction, etc)
 ★ Aspects corpusculaire du rayonnement, relations de PLANCK–EINSTEIN
 ★ Relativité restreinte
 ★ Les Transformées de Fourier

Le début du XX^e siècle a vu l'émergence des nouveaux concepts relatifs au rayonnement et qui sont introduits pour décrire les expériences historiques tel que le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique, l'effet Compton ou le spectre d'émission des atomes. Le dualité onde corpuscule fut pressentie par EINSTEIN lors de la définition du photon que nous avons déjà étudié. Nous allons maintenant voir les briques de base de la théorie quantique qui vient s'ajouter aux théories électromagnétique (MAXWELL), mécaniste (NEWTON) et thermodynamique (KELVIN) insuffisantes à elles-seules pour interpréter certaines expériences à l'échelle de la matière.

I Aspects ondulatoires de la matière

I.1 L'intuition de de Broglie (1923)

[1, 2] LOUIS DE BROGLIE avait pour habitude de fréquenter le laboratoire de son frère MAURICE DE BROGLIE et il s'étonnait d'entendre les physiciens parler de la même entité physique tantôt en tant qu'"électron", tantôt en tant que "rayon β " dans la radioactivité¹. Ceci a pu le mettre sur la piste d'une formidable hypothèse, accueillie avec enthousiasme par Einstein, qu'il formula en 1923 ainsi : *«les corpuscules matériels, tout comme les photons, peuvent avoir un aspect ondulatoire»*. Il eut alors l'idée d'associer à toute particule d'impulsion \mathbf{p} et d'énergie E , une onde de pulsation $\omega = 2\pi\nu$ et de longueur d'onde λ telle que :

$$[\text{Relations de de Broglie}] \quad \begin{cases} E = h\nu \\ \lambda = \frac{h}{p} \end{cases} \quad \text{où } h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \text{ est la constante de Planck.}$$

En fait, la formulation de DE BROGLIE était relativiste. Pour une particule de masse m , d'énergie E et d'impulsion $p = \gamma m v = \beta E / c$ avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$ où $\beta = v/c$, on a la relation :

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

et la relation de DE BROGLIE se réécrit :

$$\lambda = \frac{h}{m v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{h c}{\beta E}.$$

1. La désintégration β^- , c'est la réaction — via l'interaction faible — $n \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}_e$ (conservation du nombre leptonique)

Ordres de grandeur (Complément A_I de [1])

✧ Pour montrer que les propriétés ondulatoires de la matière sont impossibles à mettre en évidence dans le domaine macroscopique (à l'exception d'objets quantiques macroscopiques comme les condensats de BOSE-EINSTEIN), prenons l'exemple d'un grain de poussière de diamètre $1 \mu\text{m}$ et de faible masse 10^{-15}kg . Alors, pour une vitesse 1mm/s , la relation de DE BROGLIE donne :

$$\lambda = \frac{6.6 \times 10^{-34}}{10^{-15} \times 10^{-3}} \simeq 6.6 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}$$

Une telle longueur d'onde est complètement négligeable à l'échelle du grain ! On comprend pourquoi, dans la vie de tous les jours, les aspects ondulatoires de la matière échappent complètement à notre perception.

Remarque : Un autre critère pour savoir si la description quantique est nécessaire est de raisonner sur l'action caractéristique du problème. Si elle est inférieure ou de l'ordre de \hbar , le problème est quantique. Ici, non :

$$m \times r \times v \simeq 10^{-15} \times 10^{-6} \cdot 10^{-3} \simeq 10^{-24} \gg \hbar.$$

✧ Pour des neutrons thermiques de masse $m_n = 1.67 \times 10^{-27} \text{kg}$ à l'énergie moyenne d'agitation thermique à la température T , l'impulsion p est donnée par la relation :

$$\frac{p^2}{2m_n} = \frac{3}{2} kT,$$

où k est la constante de Boltzmann. La longueur d'onde correspondant, à la température ambiante, vaut :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3m_n kT}} \simeq 1.4 \text{ \AA}.$$

C'est l'ordre de grandeur de la distance entre atomes dans un réseau cristallin . On peut donc espérer qu'un faisceau de neutrons thermiques envoyé sur cristal donne naissance à des phénomènes de diffraction analogues à ceux observés avec des rayons X ².

✧ Pour des électrons de charge e , de masse $m_e = 0.9 \times 10^{-30} \text{kg}$ et d'énergie cinétique imposée grâce à une différence de potentiel V , on a : $E = \frac{p^2}{2m_e} = eV$. Par conséquent :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \simeq \frac{12.3}{\sqrt{V}} \text{ \AA}.$$

Avec des différences de potentiel de quelques centaines de Volts, on obtient encore des longueurs d'onde comparables à celles des rayons X, potentiellement exploitable pour sonder la matière.

✧ Dans le but de sonder la matière aux plus petites échelles, on dispose actuellement d'accélérateurs de particules capables de communiquer aux particules des énergies faramineuses. On obtient couramment des faisceaux d'électrons d'énergie 1GeV . Ceci est bien plus grand que leur énergie de masse au repos de 0.5MeV , ils ont donc une vitesse très voisine de celle de la lumière. Ainsi leur longueur associée vaut :

$$\lambda = \frac{hc}{\beta E} \simeq \frac{6.6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1 \times 1.6 \cdot 10^{-10}} \simeq 1.2 \text{ Fermi}.$$

2. Rappel sur les rayons X — rayonnement ionisant qui a valu le Nobel à RÖNTGEN : produits par fluorescence, radioactivité ou Bremsstrahlung à $\lambda_X \simeq 0.01$ à 10nm donc haute fréquence $\nu_X \simeq 10^{16}$ à 10^{19}Hz soit des photons de qqs eV à 10MeV .

Cet ordre de grandeur correspond à la taille d'un proton : on peut ainsi accéder à la structure des noyaux atomiques.

L'effort conceptuel de LOUIS DE BROGLIE sera récompensé par la confirmation expérimentale de DAVISSON et GERMER en 1927 et un prix Nobel en 1929.

I.2 L'expérience de Davisson et Germer (1927)

[2] L'expérience de DAVISSON et GERMER consiste à envoyer sur un cristal de nickel un faisceau d'électrons monocinétiques obtenus par extraction à partir d'un filament métallique chauffé. Au-delà du cristal, on recueille les électrons, soit dans un compteur, soit sur plaque fluorescente. On observe alors des taches discrètes correspondant à des faisceaux diffractés bien définis. La figure de diffraction obtenue est semblable (au sens géométrique) à celle obtenue sur le même cristal avec des rayons X. La figure de diffraction obtenue avec des électrons change par un facteur d'échelle global lorsque l'on fait varier leur impulsion \mathbf{p} . Elle devient superposable à celle obtenue avec des rayons X de longueur d'onde λ_X , si la longueur d'onde de DE BROGLIE des électrons $\lambda = \frac{h}{p} \simeq \frac{12.3}{\sqrt{V}} \text{ \AA}$ est égale à λ_X . C'est ainsi qu'en 1927, on obtient la preuve expérimentale que les électrons (particules élémentaires de masse et charge bien définies) présentent le comportement ondulatoire prédit par DE BROGLIE.

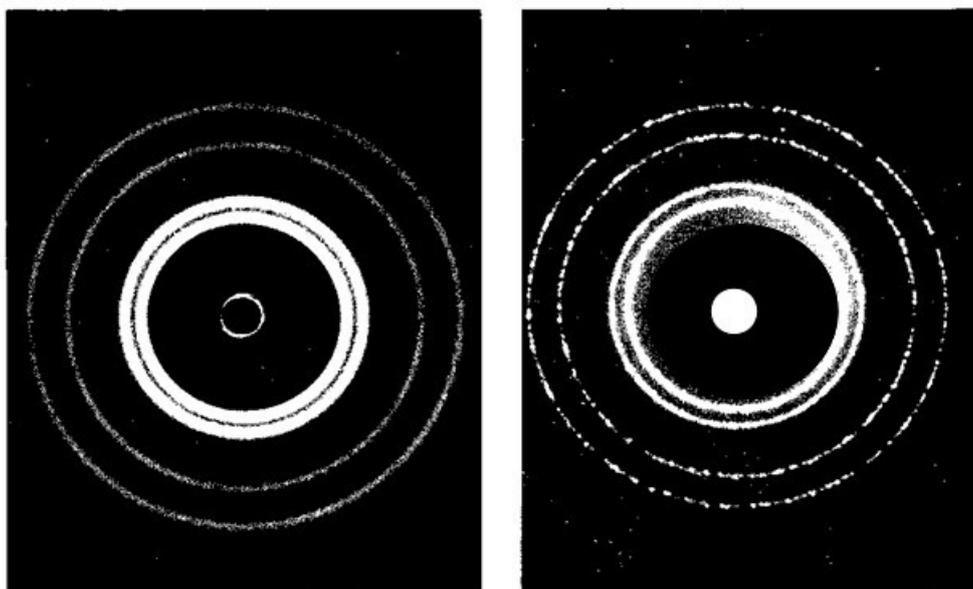


Fig. 1 – *Figure de diffraction par une poudre métallique. À gauche : avec des rayons X. À droite : avec un faisceau d'électrons.*

En reproduisant l'expérience par diffraction en réflexion sur une poudre de graphite, on obtient des anneaux dont les diamètres sont fonction de la symétrie cristalline et de la longueur d'onde utilisée. En notant d la distance interréticulaire entre plans cristallographiques et θ l'angle d'incidence du faisceau, des pics d'intensité sont obtenus dans les directions pour lesquels les ondes émergentes

interfèrent constructivement :

$$[\text{Condition de Bragg}] \quad 2d \sin \theta = n \lambda.$$

Connaissant $p = \sqrt{2m_e eV}$ et le diamètre des anneaux permettant de remonter à λ (d étant connu), on effectue une régression $\lambda = f(1/p)$ pour vérifier la relation de DE BROGLIE.

Des appareils utilisant la diffraction des électrons sont à l'heure actuelle commercialisés et couramment utilisés dans la recherche industrielle. Ce sont des outils de choix pour l'étude des propriétés des matériaux et des surfaces : problèmes de corrosion, de catalyse et de réactions chimiques, de dislocations etc. La diffraction de neutrons, particules neutres, est d'une utilité quotidienne : elle permet aux physiciens de la matière condensée de sonder l'ordre magnétique dans la matière et d'accéder avec détail aux structures cristallines.

I.3 Interférences des ondes de matière

Si la matière présente un comportement ondulatoire, il n'est alors pas exclu de pouvoir observer des interférences à l'échelle quantique. Le système le plus simple auquel on pourrait penser est un dispositif type trous d'YOUNG (Schéma de principe). Nous allons voir qu'une telle expérience est riche en terme d'interprétation et permet de mettre le doigt sur un certain nombre de concepts fondamentaux en physique quantique. Tout d'abord, présentons les résultats obtenus au fil des années pour des objets de taille, de masse et de complexité croissante. (transparents numériques) :

- (i) Expérience de ZEILINGER (1988) : Diffraction de neutrons par des fentes d'YOUNG.
- (ii) Expérience de CARNAL (1991) : Diffraction d'atomes d'Hélium par des fentes d'YOUNG.
- (iii) Expérience de ANDREWS (1997) : Interférences avec des condensats de BOSE-EINSTEIN (objet quantique macroscopique : une centaine d'atomes dans le même état quantique fondamental).
- (iv) Expérience de ZEILINGER (1999) : Diffraction de fullerène par des fentes.

Puisque l'on a affaire à une figure d'interférences semblable à celle que l'on obtiendrait en optique, on peut voir si l'hypothèse de DE BROGLIE est toujours vérifiée en comparant la valeur de l'interfrange mesurée à celle prédite (pour les transparents où les données nécessaires apparaissent) :

$i = \frac{\lambda D}{a}$ où λ est la longueur d'onde de DE BROGLIE, D la distance séparant les fentes du détecteur et a la distance entre les fentes.

Pour (ii), il est donné $\lambda_{\text{He}} \simeq 1.03 \text{ \AA}$, $D = 64 \text{ cm}$ et $a = 8 \mu\text{m}$, donc on prédit :

$$i_{\text{He}} \simeq \frac{1.03 \cdot 10^{-10} \times 64 \times 10^{-2}}{8 \times 10^{-6}} \simeq 8.2 \mu\text{m}.$$

La valeur moyenne entre deux franges mesurée est de $7.7 \pm 0.5 \mu\text{m}$ donc en bon accord !

Pour (iv), la vitesse moyenne des fullerènes est évaluée à 117 m/s , on en déduit :

$$\lambda_{C_{60}} = \frac{h}{m v} \simeq \frac{6.6 \times 10^{-34}}{12 \times 60 \times 1.67 \times 10^{-27} \times 117} \simeq 4.7 \times 10^{-12} \text{ m}.$$

De là, on calcule :

$$i_{C_{60}} \simeq \frac{4.7 \times 10^{-12} \times 1.25}{100 \times 10^{-9}} \simeq 59 \mu\text{m}.$$

C'est tout à fait comparable à ce que l'on voit sur la figure !

Nous avons, dans cette partie, vu qu'à l'échelle microscopique les particules adoptent un comportement ondulatoire. Mais l'analyse plus détaillée du phénomène d'interférence mis en évidence va nous permettre de mieux appréhender la mécanique quantique qui n'est pas une simple théorie ondulatoire.

II Vers la description quantique de la matière

II.1 Dualité onde–corpuscule et interprétation probabiliste

Voyons comment la figure d'interférence se construit au cours du temps. (Animation de J. BOBROFF disponible sur www.toutestquantique.fr. L'animation disponible sur le CD-Rom de M. JOFFRE ne fonctionne pas sur les machines trop récentes mais peut être disponible à l'Agreg.).

L'impact individuel de chacune des particules en un point précis de l'écran confirme leur nature corpusculaire et semble complètement aléatoire.

Au bout d'un certain temps, on voit apparaître la figure d'interférence, la particule a donc aussi le rôle d'une onde qui emplit tout l'espace. Chaque particule étant envoyée une par une, elle peut être passée aussi bien par une fente que par l'autre. En fait, tout se passe comme si elle était passée par les deux fentes à la fois pour ensuite "interférer avec elle-même".

Afin de pouvoir interpréter ces observations de façon semblable au traitement classique, on introduit les *amplitudes de probabilité* $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ pour que la particule atteigne un point x de l'écran en étant passée par la fente 1 (la deuxième étant bouchée) ou la fente 2 inversement. Ainsi, on veut écrire la probabilité de présence de la particule en un point x de l'écran comme :

$$P(x) = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2.$$

La notion de trajectoire (au sens classique) n'a plus de sens du fait de cette dualité onde–corpuscule. Ces concepts nous amènent à la notion de *fonction d'onde*.

Enfin, l'expérience montre que si l'on cherche à déterminer par quelle fente est passée la particule grâce à un détecteur, un observateur, alors le résultat est bien différent : on a modifié l'expérience et perdu les interférences. Ainsi, la mesure joue un rôle particulier en mécanique quantique et, en général, le fait de mesurer une grandeur physique affecte le système considéré!

II.2 La fonction d'onde

Description de l'état d'une particule [2] La description complète de l'état d'une particule de masse m dans l'espace, à l'instant t se fait au moyen d'un champ scalaire : la fonction d'onde complexe $\psi(\mathbf{r}, t)$. La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un volume d^3r entourant le point \mathbf{r} est :

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

La fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ a le sens d'une *amplitude de probabilité* de trouver la particule au point \mathbf{r} . Elle doit être de carré sommable et normalisée à 1 sur le domaine de l'espace accessible à la particule, pour donner un sens à la probabilité $P(\mathbf{r})$:

$$\int_{\mathcal{D}} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad [\text{Normalisation}].$$

La quantité $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ a le sens d'une *densité de probabilité* de présence.

On en déduit la dimension à 3D de la fonction d'onde :

$$[\psi]^2 \times L^3 = 1 \Rightarrow [\psi] = L^{-3/2}.$$

La fonction d'onde suffit à décrire complètement l'état d'une particule à l'instant t . Cependant, deux fonctions d'onde différent que par un facteur de phase constant $e^{i\alpha}$ décrivent un seul et même état.

Mesure de la position d'une particule La mesure se fait par l'intermédiaire d'un appareil classique, macroscopique (comportement ne nécessitant pas une description quantique.). Elle permet d'affirmer qu'à l'instant t , une particule a été détectée avec certitude dans un voisinage $\delta^3 r$ du point \mathbf{r} et nulle part ailleurs, $\delta^3 r$ étant une quantité intrinsèque à l'appareil de mesure. Ceci signifie que si l'on prépare N particules dans le même état, les N résultats de mesure $\mathbf{r}_{i=1\dots N}$ seront distribués suivant la loi de probabilité $P(\mathbf{r})$. Alors, la valeur moyenne de ces résultats et l'écart quadratique moyen sur une coordonnée sont :

$$\begin{cases} \langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r, \\ (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \end{cases}$$

Remarque : L'interprétation physique communément admise de la fonction d'onde ne fut donnée qu'en 1926 par BORN. En raison du caractère probabiliste qu'elle introduisait, elle suscita la méfiance chez quelques physiciens de renom comme EINSTEIN qui aussitôt déclara : « Dieu ne joue pas aux dés ».

II.3 Les ondes libres de de Broglie

[2] Du phénomène d'interférences déjà décrit, il vient l'idée de supposer — au plus simple — que l'état de particules monocinétiques libres dans l'espace peut être décrit par une fonction d'onde voisine d'une onde plane monochromatique de la forme :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}.$$

Les relations de DE BROGLIE $E = \hbar \omega$ et $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ permettent d'obtenir ce l'on appelle les ondes libres de DE BROGLIE :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar}.$$

On vérifie alors qu'elles sont solutions des équations aux dérivées partielles :

$$\begin{cases} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) & \text{[Equation de Shrödinger libre]} \\ \left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0 & \text{[Equation de Klein Gordon]} \end{cases}$$

aux conditions respectives que :

$$\begin{cases} E = \frac{p^2}{2m} \\ E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \end{cases}$$

ce qui correspond simplement à l'expression de l'énergie d'une particule libre non relativiste et relativiste (respectivement).

L'équation de SHRÖDINGER libre a la forme d'une équation de diffusion (en faisant le changement de variable $t' = i \times t$). Quant à l'équation de KLEIN GORDON, on la retrouve dans la description de propagation d'onde dans un milieu dispersif (chaîne de pendules couplés, plasmas).

Principe de correspondance Les relations de dispersion dérivées à partir des relations de DE BROGLIE s'écrivent ainsi :

$$\begin{cases} \left(\omega - \frac{\hbar k^2}{2m} \right) = 0 & (\times \psi(\mathbf{r}, t)) \\ \left(\omega^2 - \left[k^2 c^2 + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \right] \right) = 0 & (\times \psi(\mathbf{r}, t)) \end{cases}$$

Donc, en prenant la prescription $\omega \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t}$ et $\mathbf{k} \rightarrow -i \nabla$ on retombe sur les équations d'onde déjà écrites et vérifiées par les ondes planes de DE BROGLIE.

Le *principe de correspondance* généralise *grosso-modo* cette prescription en mécanique quantique. Il fait en particulier correspondre à la relation entre énergie et impulsion classique, une relation de dispersion quantique. Ceci revient donc à associer à E et \mathbf{p} des opérateurs de la façon suivante : $E \rightarrow i \hbar \frac{\partial}{\partial t}$ et $\mathbf{p} \rightarrow -i \hbar \nabla$.

II.4 Le principe de superposition

En raisonnant toujours à partir de l'expérience des trous d'YOUNG, supposons que l'on connaisse les fonctions d'onde $\psi_1(\mathbf{r}_C, t)$ (pour l'onde diffractée par une fente) et $\psi_2(\mathbf{r}_C, t)$ en tout point \mathbf{r}_C de l'écran de détection. Alors, nous rendrons compte du phénomène d'interférence à condition que pour les deux fentes ouvertes la fonction d'onde vérifie :

$$\psi(\mathbf{r}_C, t) \propto \psi_1(\mathbf{r}_C, t) + \psi_2(\mathbf{r}_C, t)$$

Cette propriété fondamentale est élevée au rang de principe de la mécanique quantique : *Toute combinaison linéaire de fonctions d'onde possible est également une fonction d'onde possible*. Autrement dit, si $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ et $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ sont des états possibles, alors

$$\psi(\mathbf{r}, t) \propto \alpha_1 \psi_1(\mathbf{r}, t) + \alpha_2 \psi_2(\mathbf{r}, t) \quad \text{où } (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{C}$$

est également un état possible.

En définitive : *la famille des fonctions d'onde d'un système donné forme un espace vectoriel*. Par conséquent, l'équation d'onde doit être linéaire !

III Dynamique de la fonction d'onde

III.1 L'équation de Schrödinger

En fait, SCHRÖDINGER dérivait également l'équation de KLEIN GORDON, cependant, elle n'était pas satisfaisante notamment parce qu'elle ne permettait pas d'écrire une équation locale de conser-

vation de la probabilité du type :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \quad \text{où} \quad \rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ est appelé le vecteur *densité de courant de probabilité*.

La grande contribution de SCHRÖDINGER fut d'incorporer les forces lorsque la particule se trouve plongée dans un potentiel $V(\mathbf{r})$. Il s'aperçut avec surprise que l'approximation *non relativiste* donnait, elle, le bon résultat.

Ainsi, lorsqu'une particule est placée dans un potentiel $V(\mathbf{r})$, l'évolution dans le temps de la fonction d'onde est régie par l'équation de SCHRÖDINGER :

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

Cette équation est linéaire, conformément au principe de superposition.

On trouve très rapidement une équation locale de conservation de la probabilité avec

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \Re \left(\psi^* \frac{\hbar}{i m} \nabla \psi \right) .$$

L'équation de SCHRÖDINGER fit le succès de la mécanique quantique en permettant l'évaluation des niveaux quantifiés d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène : elle permit d'expliquer les raies d'émission de l'hydrogène : séries de LYMAN, BALMER, BRACKETT, PASCHEN, etc.

Remarque : Il fallut des efforts théoriques et conceptuels supplémentaires pour aboutir à une équation quantique du mouvement dans le cas relativiste. En 1928, DIRAC dérive sa célèbre équation où la fonction d'onde n'apparaît plus comme un simple champ scalaire mais un spineur à 4 composants. Il inclut ainsi de façon naturelle le spin et prédit l'existence d'antiparticules.

Principe de réalité [3] On pourrait penser que la mécanique quantique est une physique ondulatoire au même titre que l'optique ou l'acoustique développées au XIX^e siècle, mais pour des ondes de matière. Le point délicat vient de l'interprétation probabiliste, qui implique que l'équation de Schrödinger ne sélectionne pas une "réalité" unique, mais décrit l'*évolution cohérente de plusieurs éventualités* (la superposition de plusieurs "réalités"). C'est la réduction du paquet d'ondes, au moment de la mesure, qui sélectionne de manière stochastique un résultat unique (une des "réalités" possibles).

III.2 Nécessité du paquet d'onde et son évolution

[2] En notant $\varphi(\mathbf{p}, t)$ la transformée de Fourier de $\psi(\mathbf{r}, t)$, on peut toujours écrire :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \varphi(\mathbf{p}, t) e^{i \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \frac{d^3 p}{(2 \pi \hbar)^{3/2}} .$$

La transformation de Fourier est une isométrie. Ainsi, on a le théorème de PARSEVAL-PLANCHEREL, qui permet d'écrire :

$$\int_{\mathcal{D}'} |\varphi(\mathbf{p}, t)|^2 d^3 p = \int_{\mathcal{D}} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r = 1 .$$

Revenons sur les ondes planes monochromatiques de DE BROGLIE. Elles ne peuvent guère représenter l'état d'une particule puisqu'elles ne sont pas normalisables ! Un état physique acceptable en

est une superposition linéaire (conformément au principe de superposition) appelée *paquet d'ondes*. On peut donc écrire la fonction d'onde comme :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \phi(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}.$$

Ce n'est rien d'autre que la transformée de Fourier déjà vue en posant : $\varphi(\mathbf{p}, t) = \phi(\mathbf{p}) e^{-iEt/\hbar}$.

Propagation du paquet d'ondes À 1D, la fonction d'onde se réécrit :

$$\psi(x, t) = \int g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk.$$

Supposons que l'étalement de la fonction $g(k)$ autour de son centre $k_0 = \int k |g(k)|^2 dk$ est suffisamment faible (approximation onde quasi-plane) pour pouvoir écrire :

$$\omega(k) \simeq \omega_0 + v_g(k - k_0) \quad \text{avec} \quad \omega_0 = \omega(k_0), \quad v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}$$

pour toutes les valeurs de k où $g(k)$ prend des valeurs non-négligeables. De cela, on déduit :

$$\psi(x, t) \simeq e^{i(k_0 v_g - \omega_0)t} \psi(x - v_g t, 0) \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 \simeq |\psi(x - v_g t, 0)|^2.$$

La densité de probabilité de présence se propage donc le long de l'axe x à la vitesse v_g : la *vitesse de groupe*. Les relations de dispersion déjà données donnent la vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$:

$$\begin{cases} v_\varphi = \frac{\hbar k}{2m} & [\text{cas non relativiste}] \\ v_\varphi = c \sqrt{1 + \left(\frac{mc}{\hbar k}\right)^2} & [\text{cas relativiste}] \end{cases}$$

$v_\varphi = v_\varphi(k)$, par conséquent le vide en mécanique quantique est similaire à un *milieu dispersif* ! (le vide est bien plus compliqué à décrire en réalité).

Quant à la vitesse de groupe, on trouve :

$$\begin{cases} v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} & [\text{cas non relativiste}] \\ v_g = \frac{k_0 c^2}{\omega_0} = \frac{p_0 c^2}{E} & [\text{cas relativiste}] \end{cases}$$

Donc on retrouve la limite classique : la vitesse de propagation du paquet d'ondes est celle d'une particule classique d'impulsion égale à la valeur moyenne p_0 du paquet d'ondes.

Position moyenne et étalement Grâce à l'équation de SCHRÖDINGER et quelques IPPs on a :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \int x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right) dx \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = v_0 = \text{Cte.} \end{aligned}$$

On en déduit une évolution linéaire de la position moyenne :

$$\langle x \rangle (t) = \langle x \rangle_0 + v_0 t.$$

Par conséquent, le mouvement du centre du paquet d'ondes est uniforme, tout comme celui de la particule classique libre.

Pour la variance, il faut travailler un peu plus (toujours à coup d'IPP et grâce à l'équation de SCHRÖDINGER)

$$\frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{i \hbar}{m} \int x \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx.$$

Donc

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = \frac{\hbar^2}{2 m^2} \int x \left(\psi \frac{\partial^3 \psi^*}{\partial x^3} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx + \text{C.C.}$$

On remarque alors que

$$\psi \frac{\partial^3 \psi^*}{\partial x^3} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} + \text{C.C.} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

il reste :

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = -\frac{\hbar^2}{2 m^2} \int \left(\psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) dx + \frac{\hbar^2}{m^2} \int \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

qui se réécrit :

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = \frac{2 \hbar^2}{m^2} \int \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

Enfin :

$$\frac{d^3 \langle x^2 \rangle}{dt^3} = \frac{i \hbar^3}{m^3} \int \left(\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^3 \psi^*}{\partial x^3} \right) dx = 0$$

Ce qui permet, en notant $\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = 2 v_1^2$ et $\left. \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} \right|_{t=0} = \xi_0$, d'écrire :

$$\langle x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_0 + \xi_0 t + v_1^2 t^2.$$

En définitive, la variance de la distribution de probabilité de la position s'écrit sous la forme :

$$(\Delta x)^2 = \Delta x_0^2 + \xi_1 t + \Delta v^2 t^2$$

La variance d'un paquet d'ondes libre varie quadratiquement avec le temps. Au cours de son évolution, le paquet d'ondes acquiert donc une variance minimale avant de s'étaler indéfiniment ! (Schémas)

Réduction du paquet d'onde lors de la mesure Nous avons vu lors de l'animation, que la mesure en mécanique quantique était *destructive* : elle modifie de façon irréversible l'état d'un système quantique. Par conséquent, immédiatement après la mesure, l'état $\psi(\mathbf{r}, t)$ du système s'est transformé en un état $\psi_\alpha(\mathbf{r})$: on parle de *réduction du paquet d'onde* et ceci est un moyen de préparer un système dans un état bien défini.

III.3 Mesures d'impulsion et relations d'Heisenberg

Pour être cohérent avec ce qui a déjà été fait, nous posons que la probabilité lors d'une mesure d'impulsion de la particule, de trouver celle-ci dans un volume d^3p autour de \mathbf{p} est :

$$d^3P(\mathbf{p}) = |\varphi(\mathbf{p})|^2 d^3p.$$

On peut ainsi définir :

$$\begin{cases} \langle \mathbf{p} \rangle = \int \mathbf{p} |\varphi(\mathbf{p})|^2 d^3p, \\ (\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2. \end{cases}$$

Par propriété de l'analyse de Fourier (la fonction $\psi(\mathbf{r}, t)$ est d'autant plus étroite que sa transformée de Fourier $\varphi(\mathbf{p})$ est large et inversement), on obtient les propriétés intrinsèques suivantes :

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2, \\ \Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2, \quad [\text{Inégalités d'Heisenberg}] \\ \Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2. \end{cases}$$

Donc, intrinsèquement, on a une limite inférieure sur les produits des incertitudes de mesure des deux variables conjuguées position et impulsion. On ne peut donc pas connaître parfaitement à la fois la position et l'impulsion d'une particule.

Des éléments de démonstration (p.48 de [3])

Grâce à l'égalité de PARSEVAL-PLANCHEREL :

$$\langle k_x^2 \rangle = \int k^2 |\varphi(k)|^2 dk = \int \left[\frac{1}{i} \frac{d\psi}{dx} \right]^* \left[\frac{1}{i} \frac{d\psi}{dx} \right] dx = \int \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx$$

Ainsi, on prend $\langle x \rangle = 0 = \langle k \rangle$ et on pose le polynôme

$$P(\lambda) = \int \left| x \psi(x) + \lambda \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = (\Delta k)^2 \lambda^2 + \lambda + (\Delta x)^2$$

Ce polynôme étant défini positif, son discriminant est forcément négatif : c'est gagné.

Ordres de grandeur [2]

✧ On considère un électron libre confiné dans un volume de taille typique celle d'un atome $\Delta x_{t=0} \sim 1 \text{ \AA}$. L'inégalité d'HEISENBERG donne sa dispersion minimale en impulsion :

$$\Delta p_{t=0} = m_e \Delta v_{t=0} \geq \hbar / (2 \Delta x_{t=0}) = m_e \times 5.9 \times 10^5.$$

L'étalement du paquet d'onde peut alors s'estimer à partir de ce que l'on a vu avant. Il se trouve qu'une seconde est un temps extrêmement long à l'échelle atomique, donc au bout d'une seconde :

$$\Delta x_{t=1s} \sim \Delta v_0 \times t \gtrsim 600 \text{ km}$$

la fonction d'onde a explosé! Donc l'électron est délocalisé en un temps très faible sur des distances macroscopiques dans un cristal!

✧ Pour une masse $m = 10^{-3}$ g (disons de l'eau), localisée avec une précision de $\Delta x_{t=0} = 1$ mm, il faut au moins

$$4 m \Delta x_{t=0}^2 / \hbar = 4 \times 10^{22} \text{ s} \sim 10^{15} \text{ années}$$

pour que l'incertitude en position double! Les effets quantiques sont ici tout à fait négligeables!

La stabilité de la matière [2] Considérons l'atome d'hydrogène avec un électron placé dans le potentiel Coulombien du proton $V(r) = -q^2/4\pi\epsilon_0 r = -e^2/r$. L'énergie de l'électron s'écrit :

$$E = \underbrace{\frac{p^2}{2m_e}}_{E_c} + \underbrace{V(r)}_{E_p}.$$

En classique On décrit le mouvement de l'électron comme une orbite circulaire, de rayon r . Le théorème du Viriel permet d'écrire :

$$2E_c + E_p = 0 \Rightarrow E = \frac{1}{2} E_p = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r}$$

Cette énergie n'est pas bornée inférieurement : plus le rayon diminue, plus elle diminue. Or les équations de MAXWELL prédisent qu'accélééré dans son mouvement circulaire, l'électron rayonne. L'électron devrait donc rayonner en permanence jusqu'à s'effondrer sur le noyau : la matière, du point de vue classique, est instable!

En quantique En notant $\langle r \rangle$ la distance moyenne de l'électron au proton mesurant l'incertitude sur sa position, l'énergie Coulombienne est de l'ordre de $-e^2/\langle r \rangle$. Par ailleurs, La relation d'HEISENBERG permet d'écrire :

$$E_c \sim \frac{\langle p \rangle^2}{2m_e} \geq \frac{\hbar^2}{2m_e \langle r \rangle^2}.$$

Du coup :

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2m_e \langle r \rangle^2} - \frac{e^2}{\langle r \rangle}.$$

L'énergie est bornée inférieurement. Le minimum correspond à

$$\langle r \rangle = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = a_0 \sim 0.53 \text{ \AA},$$

ce qui conduit à :

$$E_{min} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = -R_y = -13.6 \text{ eV}$$

(Un argument plus rigoureux existe)

Conclusion

La physique quantique est de nos jours l'une des théories les mieux vérifiées expérimentalement. Ses fondements se sont bâtis en à peine une vingtaine d'années au début du XX^e siècle. Ses applications ont d'ores et déjà envahi et transformé notre quotidien, il suffit de penser aux lasers, au domaine des semiconducteurs, à la microscopie etc.

Nous verrons dans un prochain cours que l'on peut élaborer un autre formalisme pour décrire la fonction d'onde : celui de DIRAC où la fonction d'onde est décrite par un vecteur d'état élément d'un espace de Hilbert. Le principe de superposition joue un rôle clé pour permettre cette représentation.

Remarques du correcteur :

La leçon était (un peu) trop longue : j'ai sacrifié quelques ordres de grandeurs moins importants, le principe de correspondance, la présentation de l'équation locale de conservation de la probabilité, le principe de réalité (c'est quand même bon d'en parler) et la stabilité de la matière. Pour l'évolution du paquet d'onde, j'ai fait le (petit) calcul en live, mais on peut le présenter sur transparent (comme présenté ci-après) et gagner les deux minutes qu'il me manquait.

De nombreuses remarques — historiques pour la plupart — ont été faites par le correcteur mais il y a eu peu de questions à proprement parler. Les notions sortant du cadre strict de la leçon, comme diffraction avec des neutrons, équation de DIRAC (destinées à tendre des perches pour avoir des questions, ce qui a échoué) ont, d'après lui, le goût de trop et trop peu à la fois... Par contre, il est bien d'avoir parlé d'un objet quantique macroscopique : les condensats (avoir les idées claires si on le fait).

Voici un résumé des idées abordées :

- ✧ Mieux vaut écrire la relation dans le sens $p = \hbar k$ (valable tout le temps). Au lieu de reprendre les ondes de DE BROGLIE après, on peut en partir et utiliser l'invariance de la phase par changement de référentiel pour voir apparaître la relation de DE BROGLIE.
- ✧ La description matricielle d'HEISENBERG précédait la dérivation de SCHRÖDINGER et il paraît qu'il avait notre âge, à l'époque... Caractère non commutatif de la mécanique quantique.
- ✧ Importance de l'action. \hbar a la dimension d'une action. Lien mécanique analytique – mécanique quantique : par exemple entre les crochets de POISSON et les commutateurs.
- ✧ On introduit des nombres complexes en mécanique quantique. Certains physiciens essaient toujours des descriptions de la mécanique quantique sans nombre complexe.
- ✧ La phase joue un rôle très important en physique ondulatoire. (Avec ses arguments c'était plus profond...)
- ✧ Une analogie : la limite corpusculaire vue sous l'angle de l'optique ondulatoire redonne l'optique géométrique.
- ✧ Mieux vaut éviter la définition de la fonction d'onde comme un champ scalaire sous peine de se contredire à l'introduction du spin dans un cours ultérieur.
- ✧ Quelle est la vitesse en sortie du canon à électrons dans les expériences présentées ? Elle est imposée par la température (même expression que pour les neutrons thermiques).
- ✧ Le métal est-il transparent aux électrons ? Non, ils sont réfléchis, c'est pour cela que l'on ne sonde que la surface ! Au contraire, pour les neutrons, l'absence de charge (donc d'interaction Coulombienne) leur procure une grande transparence ! Pour préparer des neutrons de longueurs d'onde différentes, on change T .
- ✧ Pour les fentes d'YOUNG, l'animation ne montre pas ce qui se passe lorsque l'on masque une

fente, c'est dommage. J'ai donc fait des schémas au tableau et ils sont importants.

✧ L'expérience de G.I. TAYLOR montre qu'il est encore possible d'obtenir des franges sur une plaque photographique avec des sources de lumière assez faibles pour qu'un seul photon soit présent à chaque instant ! On peut la citer et l'interpréter.

✧ L'équation de KLEIN GORDON est toujours vraie pour des particules de spin nul. Quant à l'équation de DIRAC, elle posait le même problème pour la définition du courant de probabilité : l'existence d'antiparticules et la définition de la mer de DIRAC permet dans les deux cas de s'affranchir des probabilités négatives !

✧ On peut s'intéresser aux *ondes pilotes*, introduites par DE BROGLIE lui même ou encore aux théories quantiques à variables cachées.

✧ Les expériences de goutte rebondissant sur une surface liquide vibrant verticalement offrent un exemple à l'échelle macroscopique de la dualité onde-corpuscule (et de jolies vidéos : voir les travaux de YVES COUDER). La goutte (de Silicone) est auto-propulsée par son interaction avec l'onde de surface qu'elle excite.

Bibliographie

- [1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique quantique I*. HERMANN, 1998.
- [2] J.-L. Basdevant and J. Dalibard. *Mécanique quantique*. ÉDITION ÉCOLE POLYTECHNIQUE 2009, Chapitres 1 et 2.
- [3] C. Texier. *Mécanique quantique, cours et exercices corrigés*. DUNOD, 2011.



« Rendez les choses aussi simples que possible, mais pas plus simples. »

ALBERT EINSTEIN

LP38 Aspects ondulatoires de la matière. Notion de fonction d'onde

Rapport du jury 2007 : « Leçon 42 : Cette leçon, qui correspond aux cours introductifs de mécanique quantique de la plupart des manuels, doit permettre d'introduire la longueur d'onde associée à une particule, l'aspect probabiliste des phénomènes quantiques, les observables position et quantité de mouvement, l'inégalité de Heisenberg et l'équation de Schrödinger. »

Rapport du jury 2009 : « Leçon 42 : La signification physique des différents termes de l'équation de Schrödinger n'est pas toujours connue. Le jury constate qu'un nombre significatif de candidats confondent équation aux valeurs propres et équation de Schrödinger. Enfin, les candidats sont invités à s'interroger sur les aspects dimensionnels de la fonction d'onde et sur sa signification physique précise. »

Le plan est proposé par le jury ! La leçon reprend en fait dans une vision plus moderne (et une plus grande exigence de modernité) le contenu de l'ancienne leçon : « Dualité onde-corpuscule, relations de Broglie, inégalités de Heisenberg. Applications ».

Rapport 2010 : Leçon 41 : Cette leçon peut être l'occasion d'introduire simplement l'équation de Schrödinger. La signification physique des différents termes de l'équation de Schrödinger n'est pas toujours connue. Le jury constate qu'un nombre significatif de candidats confondent équation aux valeurs propres et équation de Schrödinger. Enfin, les candidats sont invités à s'interroger sur les aspects dimensionnels de la fonction d'onde et sur sa signification physique précise.

Contenu possible

La nature ondulatoire de la matière : les relations de Louis de Broglie (1924) (aspect relativiste et non relativiste, ordres de grandeurs)

La quantification comme conséquence de l'hypothèse de *de Broglie* (conditions de Bohr)
Conséquences et vérifications expérimentales (interférence et diffraction des électrons) (exemples plus modernes : la diffraction et la réflexion des neutrons, fluides quantiques, atomes froids)

Manifestation de la « dualité onde-corpuscule », expérience de G.I. Taylor et les versions modernes, fentes d'Young, Nécessité d'une interprétation probabiliste.

Ondes planes et paquets d'ondes, conjugaison des observables position et quantité de mouvement, inégalités de Heisenberg. Conséquences et applications (énergie de confinement).

Équations d'onde (Klein-Gordon, Schrödinger), interprétation des différents termes

Conclusions et perspectives. Discussion des différents points de vue de Schrödinger et d'Heisenberg. Notion de vecteur d'état. États quantiques macroscopiques : « réalité de la fonction d'onde »

Bibliographie

- Berkeley, Physique Quantique vol.4
- Feynman
- Levy-Leblond, Balibar, Quantique, Rudiments
- Basdevant
- Thèse de Louis de Broglie (site « thèse en ligne » et Wikipédia)
- Cours de Jean-François Roch
- Cours d'histoire des sciences

Diffraction et interférences avec des neutrons.

A. Zeilinger et al., *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).

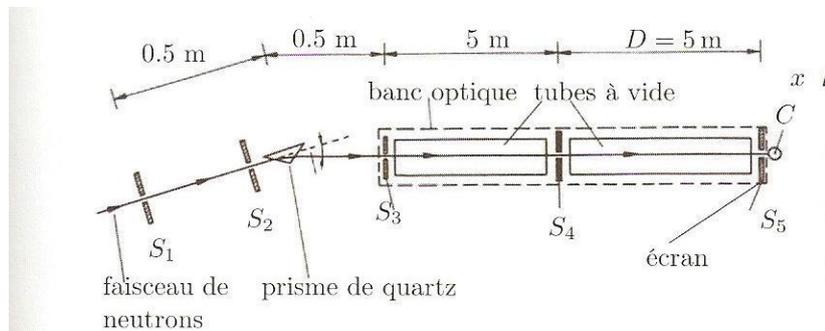
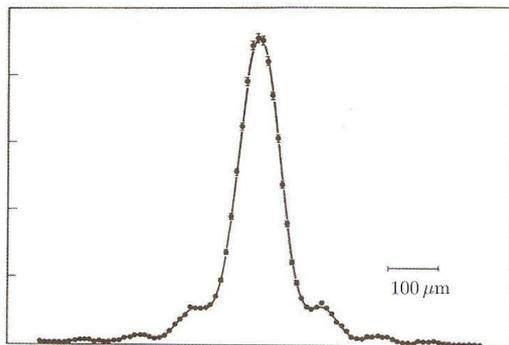
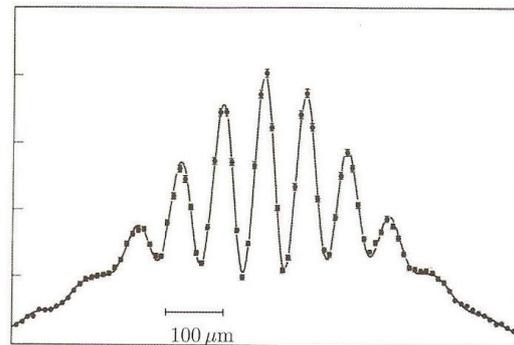


FIG. 1.7 - Dispositif expérimental pour la diffraction et les interférences de neutrons. S_1 et S_2 : fentes collimatrices. S_3 : fente d'entrée. S_4 : fente objet. S_5 : position du compteur C . D'après A. Zeilinger et al., *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1067 (1988).



Diffraction de neutrons par une fente.



Expérience des fentes d'Young avec des neutrons.

Source : M. Le Bellac, *Physique quantique*.
ISBN 2-86883-655-0

Diffraction d'atomes d'hélium par des fentes d'Young (Carnal, 1991)

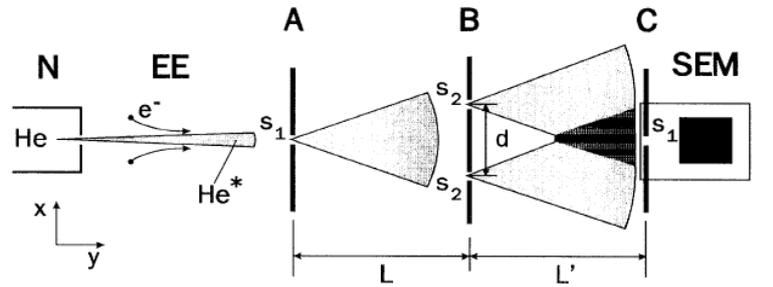


FIG. 2. Schematic representation of the experimental setup: nozzle system and gas reservoir N; electron impact excitation EE; entrance slit A, double slit B, and detector screen C; secondary electron multiplier SEM (mounted together with C on a translation stage). Dimensions: $d=8\ \mu\text{m}$, $L=L'=64\ \text{cm}$; slit widths: $s_1=2\ \mu\text{m}$, $s_2=1\ \mu\text{m}$.

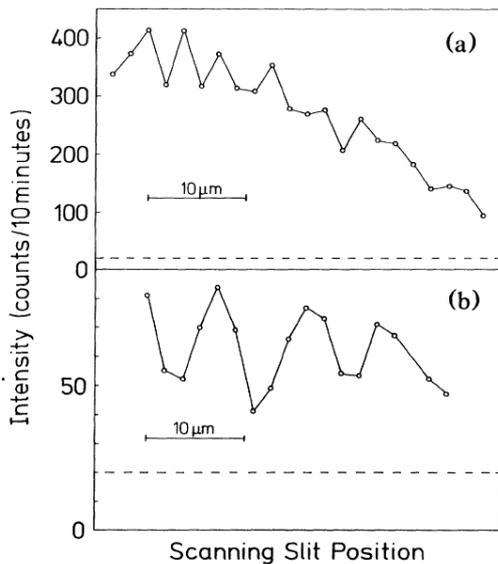


FIG. 4. Measured atomic intensity profiles in the detector plane as a function of the lateral detector position x . The profile is probed with the $2\text{-}\mu\text{m}$ -wide single slit. Atomic wavelength (a) $\lambda_{dB}=0.56\ \text{\AA}$ and (b) $\lambda_{dB}=1.03\ \text{\AA}$. The number of detected atoms during 10 min is plotted on the vertical axis. The dashed line is the detector background, with the atomic beam blocked in front of the entrance slit. The line connecting the experimental data is a guide to the eye.

interferometer where only the relative phase between the two different paths and not the actual shape of the interference pattern is important. Figure 5 shows a typical result of an experimental run with the $8\text{-}\mu\text{m}$ grating in the detector plane and a wavelength of $\lambda_{dB}=1.03\ \text{\AA}$. The average distance between two maxima is determined to be $7.7 \pm 0.5\ \mu\text{m}$, which differs from the theoretical value by about 5% and is within the limited accuracy of

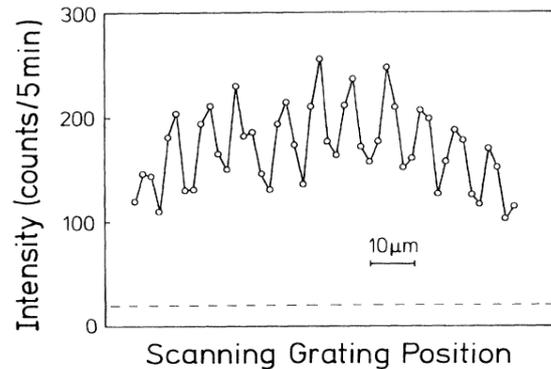


FIG. 5. Atomic density profile, monitored with the $8\text{-}\mu\text{m}$ grating in the detector plane, as a function of the lateral grating displacement. The dashed line is the detector background. The line connecting the experimental points is a guide to the eye.

Interférences avec des condensats de Bose Einstein

M.R. Andrews et al., *Science*, **275**, 5300, 637-641, (1997)

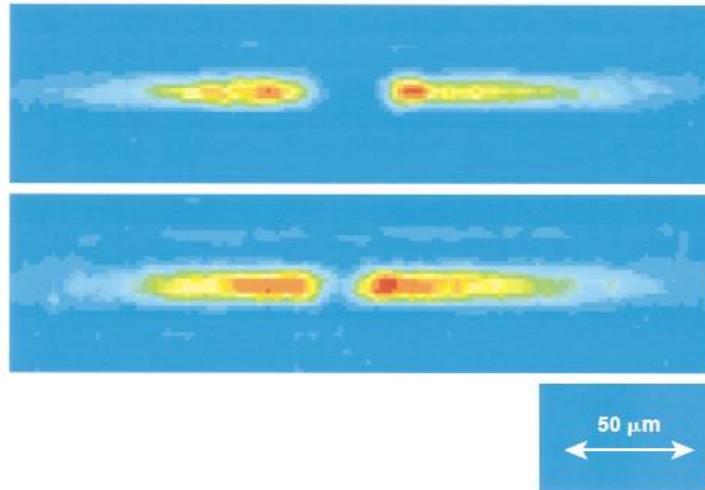


Fig. Interference pattern of two expanding condensates observed after 40 ms time-of-flight, for two different powers of the argon ion laser-light sheet (raw-data images). The fringe periods were 20 and 15 μm , the powers were 3 and 5 mW, and the maximum absorptions were 90 and 50%, respectively, for the left and right images. The fields of view are 1.1 mm horizontally by 0.5 mm vertically. The horizontal widths are compressed fourfold, which enhances the effect of fringe curvature. For the determination of fringe spacing, the dark central fringe on the left was excluded.

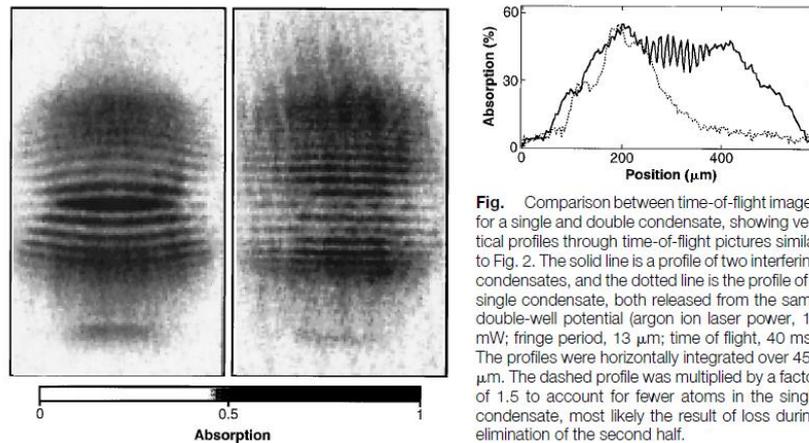


Fig. Comparison between time-of-flight images for a single and double condensate, showing vertical profiles through time-of-flight pictures similar to Fig. 2. The solid line is a profile of two interfering condensates, and the dotted line is the profile of a single condensate, both released from the same double-well potential (argon ion laser power, 14 mW; fringe period, 13 μm ; time of flight, 40 ms). The profiles were horizontally integrated over 450 μm . The dashed profile was multiplied by a factor of 1.5 to account for fewer atoms in the single condensate, most likely the result of loss during elimination of the second half.

Source : M.R. Andrews et al., Observation of Interference Between Two Bose Condensates, *Science*, **275**, 5300, 637-641, (1997)

Diffraction de fullerène par des fentes (expérience de Zeilinger, 1999)

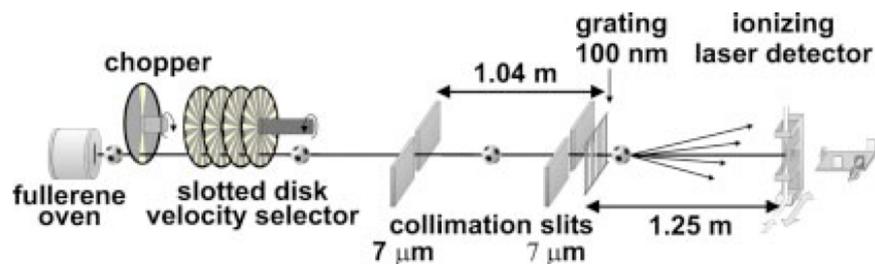


Fig. 3. Setup of the diffraction experiment. Fullerene molecules are sublimated in the oven at 900 K. The spectral coherence can be improved using a mechanical velocity selector. Two collimating slits improve the spatial coherence and limit the angular spread of the beam to smaller than the expected diffraction angle. A SiN grating with a 100 nm period and 50 nm openings is used to diffract the incident molecular waves. The molecular far-field distribution is observed using a scanning laser-ionization detector.

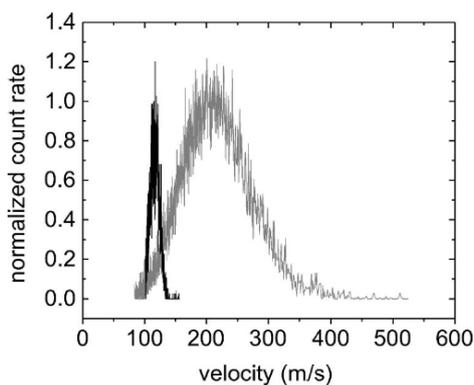


Fig. 5. Velocity distribution of the C_{60} molecules for a thermal and a velocity selected beam. The thermal beam (gray curve) is centered around $\bar{v} = 200$ m/s and has a width of $\Delta v/v \sim 0.6$, while the selected beam (black curve) is centered around $\bar{v} = 117$ m/s with a width of $\Delta v/v \sim 0.17$. We therefore expect the velocity selected interference pattern to be expanded by 70% on the screen and to show at least three times ($\approx 0.6/0.17$) as many interference orders as the unselected pattern.

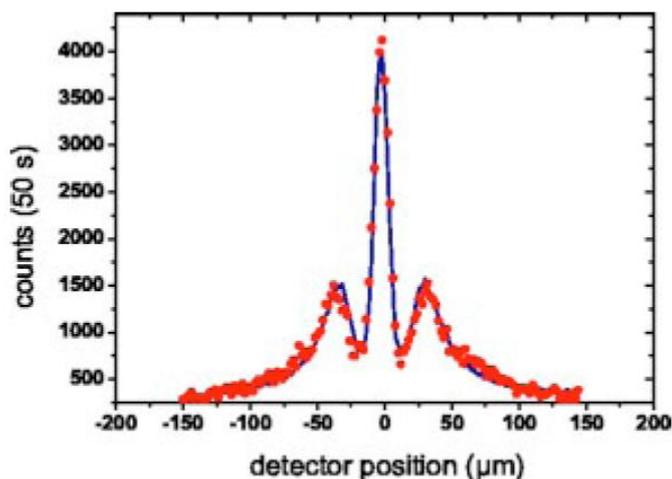


Fig. 6. Far-field diffraction of C_{60} using a thermal beam of $\bar{v} = 200$ m/s with a velocity spread of $\Delta v/v \sim 60\%$. The absence of higher order interference fringes is due to the poor spectral coherence.

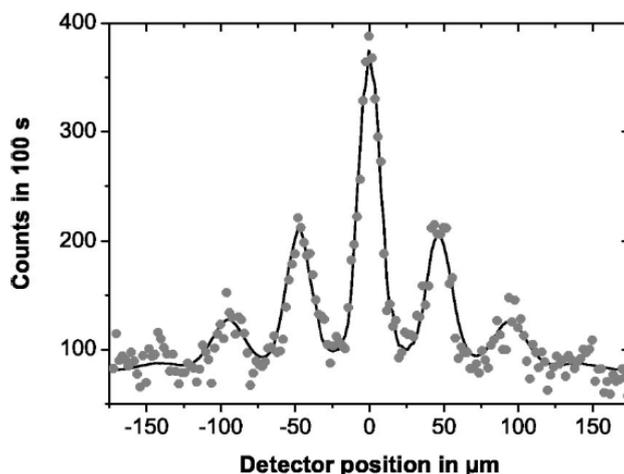


Fig. 7. Far-field diffraction of C_{60} using the slotted disk velocity selector. The mean velocity was $\bar{v} = 117$ m/s, and the width was $\Delta v/v \sim 17\%$. Full circles represent the experimental data. The full line is a numerical model based on Kirchhoff–Fresnel diffraction theory. The van der Waals interaction between the molecule and the grating wall is taken into account in form of a reduced slit width. Grating defects (holes) additionally contribute to the zeroth order.

III.2.

Évolution du paquet d'ondes (libre)

position moyenne $\langle x \rangle \triangleq \int_0^{\infty} \psi^* x \psi dx$

$\rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \int_0^{\infty} x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dx$

Schrödinger : $\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}$

$\Rightarrow \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \int_0^{\infty} x \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right) dx$

$\stackrel{IPP}{=} \frac{i\hbar}{2m} \int_0^{\infty} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) dx \stackrel{IPP}{=} -\frac{i\hbar}{m} \int_0^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$

$\triangleq v_0 = cte$

De même, on montre que $\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = cte \triangleq 2v_1^2$

donc :

$\begin{cases} \langle x \rangle(t) = \langle x \rangle_0 + v_0 t \\ \Delta x^2 = \Delta x_0^2 + v_1^2 t + \Delta v^2 t^2 \end{cases}$

Étalement !

où $\Delta v^2 = v_1^2 - v_0^2$

