$\Delta E \Delta t = \hbar$

Mécanique quantique

$\frac{\Delta E}{\hbar} =$

TD 4: Paquets d'onde en mécanique quantique

1 Équation de propagation

On s'intéresse à la propagation libre d'ondes de matière.

1. Rappeler l'équation de Schrödinger (dynamique). En l'absence de potentiel extérieur, comparer cette équation à d'autres équations d'onde connues.

2. Rappeler la définition des termes « relation de dispersion », « célérité », « vitesse de phase », « vitesse de groupe ». Les calculer dans le cas de l'équation de Schrödinger.

3. Rappeler la définition d'un paquet d'onde. Détailler la dynamique d'un paquet d'onde général $\psi(x,t=0)$ de vecteur d'onde central k_0 au cours du temps.

2 Saturation de l'inégalité d'Heisenberg

On s'intéresse au cas d'égalité dans l'inégalité d'Heisenberg. Pour toute fonction d'onde $\psi(x)$ (normée), on définit la quantité positive

$$I(\alpha) = \int_{\mathbb{R}} \left| x\psi(x) + \alpha \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \right|^2 \mathrm{d}x \tag{1}$$

où α est un réel.

4. Montrer (avec des hypothèses raisonnables) que $I(\alpha) = \langle X^2 \rangle - \alpha + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$, où on l'a définit

$$\langle X^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi|^2 \mathrm{d}x \qquad \text{et} \qquad \langle K^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \right|^2 \mathrm{d}x \tag{2}$$

5. En déduire que $\langle X^2 \rangle \langle K^2 \rangle \geq 1/4$.

6. Montrer que la saturation dans l'inégalité implique

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{3}$$

où l'on donnera la définition de σ, A étant une constante d'intégration.

Les paquets d'onde gaussiens en mécanique quantique ont une particularité intéressante qu'on se propose de montrer dans cette partie : ils vérifient strictement l'inégalité d'Heisenberg.

3 Dynamique d'un paquet d'onde gaussien libre

On s'intéresse au cas d'un paquet d'onde gaussien, c'est-à-dire dont la répartition dans l'espace des impulsions est une fonction gaussienne centrée autour d'un vecteur d'onde k_0. Plus précisément, à $t=0$:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{w_0^2 (k-k_0)^2}{2}} \tag{4}$$

7. Vérifier que $\tilde{\psi}$ est une fonction normée, et donner un sens physique à la quantité w_0. On rappelle l'intégrale

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha(u-u_0)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{|\alpha|}}. \tag{5}$$

arnaud.raoux@sorbonne-universite.fr

8. Calculer la fonction d'onde à $t=0$ $\psi(x,0)$. On choisira la convention

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} \mathrm{d}k. \tag{6}$$

Pour ce faire, changer de variable dans l'intégrale $k \to \overline{k} = k - k_0$, puis mettre le trinôme qui apparaît sous sa forme canonique.

9. Exprimer $\tilde{\psi}(k,t)$ en fonction de $\tilde{\psi}(k,0)$. En déduire l'expression de $\psi(x,t)$ sous la forme d'une intégrale. Montrer qu'à temps court (à définir), on obtient

$$\psi(x,t) = e^{i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t} \psi(x - v_g t, 0). \tag{7}$$

Interpréter ce résultat.

Bonus

10. Calculer la fonction d'onde $\psi(x,t)$ pour tout temps t. On posera

$$w(t)^2 = w_0^2 + i\frac{\hbar t}{m}. \tag{8}$$

11. En déduire la densité de probabilité de présence, et montrer que

$$\Delta x(t) = \frac{w_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{w_0^4 m^2}}. \tag{9}$$

1

MQTD4

TD 4 paquet d'onde en mécanique quantique

1) Equation de propagation (exo 1)

1) Shrödinger: correction — eq. d'onde : équation aux dérivées partielles

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$

$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$ avec $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

$i\hbar\, \partial_t |\psi\rangle = \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \partial_x^2 \psi$

reversible dans le temps ! (prendre complexe conjugué)

absence de potentiel extérieur : équation de d'alembert :

- $\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} - c^2 \Delta x = 0$

reversible, non lineaire

$i \frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + |f|^2 f$ (shrödinger non lineaire)

- equation de diffusion :

$\frac{\partial x}{\partial t} - D \Delta x = 0$

- Navier stokes

. . . . . .

•

2) relation de dispersion : relation qui lie le vecteur d'onde avec paramètres de l'équation d'onde.

relation $k(\omega)$ ⟸ relation entre vecteur d'onde et ω.

ω = pulsation de l'onde ⟸ caractéristique fondamentale

célérité : vitesse de propagation

La célérité est le coefficient qui apparaît dans l'équation de d'Alembert (c)

vitesse de phase : $v_\varphi = \dfrac{\omega}{k(\omega)}$. vitesse de la phase de l'onde

avec $\cos(\underbrace{\omega t + kx - \varphi}_{\text{phase}})$ (oppm)

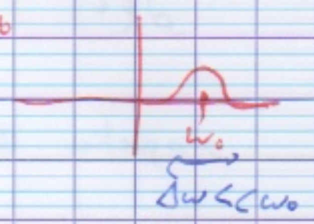
vitesse de groupe : $\left.\dfrac{\partial\omega}{\partial k(\omega)}\right|_{k_0} = v_g(\omega)$, il apparaît quand on s'intéresse au paquet d'onde. $v_g(\omega) = \dfrac{1}{\left.\frac{dk}{d\omega}\right|_{\omega_0}}$

dans le cas d'un milieu transparent et pas trop dispersif, alors v_g est la vitesse de propagation dans ce milieu d'un paquet d'onde.

3) paquet d'onde : combinaison linéaire d'ondes planes monochromatiques progressives.

Un signal fini dans le temps et dans l'espace avec une distribution spectrale centrée autour de ω_0 et avec une faible plage de fréquences centrées autour de ω_0

$\Psi(x, t=0) =$



dans le cas de Schrödinger on détermine

rel. disp : $\overset{E}{\overbrace{\hbar\omega}} = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ ← dispersif ! $\left(i\hbar(-i\omega) = +\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$

$v_\varphi = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{\hbar k}{2m}$, $v_g = \dfrac{d\omega}{dk} = \dfrac{\hbar k}{m} \neq v_\varphi$

dépend de k

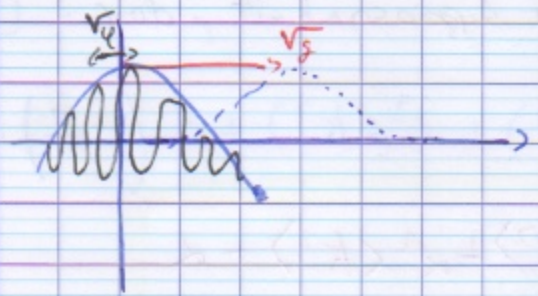
Schrödinger n'a pas de célérité.

2

MQ TD4

3) Paquet d'onde :

Un signal fini dans le temps et dans l'espace avec une distribution spectrale centrée en ω_0 (faible plage de valeurs)



en MQ $v_g = 2 v_\varphi$ => on dirait que la phase défile dans le sens inverse de la propagation.

=> Étalement dans le temps du paquet d'onde.

exercice 2

4) On pose : $I(\alpha) = \int_{\mathbb{R}} \left(x\psi^* + \alpha \frac{d\psi^*}{dx} \right) \left(x\psi + \alpha \frac{d\psi}{dx} \right) dx$

$$= \int_{\mathbb{R}} \left(x^2 |\psi|^2 + x\psi^* \alpha \frac{d\psi}{dx} + x\psi\alpha \frac{d\psi^*}{dx} + \alpha^2 \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 \right) dx$$

On suppose α et $x \in \mathbb{R}$

$$= \langle X^2 \rangle + \int_{\mathbb{R}} \alpha x \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} + \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) dx + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$$

$$= \langle X^2 \rangle + \alpha \int_{\mathbb{R}} x \frac{d}{dx} (\psi\psi^*) dx + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$$

Ipp :

$$I(\alpha) = \langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle k^2 \rangle + \alpha \left(\underbrace{\left[x |\psi|^2 \right]_{-\infty}^{+\infty}}_{0} - \underbrace{\int |\psi|^2 dx}_{1} \right)$$

hyp raisonnable : $\psi \searrow$ suffisamment vite, donc : $\left[x |\psi|^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} \longrightarrow 0$

d'où $I(\alpha) = \langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle k^2 \rangle + \alpha (-1)$

$$\boxed{I(\alpha) = \langle x^2 \rangle + \alpha^2 \langle k^2 \rangle - \alpha}$$

5) $I(\alpha) \geq 0 \Rightarrow$ polynome d'ordre 2 en α

donc racines imaginaires ou nulle

$\Rightarrow \quad 1 - 4 \langle x^2 \rangle \langle k^2 \rangle \leq 0$

$\Rightarrow \quad \langle x^2 \rangle \langle k^2 \rangle \geq \frac{1}{4}$

6) Dans le cas de la saturation, alors :

$$\langle x^2 \rangle \langle k^2 \rangle = \frac{1}{4}$$

et plus important $I(\alpha) = 0$

or $I(\alpha)$ est l'intégral d'une fonction positive, donc l'intégrande est nulle.

donc

$$\frac{d\Psi}{dx} = -\alpha x \Psi \Rightarrow \boxed{\Psi(x) = \Psi_0 e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}}$$

on pose $\alpha = \sigma^2$ avec $\boxed{\alpha = \frac{1}{2\langle k^2 \rangle}}$

exercise 3

7) $$\tilde{\Psi}(k) = \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{w_0^2}{2}(k-k_0)^2}$$

Vérifions que $\tilde{\Psi}$ est normée :

$$\int_{\mathbb{R}} \tilde{\Psi}(k)^* \cdot \tilde{\Psi}(k)\, dk = \int_{\mathbb{R}} \frac{w_0}{\pi^{\frac{1}{2}}} e^{-w_0^2(k-k_0)^2}$$

or $$\int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha(u-u_0)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{|\alpha|}}$$

donc $$\boxed{= \frac{w_0}{\pi^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{\pi}{w_0^2}} = \frac{w_0}{w_0} \sqrt{\frac{\pi}{\pi}} = 1}$$

sens physique de w_0 : c'est la dispersion en réel du paquet d'onde => en effet $|w| \sim \frac{1}{k}$!

8) On pose $\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \hat{\Psi}(k) e^{ikx} dk$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \frac{\sqrt{\omega_0}}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{\omega_0^2 (k-k_0)^2}{2}} e^{ikx} dk$$

on pose $k - k_0 = k'$ $\Rightarrow$ $dk = dk'$

$$= \sqrt{\frac{\omega_0}{2\pi\sqrt{\pi}}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\omega_0^2}{2}(k')} e^{ik'x} e^{+ik_0x} dk'$$

$$= \sqrt{\frac{\omega_0}{2\pi\sqrt{\pi}}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\omega_0^2}{2}k'^2 + ik'x + ik_0x} dk'$$

$$= cte\, e^{ik_0x} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\omega_0^2 k'^2}{2}} e^{ik'x} dk$$

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{\omega_0^2}{2}\left(k'^2 - \frac{2ikx}{\omega_0^2}\right)} dk$$

$$ax^2 + bx + c = a\left[\left(x + \frac{b}{2a}\right)^2 + cte\right]$$

dans ce cas: $\left(k'^2 - \frac{2ik}{\omega_0^2}\right)x = \left(k - \frac{ix}{\omega_0^2}\right)^2 + \frac{x^2}{\omega_0^4}$

nouveau chgt de variable $\bar{k} = k - \frac{ix}{\omega_0^2}$

TDMQ4

d'où : $\psi(x,0) = e^{ik_0x}\sqrt{\frac{w_0}{4\pi}\frac{1}{\pi^{\frac12}}}\int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{w_0^2}{2}\bar{k}^2}\,d\bar{k}\cdot e^{-\frac{w_0^2}{2}}e^{\frac{x^2}{w_0^4}}$

$$= \cancel{\sqrt{\frac{w_0}{2\pi}}}\,\frac{e^{ik_0x}}{4^{\frac14}}\,e^{\frac{-x^2}{2w_0^2}}\cancel{\sqrt{\frac{2\pi}{w_0^2}}}$$

$$\boxed{\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{w_0}\,\pi^{\frac14}}\,e^{ik_0x}\,e^{\frac{-x^2}{2w_0^2}} \rightarrow \text{gaussienne!}}$$

q) $H = \frac{p^2}{2m}$ 1) fct propre ? e^{ikx} oppm.

2) On décompose ψ sur des fct. propres !

↳ c'est ce que nous avons fait !

$\psi = \sum_k \tilde{\psi}(k)e^{ikx}$ ← on a fait un indice continu mais on a exprimé ψ avec le coefficient $\tilde{\psi}(k)$ dans la base des e^{ikx}.

Donc il ne reste que $\psi = \sum_k \tilde{\psi}(k)e^{ikx}\cdot e^{j\omega(k)t}$

donc $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{w_0}{\sqrt{\pi}}}\int e^{-\frac{w_0^2k'^2}{2}}e^{i(k'+k_0)x}e^{-i\omega(k)t}\,dk.$

avec $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

On fait comme avant après avoir remplacé $\omega(k)$ par son expression.

$$k^2 = (k' + k_0)^2 = k'^2 + 2k'k_0 + k_0^2$$

$$\Rightarrow \int e^{-\frac{\omega_0^2 k'^2}{2}} e^{ik'x} e^{-i\frac{\hbar}{2m}(k'^2 + 2k'k_0)} dk$$

On a un trinôme qu'on met sous forme canonique et on fait comme avant.

alors on trouve :

$$\frac{\hbar k_0^2}{2m}$$

$$\Psi(x,t) = \underbrace{e^{i([illegible] - i\overbrace{\frac{\hbar k_0^2}{2m}}^{\omega_0} t)}}_{\text{exponentielle qui oscille à}} \Psi(x - v_g t, 0)$$