Université Joseph Fourier. Master 1 Physique
TD de mécanique quantique

TD n^{o}1
Une particule à une dimension

---

1 Particule libre (ex. de cours)

Références : [1] chap.1, complément H_I.

On considère une particule de masse m, se déplaçant **librement** à une dimension x et qui rebondit parfaitement sur deux murs situés en $x = 0$ et $x = L$. Le potentiel est donc $V(x) = 0$ pour $0 < x < L$, et $V(x) = +\infty$ ailleurs imposant $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Trouver les fonctions d'ondes stationnaires ψ_n et les niveaux d'énergie E_n.

2 La paquet d'onde Gaussien (ex. de cours)

Références : [1] chap.1, complément G_I.

Supposons qu'une particule se déplaçant selon l'axe x soit décrite à la date $t = 0$ par la fonction d'onde

$$\psi(x) = C \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{1}$$

appelé **paquet d'onde Gaussien,** avec $x_0, p_0 \in \mathbb{R}$, $\sigma > 0$ et $C > 0$. En notation de Dirac, on écrit $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ où $|\psi\rangle \in L^2(\mathbb{R})$ est l'état quantique.

1. Trouver C de façon à ce que $|\psi\rangle$ soit normalisé, c'est à dire : $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1$. Tracer et donner l'interprétation physique de $P(x) = |\psi(x)|^2$?
   Aide : voici la formule de **l'intégrale Gaussienne** :
   $$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\left(Ax^2 + Bx + C\right)\right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \exp\left(-C + \frac{B^2}{4A}\right), \qquad A, B, C \in \mathbb{C},$$
   et avec $\Re(A) > 0$, pour que l'intégrale soit convergente.
2. On note $|p\rangle$ l'état décrivant **une onde plane,** et défini par
   $$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{px}{\hbar}\right)$$
   Calculer $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$. Tracer et interpréter $\tilde{P}(p) = \left|\tilde{\psi}(p)\right|^2$.
3. Que devient l'état $|\psi\rangle$ dans la limite $\sigma \to \infty$, puis dans la limite $\sigma \to 0$?

4. On définit la position moyenne de la particule par $\langle x\rangle = \int xP(x)\,dx = \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle$, avec $P(x) = |\psi(x)|^2$. On définit l'incertitude en position Δx par
$$(\Delta x)^2 := \left\langle (x - \langle x\rangle)^2 \right\rangle$$
Montrer la formule utile : $(\Delta x)^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x\rangle^2$.
5. Dans le cas du paquet d'onde Gaussien, calculer $\langle x\rangle, \Delta x, \langle p\rangle, \Delta p$ et le produit $\Delta x \Delta p$.

3 Dispersion d'une onde. Discussion qualitative.

1. Sachant que $p = mv$, écrire le principe d'incertitude pour $\Delta x \Delta v$. L'interpréter en montrant que une onde quantique libre (non soumise à des forces) ne peut rester localiser au cours du temps (cad que Δx ne peut pas rester petit).
2. Application numérique : avec $h = 2\pi\hbar = 6.6\,10^{-34} J.s.$ Montrer que pour un électron libre (de masse $m = 9\,10^{-31}$kg), l'onde dépasse forcément une taille macroscopique ($\simeq 1cm$) après quelques secondes. Au contraire pour une poussière de masse $m \geq 10^{-15}$kg, montrer que l'on peut ne pas avoir d'effet ondulatoires à une taille macroscopique en des temps raisonnables.
3. Considérons une onde quantique soumise à des forces lui imposant une dynamique chaotique, une "sensibilité aux conditions initiales" telles que la dispersion croit exponentiellement comme $\Delta x(t) \simeq \Delta x(0)\,e^{t/\tau}$, $\Delta v(t) \simeq \Delta v(0)\,e^{t/\tau}$ avec un temps caractéristique τ (par exemple une boule de loto, $\tau \simeq 1s.$). Montrer que $\Delta x(t)$ atteint une taille macroscopique après un temps très court, appelé **temps d'Erhenfest** T_E. Donner une expression analytique (qualitative) et numérique de T_E si $\tau \simeq 1$s et $m = 10^{-2}$kg.

4 Évolution d'un paquet d'onde libre

1. A la date $t = 0$, la particule libre est décrite par un paquet d'onde $\psi(x)$ dont on ne précisera pas l'expression. On suppose seulement que sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p)$ est concentrée en $p \simeq p_0$. Le paquet d'onde évolue librement sur tout l'axe x. On note $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ le Hamiltonien du système. Déterminer l'expression de $\widetilde{\psi}(p,t)$ à la date t à partir de $\widetilde{\psi}(p,0)$.
2. Faire l'approximation, à l'ordre 1 en p, de H au point p_0 :
$$H(p) \simeq H(p_0) + (p - p_0)\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{p=p_0}$$
pour en déduire l'expression de $\psi(x,t)$ à la date t à partir de $\psi(x, t = 0)$. Allure de $|\psi(x,t)|$?
3. (**Optionnel)** Même question que précédemment en poussant le développement jusqu'à l'ordre 2 en p, et en considérant cette fois ci le cas particulier d'un paquet d'onde Gaussien (1). On aura une intégrale Gaussienne à calculer.

Références

[1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Mécanique quantique.*