Université Joseph Fourier. Master 1 Physique
TD de mécanique quantique, Frédéric Faure.

TD n^{o}1 Solution

Niveaux d'énergie d'une particule à une dimension

1 Particule libre

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

"Particule libre" signifie soumise à aucune force. Donc $F(x) = 0$. Or $F = -dV/dx$, donc $V(x) =$ constante. On choisit $V(x) = 0$. Aux bords, $V(0) = V(L) \to +\infty$.

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire $\hat{H}\psi = E\psi$, avec $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ et $\hat{p} = -i\hbar d/dx$. Soit

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi : \qquad \text{pour } 0 < x < L \tag{1}$$

avec les conditions aux bords $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Les solutions sont (équation différentielle à coefficients constants)

$$\psi_n(x) = C_n \sin\left(\pi n \frac{x}{L}\right), \qquad n = 1, 2, 3 \ldots$$

avec une constante C_n donnée par la condition de normalisation :

$$\begin{aligned} 1 = \|\psi\| \Leftrightarrow 1 &= C_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\pi n \frac{x}{L}\right) dx \\ &= C_n^2 \int_0^L \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(2\pi n \frac{x}{L}\right)\right) dx = C_n^2 \frac{L}{2} \end{aligned}$$

donnant $C_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$. On déduit l'énergie par (1) :

$$\hat{H}\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 \psi_n = E_n \psi_n$$

donc

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2.$$

2 La paquet d'onde Gaussien

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

1. Utilisant $\hat{I}d = \int |x\rangle\langle x| dx$, on a

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \int \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx = \int |\psi(x)|^2 dx \\ &= C^2 \int \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right) dx = C^2 \int \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right) dx = C^2\sigma\sqrt{\pi}\end{aligned}$$

La condition $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1$ donne donc $C = 1/\left(\pi\sigma^2\right)^{1/4}$.

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = C^2 \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}\right)$$

est une Gaussienne centrée en x_0 de largeur σ. $P(x)\,dx$ s'interprète comme la probabilité de détecter la particule (lors d'une mesure) dans l'intervalle de position $[x, x+dx]$. $P(x)$ est donc une densité de probabilité.

2. On calcule

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(p) &= \langle p|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right) C \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) dx\end{aligned}$$

C'est une intégrale Gaussienne. On obtient

$$\tilde{\psi}(p) = C\frac{\sigma}{\sqrt{\hbar}} \exp\left(i\frac{p_0 x_0}{\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{p x_0}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{2(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

Alors

$$\tilde{P}(p) = \left|\tilde{\psi}(p)\right|^2 = \frac{C^2\sigma^2}{\hbar} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{(\hbar/\sigma)^2}\right)$$

est une Gaussienne centrée en p_0, de largeur $\hbar/\sigma$. $\tilde{P}(p)\,dp$ s'interprète comme la probabilité de détecter une impulsion dans l'intervalle $[p, p+dp]$ lors d'une mesure de l'impulsion.

3. Dans la limite $\sigma \to \infty$, $\frac{1}{C\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(x)$ tends vers l'onde plane $\langle x|p_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ip_0 x/\hbar)$, notée $|p_0\rangle$ et qui est un état propre d'impulsion. Dans la limite $\sigma \to 0$, $\frac{1}{C\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-ip_0 x_0/\hbar}\psi(x)$, tend vers la distribution de Dirac $\langle x|x_0\rangle = \delta(x-x_0)$ notée $|x_0\rangle$, et qui est un état propre de position.

4. On a

$$\langle x\rangle = \int x P(x)\,dx = \int x\langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx = \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle$$

et (utilisant l'expression de $\langle . \rangle$ comme une intégrale donc linéaire)

$$(\Delta x)^2 = \left\langle (x - \langle x\rangle)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 + \langle x\rangle^2 - 2x\langle x\rangle \right\rangle = \left\langle x^2\right\rangle + \langle x\rangle^2 - 2\langle x\rangle\langle x\rangle = \left\langle x^2\right\rangle - \langle x\rangle^2$$

5. Dans le cas du paquet d'onde Gaussien, on calcule par parties, et utilisant la formule de l'intégrale Gaussienne,
$$\langle x\rangle = x_0, \quad \langle p\rangle = p_0$$
puis $\left\langle x^2\right\rangle = \frac{\sigma^2}{2} + x_0^2$, donc $\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$, $\Delta p = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hbar/\sigma\right)$, et $\Delta x\Delta p = \hbar/2$.

3 Dispersion d'une onde. Discussion qualitative.

1. Le principe d'incertitude $\Delta x\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ implique
$$\Delta x\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m}$$
où Δx est la largeur de l'onde, et Δv sa dispersion en vitesse. Si à $t = 0$, l'onde est localisé cad Δx petit alors Δv est grand donc l'onde se disperse et ne reste pas localisée. (Au contraire, peu de dispertion, cad Δv petit implique Δx grand). Donc l'onde ne peut pas rester localisée.
2. Pour un électron, $(\hbar/m) = 10\,cm^2/s$ donc si à $t = 0$, $\Delta x \leq 1cm$, alors $\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \geq 0.5\,cm/s$ donc Δx dépasse $1cm$ après $t = 2s$.
Au contraire pour une poussière, $(\hbar/m) \geq 10^{-18}\,m^2/s$, on peut voir $\Delta x \simeq 10^{-9}m$ et $\Delta v \simeq 10^{-9}m/s$ tous deux très petits.
3. Pour une boule de loto, $m \simeq 10^{-3}$kg,
$$\Delta x\,(0)\,\Delta v\,(0) \geq \frac{\hbar}{2m} \sim 10^{-32}m^2/s$$
Au minimum $\Delta x\,(0) \simeq 10^{-16}m, \Delta v\,(0) \simeq 10^{-16}m/s$ mais après $t \geq 16s$. on a $\Delta x\,(t) \geq 1m$. Pour avoir une expression, on écrit :
$$\Delta x\,(T_E) = e^{T_E/\tau}\Delta x\,(0) = 1m, \qquad \Delta v\,(T_E) = e^{T_E/\tau}\Delta v\,(0) = 1m/s,$$
donc en faisant le produit, et en posant $a_0 = 1m^2/s$ (valeur macroscopique), on a
$$a_0 = \Delta x\,(T_E)\,\Delta v\,(T_E) = e^{2T_E/\tau}\frac{\hbar}{2m}$$
donc
$$T_E = \frac{\tau}{2}\log\left(\frac{a_0 2m}{\hbar}\right) = 0.5\,\log\left(10^{32}\right)\text{ s.} \simeq 37\text{s.}$$
qui est un temps assez court. Naturellement, l'interaction de la boule de loto avec son envirronement (le gaz par exemple) fait que cette étude quantique naïve n'est pas valable (phénomène de décohérence). Cependant l'ordre de grandeur obtenue sur l'incertitude de la position $\Delta x\,(T_E)$ due au effets quantiques est correcte.

4 Evolution du paquet d'onde libre

1. Le paquet d'onde évolue d'après l'équation de Schrödinger $i\hbar\frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H}\psi(t)$. En multipliant par $\langle p|$ et utilisant $\hat{H}|p\rangle = H(p)|p\rangle$ cela donne

$$i\hbar\frac{d\langle p|\psi(t)\rangle}{dt} = \langle p|\hat{H}\psi(t)\rangle = \langle\hat{H}p|\psi(t)\rangle = H(p)\langle p|\psi(t)\rangle$$
$$\Leftrightarrow i\hbar\frac{d\tilde{\psi}(p,t)}{dt} = H(p)\tilde{\psi}(p,t)$$
$$\Leftrightarrow \tilde{\psi}(p,t) = \mathrm{e}^{-i\frac{H(p)t}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,0)$$

Remarquer que avec un potentiel $V(x)$ le calcul n'aurait pas été aussi simple, et en général impossible.

2. On suppose que $\tilde{\psi}(p,t)$ est négligeable hors de $p \simeq p_0$. Alors pour $p \simeq p_0$ le développement de Taylor à l'ordre 1 donne:

$$H(p) \simeq H(p_0) + (p-p_0)\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{p=p_0} = \frac{p_0^2}{2m} + (p-p_0)\frac{p_0}{m} = E_0 + (p-p_0)v_0$$

avec $E_0 = H(p_0) = \frac{p_0^2}{2m}$ et $v_0 = \frac{p_0}{m}$. Alors

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle = \int dp\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi(t)\rangle = \int dp\, e^{i\frac{px}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,t)$$
$$= \int dp\, e^{i\frac{px}{\hbar}}\mathrm{e}^{-i\frac{H(p)t}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,0)$$
$$= \mathrm{e}^{-i\frac{E_0t}{\hbar}}\mathrm{e}^{i\frac{p_0v_0t}{\hbar}}\int dp\, e^{i\frac{p(x-v_0t)}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,0)$$
$$= \mathrm{e}^{i\frac{(p_0v_0-E_0)t}{\hbar}}\psi(x-v_0t,0)$$

et donc

$$|\psi(x,t)| = |\psi(x-v_0t,t)|$$

On a obtenu que avec cette approximation linéaire du Hamiltonien, le paquet d'onde se déplace à la vitesse v_0 sans se déformer (sans dispersion). Sa phase tourne à la fréquence

$$\omega_0 = \frac{\mathcal{L}_0}{\hbar}, \qquad \mathcal{L}_0 = p_0v_0 - E_0$$

où $\mathcal{L}_0 = p_0v_0 - H(p_0)$ est le Lagrangien, aussi appelé **action classique**.

3. à l'ordre 2 on a l'expression exacte (car $H(p)$ est quadratique):

$$H(p) = H(p_0)+(p-p_0)\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{p=p_0}+\frac{1}{2}(p-p_0)^2\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\right)_{p=p_0} = E_0+(p-p_0)v_0+\frac{(p-p_0)^2}{2m}$$

Alors de même

$$\psi(x,t) = \int dp\, e^{i\frac{px}{\hbar}}\mathrm{e}^{-i\frac{H(p)t}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,0)$$
$$= \mathrm{e}^{-i\frac{E_0t}{\hbar}}e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}C\frac{\sigma}{\sqrt{\hbar}}\int dp\,\exp\left(i\frac{(p-p_0)(x-v_0t)}{\hbar} - i\frac{(p-p_0)^2}{2m\hbar}t - i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar} - \frac{(p-p_0)^2}{2(\hbar/\sigma)^2}\right)$$
$$= \mathrm{e}^{-i\frac{E_0t}{\hbar}}e^{i\frac{p_0x}{\hbar}}C\frac{\sigma}{\sqrt{\hbar}}\int dP\,\exp\left(i\frac{P}{\hbar}(x-x_0-v_0t) - \frac{P^2}{2}\left(i\frac{t}{m\hbar}+\frac{\sigma^2}{\hbar^2}\right)\right)$$

donnant

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{C^2\sigma^2}{\left(\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/2}} \exp\left(-\frac{\sigma^2(x - x_0 - vt)^2}{\left(\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right)}\right)$$

On en déduit l'écart quadratique moyen de la variable x :

$$\Delta x(t) = \left[\frac{\sigma^2}{2} + \frac{\hbar^2 t^2}{2m^2\sigma^2}\right]^{1/2} = \left[(\Delta x_0)^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m}\,t\right)^2\right]^{1/2}$$

Il y a donc étalement du paquet d'ondes libres. Le terme $\frac{\Delta p_0}{m}\,t$ suggère l'image classique d'un ensemble de projectiles groupés initialement dans une bande Δx_0 autour de x_0, les vitesses de ces projectiles étant réparties dans une bande $\Delta v = \Delta p_0/m$ autour de la vitesse de groupe du paquet $v_0 = p_0/m$. Du fait de la dispersion en vitesse, des projectiles, se trouvant initialement au même point, se trouvent uniformément répartis dans une bande $(\Delta v)t$ au bout du temps t. A l'instant initial, les particules sont réparties uniformément dans une "boîte" de dimensions Δx et Δp et centrée en $(x_0,\, p_0)$. L'impulsion moyenne p_0 du paquet d'onde et sa dispersion en impulsion Δp_0 ne varient pas au cours du temps car l'impulsion est une constante du mouvement pour la particule libre.

Références

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