Chapitre 1

Phénomènes quantiques

Toute matière commence
par un grand dérangement spirituel.
Antonin Artaud

La naissance de la physique quantique s'est produite le 14 décembre 1900, lorsque Planck, devant la Société Allemande de Physique, proposa une formule simple en parfait accord avec les expériences sur le spectre du rayonnement du corps noir. Planck avait d'abord obtenu son résultat à partir d'arguments empiriques, mais s'était aperçu qu'on pouvait déduire le point central de son argumentation à partir de la thermodynamique statistique en faisant l'hypothèse curieuse que des oscillateurs mécaniques chargés, de fréquence ν, ne pouvaient émettre ou absorber de l'énergie lumineuse que par quantités discrètes (des « quanta » d'énergie $n\,h\nu$). Planck comprit que le *quantum d'action* h, est une constante fondamentale :

$$h \simeq 6,6261\ 10^{-34}\ \text{J s}\,. \tag{1.1}$$

Les quanta de Planck étaient mystérieux, mais son résultat étonnamment efficace. Jusqu'en 1905, pas plus la communauté scientifique que Planck lui-même n'apprécièrent la portée de sa découverte. À cette date, Einstein publie son célèbre mémoire *Sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière*,[1] suivi d'une série d'articles fondamentaux où il relève et rectifie certaines incohérences dans les raisonnements de Planck. Si l'on pousse les idées de celui-ci, il faut admettre que la lumière elle-même a des propriétés « quantiques », et Einstein introduit le concept de *quantum de rayonnement*, appelé *photon* par Lewis en 1926, particule qui, pour une lumière de fréquence ν ou de pulsation ω, a une énergie :

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad \text{avec} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0546\ 10^{-34}\ \text{J s}\,. \tag{1.2}$$

[1] Annalen der Physik **17**, 132 (1905) ; traduit en anglais par A.B. Arons et M.B. Peppard, American Journal of Physics **33**, 367 (1965).

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Au passage, Einstein comprend l'explication et les lois de l'effet photoélectrique, découvert en 1887 par Hertz, et étudié systématiquement par Lenard entre 1899 et 1902, puis par Millikan. Le photon est également pourvu d'une impulsion :

$$\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k} \qquad |\boldsymbol{k}| = 2\pi/\lambda \ , \tag{1.3}$$

où $\boldsymbol{k}$ est le vecteur d'onde de l'onde électromagnétique, comme le prouveront en 1923 les expériences de Compton (diffusion des rayons X par les électrons libres d'une mince feuille d'aluminium).

Même si les quanta de Planck étaient mystérieux, ils étaient bien acceptés par la communauté scientifique, étant donné la qualité de son résultat. Au contraire, les quanta d'Einstein soulevèrent de sérieuses controverses qui persistèrent plusieurs années. Plusieurs physiciens considéraient l'idée comme absurde car en contradiction flagrante avec les équations de Maxwell qui décrivent l'énergie et l'impulsion du rayonnement comme des fonctions continues tant dans l'espace que dans le temps. Einstein en était bien conscient, mais il pensait que les mesures en optique ne concernaient que des moyennes dans le temps, et qu'il était concevable que les équations de Maxwell fussent insuffisantes dès lors que l'on avait affaire à des processus quasi-instantanés. Einstein qualifiait son hypothèse corpusculaire de « pas en avant révolutionnaire ». Il avait compris la « dualité » de la manifestation des propriétés de la lumière qui peuvent être *à la fois* ondulatoires *et* corpusculaires. C'est la découverte primordiale, le véritable point de départ de la théorie quantique.

La seconde étape se situe pendant les années 1912–1914. Niels Bohr, en cherchant un modèle cohérent de la structure des atomes, effectue la synthèse entre le principe de combinaison des raies spectrales de Ritz, le modèle atomique de Rutherford (qui venait, en 1911, de découvrir l'existence du noyau), et les quanta de Planck et Einstein. Bohr postule que les énergies des édifices atomiques et moléculaires n'adoptent que des valeurs discrètes, et que l'émission ou l'absorption de lumière par ces édifices ne se fait que pour certaines fréquences lumineuses bien précises :

$$\nu_{\mathrm{if}} = |E_{\mathrm{i}} - E_{\mathrm{f}}|/h \ , \tag{1.4}$$

où E_{i} et E_{f} sont les énergies du système avant et après l'émission (ou l'absorption). Ayant eu fortuitement connaissance de la formule empirique de Balmer, Bohr devine une règle de quantification des énergies et développe en quelques semaines son célèbre modèle de l'atome d'hydrogène. Le mécanisme de l'émission et de l'absorption de la lumière restait obscur dans la théorie de Bohr. Il ne fut expliqué que plus tard, en particulier par Einstein. Cependant, dès 1914, les expériences de Franck et Hertz montraient directement la quantification des énergies dans les atomes.

Ainsi, l'histoire avait voulu que la quantification du rayonnement fût découverte avant celle de la matière. Cette dernière, cependant, semblait impliquer un caractère « discontinu » des lois de la nature qui heurtait la sensibilité

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

de certains physiciens, et c'est avec enthousiasme qu'Einstein, entre autres, accueillit la remarquable hypothèse ondulatoire de Louis de Broglie, en 1923. De même que la lumière présente un comportement corpusculaire, de même, suppose Louis de Broglie, les particules, par exemple l'électron, peuvent présenter un comportement ondulatoire. À toute particule de vitesse $\boldsymbol{v}$ et d'impulsion $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$, de Broglie « associe » une onde, de longueur d'onde :

$$\lambda = h/p\ . \tag{1.5}$$

Cette hypothèse ondulatoire permettait d'entrevoir la quantification de la matière comme un phénomène d'ondes stationnaires, et restaurait la continuité tant désirée par Einstein.

Louis de Broglie s'était inspiré d'une série de travaux théoriques, notamment de Marcel Brillouin. Par ailleurs, il fréquentait le laboratoire de son frère Maurice de Broglie, et il s'étonnait d'entendre les physiciens parler du même être physique tantôt en tant qu'« électron », tantôt en tant que « rayon β » dans la radioactivité.

La théorie de la mécanique quantique dans son formalisme actuel s'est faite très rapidement entre 1925 et 1927, et apparaît comme le fruit de la conjonction exceptionnelle des talents de physiciens et de mathématiciens comme Schrödinger, Heisenberg, Born, Bohr, Dirac, Pauli, Hilbert, Von Neumann, etc. Cette synthèse remarquable, suivie d'expériences cruciales qui allaient rapidement ancrer la nouvelle mécanique, provenait de tout un travail expérimental et théorique effectué dans le premier quart du XXe siècle, dont nous n'avons relevé ci-dessus que quelques étapes marquantes.

Parmi toutes les expériences, nous en avons choisi trois, particulièrement exemplaires. Au § 1, nous présenterons tout d'abord l'expérience de Franck et Hertz, première démonstration expérimentale de la quantification de l'énergie dans les atomes. Nous discuterons ensuite au § 2 une expérience montrant le comportement ondulatoire de corpuscules matériels, des atomes en l'occurrence, et nous en déduirons le caractère probabiliste de la physique quantique. Nous évoquerons enfin au § 3 la première démonstration expérimentale, due à Davisson et Germer, du comportement ondulatoire des électrons au travers de leur diffraction par un réseau cristallin.

Ces expériences sont exemplaires car elles montrent la difficulté de pénétrer le monde quantique. L'intuition, la « raison », et le « bon sens » que nous avons façonnés à partir de la physique classique recèlent des pièges inattendus. Exemplaires aussi parce qu'elles contiennent l'essentiel des concepts nouveaux qu'il faut élaborer pour comprendre les phénomènes quantiques.

1 L'expérience de Franck et Hertz

Les idées de Niels Bohr reçurent une confirmation expérimentale éclatante et inattendue dès 1914. James Franck et Gustav Hertz étudiaient à l'époque un phénomène aussi important par ses applications pratiques que du point de vue

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

fondamental : les rayons cathodiques et les décharges électriques dans les gaz raréfiés. Ils se posaient comme beaucoup d'autres le problème de l'amélioration des tubes électroniques, notamment pour le perfectionnement du téléphone à longue distance.

En 1914, Franck et Hertz font une découverte étonnante en bombardant une vapeur d'atomes de mercure avec des électrons accélérés à des énergies de quelques eV. Tant que l'énergie des électrons est inférieure à un certain seuil, $E_s = 4{,}9$ eV, la collision est parfaitement élastique : les électrons émergents ont la même énergie que les électrons incidents. Rien d'anormal : la masse d'un atome de mercure est $\sim 400\,000$ fois supérieure à celle de l'électron, son énergie de recul est négligeable. L'énorme surprise est que lorsqu'on atteint l'énergie de seuil $E_s = 4{,}9$ eV, les électrons sortants perdent pratiquement toute leur énergie dans la collision. Au-dessus de cette valeur, une fraction des électrons émergents ont une énergie inférieure de précisément 4,9 eV à leur énergie initiale, les autres ont conservé leur énergie.

Par ailleurs, lorsque l'énergie des électrons est supérieure à ce seuil, on observe que les atomes de mercure émettent un rayonnement ultraviolet de longueur d'onde $\lambda = 253{,}7$ nm, ce qui ne s'observe pas si l'énergie des électrons est inférieure au seuil. Or la raie du mercure à $\lambda = 253{,}7$ nm est connue depuis longtemps dans la spectroscopie de cet élément, elle correspond à une fréquence ν qui satisfait la relation $h\nu = 4{,}9$ eV !

Cette observation est une confirmation simple et directe des idées de Niels Bohr sur la structure de l'atome et sur la spectroscopie. L'interprétation des résultats de Franck et Hertz corrobore parfaitement que l'énergie d'un atome ne peut adopter que des valeurs discrètes, ou quantifiées, et que les raies de la spectroscopie correspondent à des transitions entre ces niveaux d'énergie. En entrant en collision avec l'atome, l'électron peut lui transférer son énergie, et le porter de son niveau d'énergie le plus bas à un niveau d'énergie supérieure, perdant dans ce processus la différence d'énergie correspondante. Bien entendu, cela ne peut se produire que si l'énergie de l'électron incident est supérieure ou égale à cette différence d'énergie entre niveaux atomiques. Une fois porté dans le niveau d'énergie supérieur, l'atome se désexcite en émettant un rayonnement à la fréquence de Bohr.

Le résultat de Franck et Hertz, qui obtiendront le prix Nobel en 1925 pour cette découverte, est salué par la communauté scientifique. C'est en effet la preuve mécanique directe de la quantification de l'énergie dans les systèmes atomiques et moléculaires. Franck et Hertz poursuivirent cette exploration systématiquement, mettant en évidence les raies suivantes du spectre du mercure et d'autres éléments, comme l'hélium. Cette méthode, dans sa conception, est à la base de quantité de découvertes, notamment en physique nucléaire et en physique des particules élémentaires.

Un exemple assez récent concerne les molécules diatomiques. Dans une telle molécule, par exemple la molécule de monoxyde de carbone CO, les deux atomes peuvent vibrer l'un par rapport à l'autre le long de l'axe de la molécule.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Pour de faibles élongations, ces vibrations sont sinusoïdales. Nous étudierons ce type de problème au chapitre 4. Le résultat concernant les niveaux d'énergie d'un tel oscillateur est particulièrement simple. Si ν désigne la fréquence de l'oscillateur classique correspondant ($2\pi\nu = \sqrt{k/m}$ où k est le coefficient de la force de rappel et m la masse réduite), les niveaux d'énergie sont équidistants, de la forme :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\, h\nu \ .$$

La différence d'énergie entre deux niveaux est un multiple entier de $h\nu$.

La vérification expérimentale consiste à envoyer un faisceau d'électrons d'énergie donnée (typiquement 2 eV) sur un faisceau moléculaire de basse température. Un détecteur mesure la distribution en énergie des électrons émergents. L'énergie perdue par un électron incident a été transférée aux molécules. D'après la théorie, cette énergie est $n\, h\nu$ ($n = 0$ collision élastique, $n = 1, 2 \ldots$ collision inélastique). On s'attend donc à une série de pics également espacés dont la position nous donne la fréquence de vibration de la molécule.

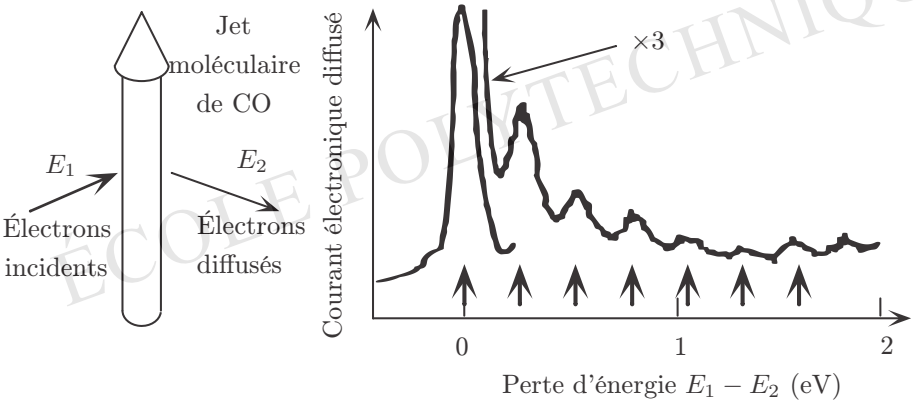

Fig. 1.1: Spectre en énergie des électrons diffusés par un faisceau de molécules de CO à une énergie incidente de $E_1 = 2{,}05$ eV. Les pics du signal correspondent à l'excitation des modes de vibration des molécules après collision avec un électron. L'ordonnée de la courbe correspondant aux collisions inélastiques (moins probables que les collisions élastiques) a été multipliée par 3.

Les résultats[2] pour la molécule CO sont représentés sur la figure 1.1. Ils font bien ressortir l'espacement constant des niveaux vibrationnels. À l'aide de ces données, on détermine l'espacement des niveaux $\Delta E = h\nu$ de CO, et sa fréquence de vibration :

$$\Delta E \sim 0{,}26 \text{ eV} \qquad \nu \sim 6{,}5 \times 10^{13} \text{ Hz} \ .$$

[2]G.J. Schulz, Phys. Rev. **135**, 988 (1964).

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Ce type d'expérience a été fait avec toute une série de molécules diatomiques, sur la structure desquelles on obtient ainsi des renseignements précieux.

2 Interférences des ondes de matière

L'expérience fondamentale qui prouve le comportement ondulatoire des particules, prévu par Louis de Broglie en 1923, date de 1927. Elle est due à Davisson et Germer, qui mirent en évidence la diffraction d'un faisceau d'électrons par un cristal de nickel. Pour analyser les phénomènes quantiques fondamentaux que cette expérience met en relief, nous nous référerons d'abord à une expérience plus simple conceptuellement, mais plus délicate à réaliser : les interférences d'un faisceau de particules dans un dispositif de fentes d'Young. Nous exposerons l'expérience de Davisson et Germer dans la section suivante.

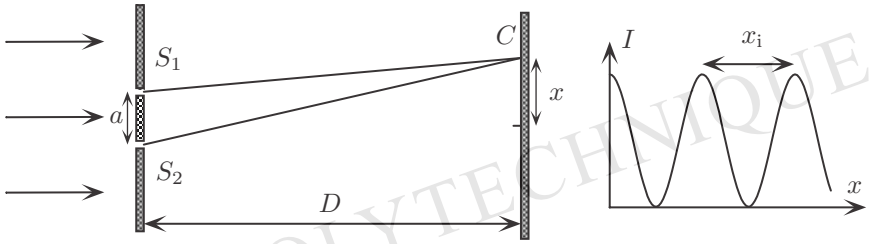

FIG. 1.2: Expérience d'interférences avec des fentes d'Young : une onde monochromatique de longueur d'onde λ arrive sous incidence normale sur une plaque percée de deux fentes linéaires distantes de a. L'éclairement $I(x)$ d'un écran à une distance $D \gg a$ fait apparaître une figure d'interférences avec un interfrange $x_\mathrm{i} = \lambda D/a$.

2.1 Interférences avec deux fentes d'Young

L'expérience d'interférences d'ondes optiques, acoustiques ou d'ondulations à la surface d'un liquide, représentée en figure 1.2, est simple à réaliser. Une onde plane monochromatique de longueur d'onde λ provenant d'une source S est envoyée perpendiculairement à un écran E dans lequel sont percées deux fentes parallèles S_1 et S_2. Ces deux fentes se comportent comme des sources secondaires, et l'intensité recueillie sur un écran à la sortie révèle les interférences des faisceaux issus de ces fentes.

L'amplitude A_c de l'onde arrivant en un point C est la somme des amplitudes A_1 et A_2 issues des deux fentes, et l'intensité I_c est :

$$I_c = |A_c|^2 = |A_1 + A_2|^2 \,. \tag{1.6}$$

Cette formule est à la base du phénomène d'interférences. L'intensité I_c est forte si les amplitudes A_1 et A_2 sont en phase, elle s'annule si elles sont en opposition de phase. Nous supposons ici que x et a sont tous deux faibles

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

devant D (x est la distance du point C au centre de l'écran (voir figure 1.2), et D est la distance entre le plan des fentes et le plan d'observation). Dans cette approximation, la différence de longueur entre les trajets S_1C et S_2C est $\delta \simeq xa/D$. Cette différence se traduit par un déphasage ϕ entre les amplitudes A_1 et A_2 : $\phi = 2\pi\delta/\lambda = 2\pi xa/(\lambda D)$. Par conséquent, l'interfrange x_i, défini comme la distance entre deux franges consécutives sur l'écran, est $x_\mathrm{i} = \lambda D/a$.

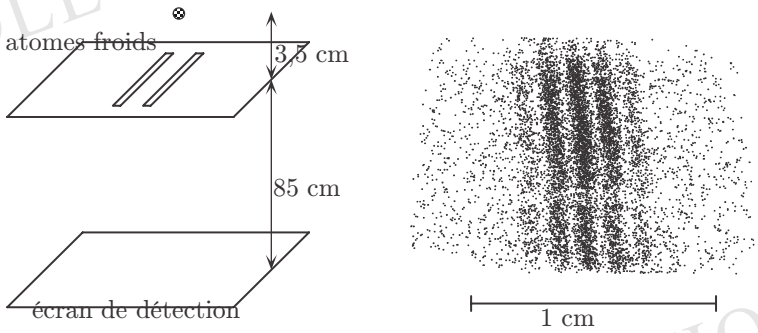

Fig. 1.3: À gauche : expérience de fentes d'Young réalisée avec des atomes de néon, préalablement refroidis par laser au milliKelvin. À droite : distribution observée expérimentalement ; chaque point de la figure correspond à l'impact d'un atome sur la plaque détectrice. Les franges d'interférences sont clairement visibles.

2.2 Les interférences d'atomes dans un dispositif à deux fentes

Le principe et le résultat d'une expérience d'interférences effectuée avec des atomes[3] dans un dispositif de fentes d'Young est représenté sur la figure 1.3. Un nuage de quelques millions d'atomes de néon est d'abord capturé et refroidi au milliKelvin dans un piège laser. Il est ensuite lâché, sans vitesse initiale, à 3,5 cm au-dessus d'un écran percé de deux fentes parallèles, de largeur 2 microns et séparées par 6 microns. Les atomes sont détectés lorsqu'ils frappent une plaque située 85 cm sous le plan des deux fentes. La plaque détectrice enregistre l'impact de chaque atome, un impact étant représenté par un point sur la figure 1.3.

On observe que ces impacts se distribuent suivant un système de franges parfaitement semblable à celui obtenu dans des interférences lumineuses ou acoustiques. Il y a des zones sombres (beaucoup d'impacts ; flux d'atomes intense) parallèles à la direction des fentes, qui alternent avec des zones claires (peu ou pas d'impacts ; flux d'atomes faible).

L'expérience peut être recommencée avec d'autres particules : électrons, neutrons, molécules. Dans tous les cas, la distribution des impacts sur l'écran révèle une figure d'interférences. L'interfrange mesuré est $x_\mathrm{i} = \lambda D/a$, où la

[3] F. Shimizu, K. Shimizu, H. Takuma, Phys. Rev. A **46**, R17 (1992) et communication privée.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

longueur λ et l'impulsion $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ des particules de vitesse $\boldsymbol{v}$, sont reliées par la relation de de Broglie :

$$p = h/\lambda \ . \tag{1.7}$$

Le calcul précis des franges d'interférences dans l'expérience montrée en figure 1.3 doit prendre en compte la variation de la longueur d'onde de de Broglie $\lambda = h/p$ au fur et à mesure de l'accélération des atomes par le champ de pesanteur. La vitesse des atomes au niveau des fentes est de 0,8 $\mathrm{m\,s^{-1}}$; au niveau de la plaque détectrice, elle est de 4 $\mathrm{m\,s^{-1}}$.

2.3 Aspect probabiliste des interférences quantiques

Le contenu physique des expériences d'interférence de particules, atomes ou électrons, est beaucoup plus riche qu'un phénomène ondulatoire habituel. En lui-même, le résultat est extraordinaire parce que les atomes sont des *corpuscules ponctuels* dans cette expérience. Leur dimension est de l'ordre d'une fraction de nanomètre, donc très inférieure à toutes les échelles de longueur du problème considéré, distance des fentes a ou interfrange x_i. À l'inverse, une onde *emplit tout l'espace* ! Une onde électromagnétique, par exemple, est constituée par l'ensemble des valeurs des champs en tous les points de l'espace.

Afin de progresser, analysons ce qui se passe si l'on envoie les atomes un par un sur le dispositif, en les préparant de la même façon, ce qui est tout à fait concevable en pratique. Les résultats importants sont les suivants.

1. Chaque atome est détecté en un *point bien précis* de l'écran. Ceci confirme que les atomes (ou les électrons) sont assimilables à des particules ponctuelles dont la position peut être déterminée avec une précision bien meilleure que les distances typiques du problème, comme la distance des fentes ou l'interfrange.
2. Comme nous le fait pressentir le résultat expérimental, le point d'impact est *aléatoire*. Deux atomes, préparés dans ce qui nous paraît être les mêmes conditions initiales, auront des impacts différents.
3. Si la plaque est percée d'une seule fente, S_1 ou S_2, on observe une distribution d'impacts I_1 ou I_2 centrée à l'aplomb de S_1 ou S_2. Cette distribution ne présente pas de structure à l'échelle de l'interfrange x_i, comme on peut le voir sur la figure 1.4a.
4. Si la plaque est percée des deux fentes S_1 et S_2, la distribution d'un grand nombre d'impacts révèle des franges d'interférences comme le montrent les figures 1.3 ou 1.4b.

Les observations 1, 2 et 3 montrent que nous sommes en présence d'un phénomène de nature fondamentalement *probabiliste*. Deux expériences faites dans ce que nous pensons être les mêmes conditions initiales, mènent à des résultats différents. S'il n'y avait pas l'observation 4, nous pourrions expliquer le phénomène en termes classiques. Nous manipulons quotidiennement des phénomènes aléatoires (pile ou face, distribution de cartes, etc.) qu'en toute

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

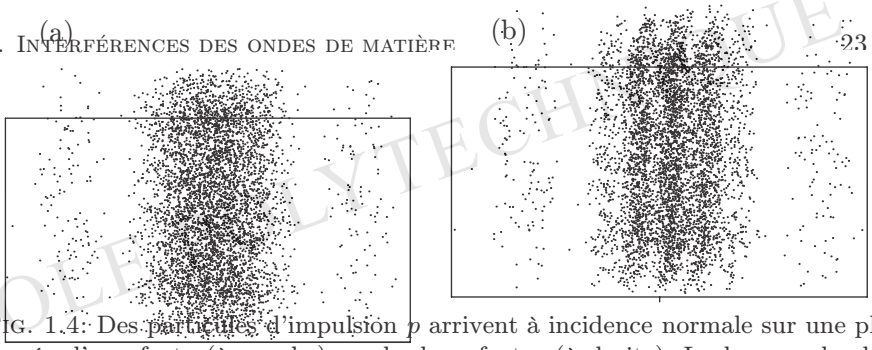

Fig. 1.4: Des particules d'impulsion p arrivent à incidence normale sur une plaque percée d'une fente (à gauche) ou de deux fentes (à droite). La largeur de chaque fente est $b = 10\,\lambda$ et la séparation entre les centres des fentes pour la figure de droite est $a = 30\,\lambda$ (avec $\lambda = h/p$). Chaque figure montre une distribution typique des impacts sur un écran situé à une distance $D = 10^4\,\lambda$ derrière la plaque. La longueur de chaque fenêtre de détection est $4200\,\lambda$. Ces distributions sont des simulations par ordinateur.

rigueur on pourrait traiter de façon déterministe si l'on faisait l'effort d'acquérir suffisamment d'information. Nous cachons la difficulté de manier cette information derrière une description probabiliste, infiniment plus commode, mais nullement nécessaire en principe.

Malheureusement, l'observation 4 rend impossible le principe d'une telle description. En effet, nous serions alors face au problème logique suivant.

- On envoie les atomes un par un, il s'agit de phénomènes aléatoires *indépendants*.
- Chaque atome est passé forcément par l'une des fentes.
- On peut *mesurer* par quelle fente chaque atome est passé (avec des compteurs, ou en éclairant les fentes S_1 et S_2, etc.).
- Faisant cette mesure, on peut séparer les atomes en deux lots : ceux qui sont passés par S_1, ceux qui sont passés par S_2.
- Pour les atomes passés par S_1, tout se passe comme si S_2 était bouché. Leur distribution est celle de la figure 1.4a, et de même pour S_2.

En termes de probabilités usuelles, si l'on rassemble les deux lots, le résultat obtenu en ouvrant les deux fentes devrait être la somme $I_1 + I_2$ de ces deux distributions. Or il n'en est rien comme on le constate sur les figures 1.3 et 1.4b. Bien au contraire, ouvrir une seconde fente, c'est-à-dire ménager une possibilité supplémentaire, a *empêché* l'atome d'arriver en des endroits qu'il peut atteindre lorsque une seule fente est ouverte !

Bien entendu, il existe une explication cohérente à tout cela. Le fait central est que pour mesurer par quelle fente sont passés les atomes, on doit faire une expérience différente de celle de la figure 1.3. Dans cette nouvelle expérience, on observe effectivement la distribution de la figure 1.4a, donc pas d'interférences. Si, en revanche, l'on observe les interférences (figure 1.4b), il n'est pas

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

possible de déterminer physiquement par quelle fente est passé chaque atome. Autrement dit, il n'est pas possible *simultanément* d'observer les interférences *et* de savoir par quelle fente chaque atome est passé.

De cela nous tirons deux conclusions fondamentales :

1. Si l'on ne mesure pas par quelle fente passent les atomes, on peut observer des franges d'interférences. Mais si l'on effectue cette mesure, les interférences disparaissent. En physique quantique, une mesure perturbe en général le système.

2. Les atomes n'ont pas de trajectoire au sens classique : observant l'impact d'un atome dans une expérience d'interférences, nous ne pouvons pas dire par où il est passé à chaque instant antérieur. La proposition paradoxale « il est passé par les deux fentes à la fois » est non seulement parfaitement admissible, mais conforme à la réalité comme nous le verrons. En physique quantique, la notion de trajectoire, un des fondements de la mécanique newtonienne, ne résiste pas à l'analyse expérimentale.

Bien entendu, ce phénomène serait bien compliqué à expliquer si nous n'avions pas la chance qu'il ressemble autant à l'interférence et à la diffraction des ondes électromagnétiques, avec une formule simple $\lambda = h/p$. Nous avons affaire à un phénomène à la fois ondulatoire et probabiliste, et nous allons profiter des techniques de la physique ondulatoire pour en construire la théorie.

De façon semblable au traitement classique des phénomènes d'interférences, nous allons introduire des *amplitudes de probabilité* $A_1(x)$ et $A_2(x)$ pour qu'un atome issu de chaque fente, l'autre étant bouchée, atteigne le point x du détecteur. Nous supposerons que l'amplitude de probabilité $A(x)$ que l'atome atteigne ce point, les *deux* fentes étant ouvertes, est la somme $A(x) = A_1(x) + A_2(x)$, et que la probabilité pour que l'atome atteigne ce point est, comme en (1.6), le module carré de cette somme :

$$P(x) = |A(x)|^2 = |A_1(x) + A_2(x)|^2 \,.$$

Nous verrons au chapitre suivant comment ces idées se mettent sous forme quantitative.

3 L'expérience de Davisson et Germer

3.1 Diffraction des rayons X par un cristal

On irradie un cristal avec un faisceau (quasi-) monochromatique de rayons X, c'est-à-dire une onde électromagnétique de longueur d'onde λ entre 0,01 nm et 1 nm. Plaçant au-delà du cristal une plaque photographique, on observe, en plus d'une tache centrale correspondant à des rayons X non déviés après traversée du cristal, des taches séparées, intersections de la plaque par des *faisceaux diffractés*.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

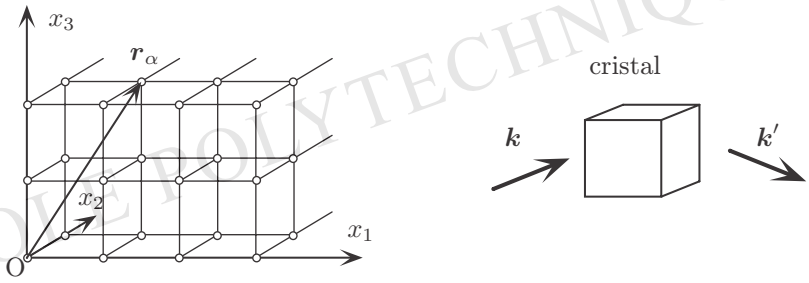

Fig. 1.5: Diffraction de rayons X par un cristal.

L'interprétation de cette expérience, faite pour la première fois par Max von Laue en 1912, est tout à fait semblable à celle des interférences. Considérons un cristal, que nous supposons monoatomique, dont la maille élémentaire comprend un atome et est définie par les trois vecteurs $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ et $\boldsymbol{a}_3$. Supposons le cristal parallélépipédique et composé de N_i mailles élémentaires dans la direction x_i $(i = 1, 2, 3)$. Prenons l'origine de telle façon que la position $\boldsymbol{r}_\alpha$ d'un atome quelconque du cristal soit :

$$\boldsymbol{r}_\alpha = n_1\,\boldsymbol{a}_1 + n_2\,\boldsymbol{a}_2 + n_3\,\boldsymbol{a}_3 \qquad \text{avec} \qquad n_i = 0, 1, \ldots, N_i - 1\ . \tag{1.8}$$

Nous supposons que l'onde incidente est une onde plane de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ et d'amplitude $\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)}$. Nous supposons également que, lorsqu'elle atteint un atome α, l'onde est diffusée élastiquement (c'est-à-dire sans modification du module de $\boldsymbol{k}$).

Nous souhaitons calculer l'amplitude diffusée par tous les atomes du cristal dans une direction définie par le vecteur $\boldsymbol{k}'$ tel que $|\boldsymbol{k}'| = |\boldsymbol{k}|$. L'amplitude de l'onde sphérique diffusée en $\boldsymbol{r}$ par le centre α a pour forme générale :

$$\psi_\alpha(\boldsymbol{r}, t) = F(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')\ \psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r} - \omega t + \varphi_\alpha)}\ .$$

Le facteur $F(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')$ est l'amplitude de diffusion élémentaire, la même pour tous les atomes. Le facteur de phase $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_\alpha}$, avec :

$$\varphi_\alpha = \Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_\alpha \qquad\qquad \Delta\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'\ ,$$

provient de la différence de marche entre l'onde diffusée par α et celle diffusée par l'atome situé à l'origine. Si nous négligeons la diffusion multiple pour simplifier, l'amplitude totale ψ de l'onde diffusée par le cristal dans la direction $\boldsymbol{k}'$ est la somme de ces amplitudes, $\psi = \sum_\alpha \psi_\alpha$, qui est proportionnelle à :

$$G(\Delta\boldsymbol{k}) = \sum_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_\alpha}\ . \tag{1.9}$$

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Introduisons un nouveau système d'axes, appelé réseau *réciproque*, défini par les vecteurs $\boldsymbol{a}_1^*, \boldsymbol{a}_2^*, \boldsymbol{a}_3^*$ tels que $\boldsymbol{a}_i^* \cdot \boldsymbol{a}_j = \delta_{ij}$. Soient Δk_i les coordonnées de $\Delta\boldsymbol{k}$ dans ce système. Il vient :

$$G(\Delta\boldsymbol{k}) = \sum_{n_1,n_2,n_3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n_1\Delta k_1 + n_2\Delta k_2 + n_3\Delta k_3)} = G_1(\Delta k_1)\, G_2(\Delta k_2)\, G_3(\Delta k_3) \tag{1.10}$$

avec :

$$G_j(\Delta k_j) = \sum_{n_j=0}^{N_j-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}n_j\Delta k_j} = \frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}N_j\Delta k_j}}{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta k_j}}\,. \tag{1.11}$$

Chaque point de la plaque photographique correspond à une direction $\boldsymbol{k}'$. L'intensité du signal reçu en ce point est proportionnel à l'énergie véhiculée par l'onde, donc au module carré de l'amplitude :

$$I(\boldsymbol{k}') = |F(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')|^2\, |G_1|^2\, |G_2|^2\, |G_3|^2 \qquad \text{avec} \quad |G_i|^2 = \frac{\sin^2(N_i\,\Delta k_i/2)}{\sin^2(\Delta k_i/2)}\,.$$

La présence de taches de diffraction provient de ce que la variation de $|G_i|^2$ en fonction de Δk_i est rapide. Pour des directions émergentes telles que $\Delta k_i = 2n\pi$ (n entier), cette fonction vaut N_i^2, et elle ne prend de valeurs non négligeables que sur des intervalles de largeur $2\pi/N_i$ autour de ces valeurs. Ces directions définissent une série de faisceaux diffractés. La largeur des taches est inversement proportionnelle à la taille du cristal.

Remarques

1. Le calcul précédent devrait être complété : les Δk_i sont contraints par la relation $|\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{k}'|$, soit $\Delta\boldsymbol{k}\cdot(\Delta\boldsymbol{k} - 2\boldsymbol{k}) = 0$. Des conditions d'orientation du cristal par rapport à $\boldsymbol{k}$ doivent être remplies pour mettre tous les termes en phase et qu'il y ait d'autres solutions à cette équation que $\Delta\boldsymbol{k} = 0$.

2. Ce calcul montre que la mesure des taches de diffraction permet de connaître le réseau réciproque ($\boldsymbol{a}_i^*$), donc le réseau cristallin ($\boldsymbol{a}_i$).

3. Plus généralement, si l'on étudie la diffusion des rayons X par un échantillon de matière condensée solide ou liquide, cristallisée ou non, de densité électronique $\rho(\boldsymbol{r})$, la somme discrète de l'équation (1.10) devient $\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}\,\rho(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3r$. L'amplitude diffusée dans la direction $\boldsymbol{k}'$ est proportionnelle à la transformée de Fourier de la densité électronique dans l'échantillon. Cette propriété est à la base de toutes les études de cristallographie des solides cristallins, des liquides, des verres et des matériaux organiques ou biologiques.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

3.2 Diffraction des électrons

En 1927, grâce à Davisson et Germer, on obtient la preuve expérimentale que les électrons qui sont notoirement des particules (constitutifs de la matière, ils ont une masse et une charge électrique bien définies) présentent le comportement ondulatoire prévu théoriquement par Louis de Broglie en 1923. 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 une plaque fluorescente. On observe ici encore 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 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 $\lambda_{\mathrm{e}} = h/p$ est égale à λ_{X}. Ce fait provient du terme d'interférence $\sum_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_\alpha}$ qui est le même dans les deux cas. Néanmoins, le processus élémentaire de diffusion est différent s'agissant de la diffusion de photons X ou d'électrons par des atomes.

> Davisson, ingénieur, ancien élève de Millikan, étudiait en 1919 l'émission d'électrons secondaires dans les tubes électroniques, en vue d'améliorer les performances de ces derniers pour la mise en place du système téléphonique transcontinental américain. S'apercevant qu'une fraction de ces électrons secondaires étaient diffusés *élastiquement* par les atomes des électrodes, il tenta à partir de 1921 d'utiliser ces électrons pour sonder la structure interne de l'atome. Bien qu'ayant mis au point un appareillage extraordinairement perfectionné pour l'époque, il n'enregistra que des échecs jusqu'en 1926 où, fortuitement, lors d'un séjour en Angleterre, il apprit les développements de la théorie quantique et l'hypothèse de de Broglie. Il ne lui fallut alors que quelques semaines pour mettre en évidence le phénomène de diffraction. Il opérait avec des électrons diffusés vers l'arrière sur un cristal de nickel, à une énergie de 60 à 80 eV. Il publia ses résultats un mois avant G.P. Thomson qui opérait en transmission au travers de feuilles minces de mica à plus haute énergie (10^4 à 10^5 eV) (diffraction de Debye - Scherrer).

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 figure 1.6 montre le principe de l'obtention de la diffraction d'électrons par une mince plaque d'un solide. Le faisceau parallèle d'électrons traverse la plaque M, puis une lentille électronique de distance focale f_1. On mesure l'intensité diffractée dans une direction $\boldsymbol{k}$ en mesurant l'intensité des électrons dans le plan focal S_1 de la lentille. On peut également obtenir une image de l'objet diffringent en plaçant une seconde lentille, de distance focale f_2 (avec $f_2 \gg f_1$) dans le plan S_1. Le détecteur d'électrons est placé dans le plan image

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

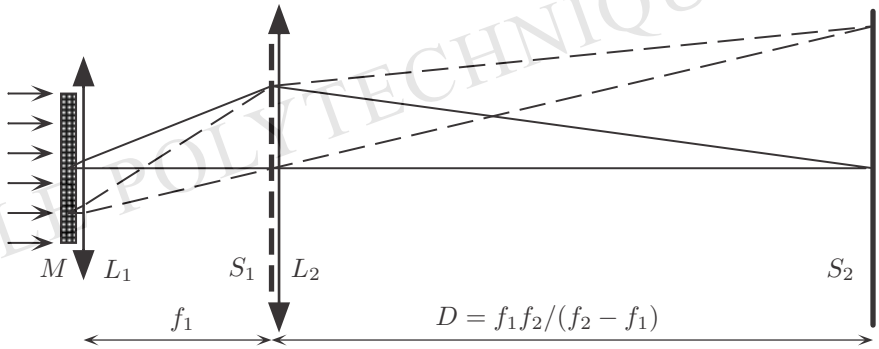

FIG. 1.6: Dispositif optique typique donnant (a) la figure de diffraction d'un échantillon de matière M dans le plan focal S_1, ou (b) une image agrandie de l'échantillon dans le plan image S_2. Les lentilles convergentes L_1 et L_2 ont des distances focales f_1 et f_2, et le faisceau incident d'électrons est parallèle.

de M, et ce dispositif constitue un microscope de grandissement $f_2/(f_2 - f_1)$.

Des résultats obtenus par cette méthode sont montrés sur la figure 1.7. Le matériau est un alliage Al Mn Si obtenu après une solidification rapide. La figure 1.7a montre que la structure de l'alliage est très inhomogène lorsqu'on l'observe au microscope électronique avec un faible grandissement. Les « pétales » sombres, dont la taille est de quelques microns, correspondent à des régions où se produit une diffraction intense car les plans cristallins sont bien orientés par rapport au faisceau incident. La figure 1.7b est l'image d'un pétale sombre avec un fort grossissement. On remarque que le réseau atomique n'est pas périodique, mais quasi-périodique, avec une cellule élémentaire pentagonale. La figure 1.7c montre l'image de diffraction obtenue dans le plan focal de la première lentille de la figure 1.6. La symétrie d'ordre 5 apparaît de façon spectaculaire. Ces images[4] constituent la première observation expérimentale des quasi-cristaux, et ont soulevé un grand intérêt dans la physique de la matière condensée. Ces observations démontrent qu'un solide peut avoir un ordre différent de l'ordre cristallin habituel, sans qu'un motif élémentaire se répète de façon périodique[5]. La diffraction des électrons était, à l'époque de cette découverte, le seul moyen d'étude cristallographique d'échantillons aussi petits, les rayons X donnant un signal de diffraction trop faible dans ce cas. On sait maintenant fabriquer des quasi-cristaux dans lesquels l'ordre quasi-périodique s'étend sur plusieurs centimètres, ce qui permet d'utiliser des rayons X.

[4] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, and J.W. Cahn, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984). Nous remercions D. Gratias pour ses commentaires.

[5] Une autre façon de voir les choses consiste à remarquer que, de même qu'on ne peut pas paver le plan avec des pentagones réguliers, de même on ne peut pas paver l'espace avec des icosaèdres.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

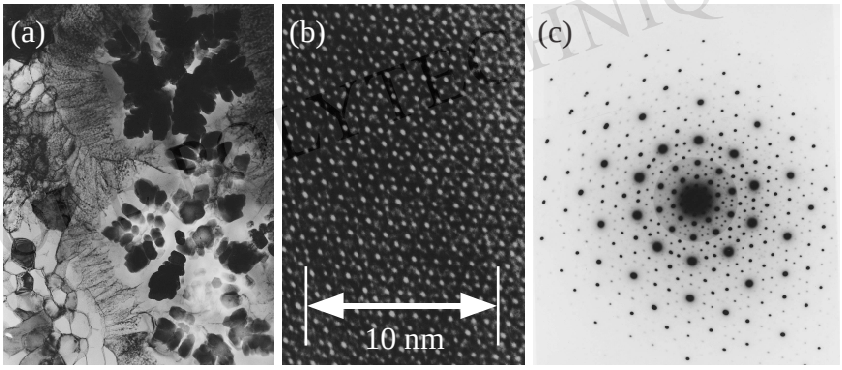

Fig. 1.7: Observation des premiers quasi-cristaux. (a) Structure à grande échelle d'un alliage Al Mn Si, observé au microscope électronique. Les régions sombres correspondent à des cristaux dont l'orientation par rapport au faisceau incident d'électrons produit une diffraction importante. (b) Image agrandie d'une région sombre, qui révèle la symétrie d'ordre 5 du matériau (en cherchant des pentagones, on peut voir qu'ils se répliquent avec un facteur d'échelle égal au nombre d'or $\sim$1,618). (c) Diffraction d'électrons de 200 keV, la symétrie d'ordre 5 est clairement apparente.

Des expériences de diffraction d'autres particules matérielles comme des neutrons sont couramment effectuées. La longueur d'onde associée à des électrons d'énergie $E = 100$ eV est de 0,124 nm, qui est l'ordre de grandeur de la distance entre atomes dans les cristaux. La masse du neutron étant environ 2000 m_e, des figures de diffraction semblables sont obtenues avec des neutrons d'énergie 0,05 eV. De tels neutrons sont produits en grande abondance (flux de l'ordre de $10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}\,\mathrm{s}^{-1}$) dans les réacteurs nucléaires. Un réacteur à haut flux spécialement conçu pour permettre des études de diffraction avec un large spectre d'énergies – donc de longueurs d'onde – a été construit par l'Allemagne et la France à Grenoble (Institut Von Laue - Langevin). Les neutrons, électriquement neutres, n'interagissent qu'avec les noyaux et sont très pénétrants, contrairement aux électrons. Ils constituent des sondes très propres de la structure de la matière, et fournissent donc des renseignements complémentaires à ceux des électrons, ces derniers étant surtout sensibles aux cortèges électroniques.

4 Résumé de quelques idées importantes

Nous ferons couramment référence dans la suite aux phénomènes quantiques que nous venons de décrire, et nous en présenterons d'autres, comme l'expérience de Stern et Gerlach, le moment venu. Retenons quelques aspects importants qui sont en opposition directe avec les préjugés de la physique

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

classique.

1. Les phénomènes quantiques sont de nature aléatoire. On ne peut prévoir le résultat d'une expérience que sous forme statistique (grand nombre d'événements) ou probabiliste (un seul événement).
2. L'analyse des phénomènes d'interférences et de diffraction montre qu'en mécanique quantique, on ne peut se contenter de travailler avec des lois de probabilité, comme dans les phénomènes aléatoires usuels. Il faut introduire des *amplitudes de probabilité* dont le module carré donne la probabilité recherchée.
3. Les particules ont un comportement ondulatoire à l'échelle microscopique.
4. Certaines grandeurs physiques, qui classiquement peuvent prendre un ensemble continu de valeurs, n'adoptent en mécanique quantique que des valeurs discrètes. C'est par exemple le cas pour l'énergie interne des atomes et des molécules.
5. En général, le fait de mesurer une grandeur physique affecte le système considéré.

Pour en savoir plus

- Pour ce qui concerne l'historique de l'élaboration de la physique quantique, on pourra se référer à M. Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1966), à B.L. Van Der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1967), et à J. Mehra et H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, Springer-Verlag, Berlin (1982).
- La démarche de Louis de Broglie est décrite par A. Abragam : *Le centenaire de Louis de Broglie*, La Recherche, juillet-août 1992.
- L'histoire étonnante de la démarche de Davisson est relatée par R.K. Gehrenbeck dans Physics Today **31**, p. 34 (janvier 1978).
- La description d'expériences d'interférences avec des particules matérielles se trouve dans les articles suivants :
  - Pour des électrons : G. Matteuci *et al.*, Amer. Jour. Phys. **46**, 619 (1978).
  - Pour des neutrons : Neutron Scattering, Physics Today **38**, 25 (1985).
  - Pour des molécules Na_2 : M. S. Chapman *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 4783 (1995) ;
  - Pour des fullérènes, molécules C_{60} : M. Arndt *et al.*, Nature **401**, 680 (1999).
  - Le comportement ondulatoire permet de réaliser des dispositifs optiques pour des faisceaux atomiques. Voir O. Carnal et J. Mlynek, *L'optique atomique*, La Recherche, octobre 1992.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Exercices

1. Effet photoélectrique sur les métaux. On envoie sur une photocathode en potassium une radiation ultraviolette (raie du mercure) $\lambda = 253{,}7$ nm ; on constate que l'énergie maximale des photoélectrons éjectés est 3,14 eV. Si on envoie une raie visible $\lambda = 589$ nm (raie jaune du sodium) ; l'énergie maximale est alors 0,36 eV.

a. Retrouver la valeur de la constante de Planck.

b. Calculer l'énergie d'extraction minimale des électrons du potassium.

c. Calculer la longueur d'onde maximale des radiations pouvant produire un effet photoélectrique sur le potassium.

2. Flux de photons.

a. Une antenne de radio émet sur la fréquence de 1 MHz avec une puissance de 1 kW. Quel est le nombre de photons émis par seconde ?

b. Une étoile de première grandeur émet un flux lumineux sur la terre de $1{,}6 \times 10^{-10}$ W m^{-2} à une longueur d'onde moyenne de 556 nm. Combien de photons traversent la pupille de l'œil par seconde ?

3. Ordres de grandeur de longueurs d'onde de de Broglie. Quelle est la longueur d'onde de de Broglie (a) d'un électron de 100 eV, (b) d'un neutron thermique ? Comparer avec les dimensions atomiques.

4. Longueurs d'onde de de Broglie dans le domaine relativiste. En physique des hautes énergies, on a construit des accélérateurs d'électrons d'énergie supérieure à 100 GeV. Quelle est la longueur d'onde de de Broglie de ces électrons ? Pourquoi de si hautes énergies sont-elles nécessaires ? On rappelle la relation relativiste entre énergie et impulsion $E = \left(p^2c^2 + m^2c^4\right)^{1/2}$.

ÉCOLE POLYTECHNIQUE