Mécanique quantique – L3 FIP

Correction du TD 8 - Expansion d'un paquet d'ondes

1 Expansion libre d'un paquet d'ondes

On cherche à établir l'évolution temporelle de la fonction d'onde (en représentation position, quand on ne le précise pas) d'une particule libre. Pour cela, on va passer par sa fonction d'onde en **représentation impulsion**, qui a le bon goût d'avoir une évolution temporelle très simple. Comme d'habitude (pour ne pas écrire "comme toujours"), **on décompose l'état de départ** sur une **base propre** du hamiltonien (ici, les $|p\rangle$) pour avoir une évolution temporelle simple à écrire, et **on réécrit l'état final sur la base qui nous intéresse** (ici, les $|x\rangle$).

Ce que l'on va faire dans la suite se schématise ainsi :

1. Les grandeurs $\psi_0(x) = \langle x|\psi_0\rangle$ et $\overline{\psi}_0(p) = \langle p|\psi_0\rangle$ sont liées par une **transformation de Fourier**. En utilisant $\int dx |x\rangle\langle x| = \mathbb{I}$, on trouve en effet :

$$\overline{\psi_0}(p) = \langle p|\psi_0\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \ e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi_0(x), \tag{1}$$

avec $\langle p|x\rangle=\langle x|p\rangle^*=(...)e^{-ipx/\hbar}$ (fonction d'onde d'une onde plane).

Le préfacteur $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ est imposé par la normalisation séparée de $\psi(x)$ et $\overline{\psi}(p)$.

On a bien écrit l'état de départ $|\psi_0\rangle$ sur la base propre de \hat{H} .

2. L'évolution temporelle de $\overline{\psi}(p,t)$ est donnée par :

$$\frac{d}{dt}\overline{\psi}(p,t) = \frac{d}{dt}(\langle p|\psi(t)\rangle) \tag{2}$$

$$= \langle p | \left(\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right)$$
 (car $\langle p |$ est un vecteur de base) (3)

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle p|\hat{H}|\psi(t)\rangle, \tag{4}$$

d'après l'équation de Schrödinger.

Pour calculer ce terme, on remarque que $\langle p|\hat{H}$ est le bra conjugué du ket $\hat{H}|p\rangle$ (puisque $\hat{H}=\hat{H}^{\dagger}$). Le hamiltonien libre $\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m}$ agit de manière très simple en représentation $|p\rangle$ (c'est pour cela qu'on s'est placé dans cette représentation):

$$\hat{H}|p\rangle = \frac{\hat{P}^2}{2m}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle. \tag{5}$$

On trouve donc:

$$\frac{d}{dt}\overline{\psi}(p,t) = \frac{1}{i\hbar}\frac{p^2}{2m}\langle p|\psi(t)\rangle = \frac{p^2}{2im\hbar}\overline{\psi}(p,t),\tag{6}$$

dont l'intégration donne alors :

$$\overline{\psi}(p,t) = \overline{\psi}_0(p) \ e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}},\tag{7}$$

avec l'habituel facteur de phase lié à l'énergie propre de l'état $|p\rangle$.

L'impulsion étant une **constante du mouvement**, on retrouve sans surprise que (la norme du carré de) sa distribution est conservée : $|\overline{\psi}(p,t)|^2 = |\overline{\psi}_0(p)|^2$.

La variance Δp^2 reste alors inchangée dans l'espace des impulsions, i.e. $\Delta p^2 = \Delta p_0^2$

3. Connaissant $\overline{\psi}(p,t)$, une transformation de Fourier permet de repasser dans l'**espace** des positions pour obtenir $\psi(x,t)$:

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \overline{\psi}(p,t)$$

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}} \overline{\psi}_0(p)$$

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{\frac{-ipx'}{\hbar}} \psi_0(x')$$

$$\psi(x,t) = \int dx' \underbrace{\frac{1}{2\pi\hbar}}_{\mathcal{G}(x,x',t)} \int dp e^{\frac{ip(x-x')}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}} \psi_0(x')$$

On peut ensuite calculer $\mathcal{G}(x,x',t)$, en utilisant la formule de l'énoncé sur les intégrales gaussiennes :

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \ e^{\frac{ip(x-x')}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}
\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left(-\frac{it}{2m\hbar} (p^2 - \frac{2mp(x-x')}{t})\right)
\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left(-\frac{it}{2m\hbar} \left((p - \frac{m(x-x')}{t})^2 - \frac{m^2(x-x')^2}{t^2}\right)\right)
\mathcal{G}(x, x', t) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{im(x-x')^2/2\hbar t}.$$

Cette relation est analogue à la **relation de Huyghens-Fresnel** en optique : elle indique comment se propage un champ (ici la fonction d'onde, l'amplitude du champ électromagnétique en optique) à partir d'une situation connue (ici le champ à t=0, le champ au niveau de l'objet diffractant en optique). Le noyau \mathcal{G} est baptisé fonction de Green, ou encore propagateur de Feynman, du hamiltonien. \mathcal{G} peut en fait être vu comme l'opérateur d'évolution dans la représentation position :

$$\psi(x,t) = \langle x|\hat{U}(t)|\psi_0\rangle = \langle x|\hat{U}|\left(\int dx'|x'\rangle\langle x'|\right)|\psi_0\rangle = \int dx' \underbrace{\langle x|\hat{U}(t)|x'\rangle}_{\mathcal{G}(x,x',t)}\psi_0(x')$$

On peut de même identifier l'opérateur d'évolution en représentation impulsion, et remarquer qu'il est diagonal dans la base des $|p\rangle$ pour une évolution libre :

$$\overline{\psi}(p,t) = \langle p|\hat{U}(t)|\psi_0\rangle = \int dp' \underbrace{\langle p|U(t)|p'\rangle}_{\mathcal{G}(p,p',t)} \overline{\psi}_0(p')$$

$$\mathcal{G}(p, p', t) = e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}\delta(p - p')$$

4. Dans la relation intégrale entre $\psi(x)$ et $\psi_0(x')$, x varie sur une échelle de l'ordre de Δx , x' sur Δx_0 .

Aux temps longs, $\Delta x \simeq \frac{\Delta p}{m} t \gg \Delta x_0$ et on va négliger le terme en x'^2 dans le propagateur. On a alors :

$$\psi(x,t) = \int dx' \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} \psi_0(x')$$

$$\psi(x,t) \simeq e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \int dx' e^{\frac{2imxx'}{2\hbar t}} \psi_0(x')$$

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{m}{it}} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \overline{\psi}_0\left(\frac{mx}{t}\right).$$

Le calcul effectué correspond à celui de l'approximation de Fraunhofer en optique. La probabilité de présence dans l'espace réel est proportionnelle à la densité initiale dans l'espace des $|p\rangle$ (pour la valeur de p correspondante), avec le facteur de phase habituel de la propagation libre, puisque pour aller de l'origine au point x en un temps t, la particule doit avoir une vitesse $v=\frac{x}{t}$, soit une énergie $E=\frac{mv^2}{2}=\frac{mx^2}{2t^2}$.

5. En prenant l'état de départ gaussien, on peut calculer exactement la distribution en position et en impulsion à tout instant. Une manière de faire les calculs est de suivre ce qui a été fait précédemment : $\psi_0(x)$ donne accès (par transformation de Fourier) à la distribution en impulsion $\overline{\psi}_0(p)$ à l'instant initial. $\overline{\psi}(p,t)$ s'en déduit aisément, et une transformation de Fourier inverse (calcul un peu pénible) donne alors $\psi(x,t)$.

Les grandes lignes du calcul sont les suivantes. On trouve facilement (en prenant la transformée de Fourier de $\psi_0(x)$ et en appliquant le facteur de phase) :

$$\overline{\psi}(p,t) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}} e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}} \tag{8}$$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \, e^{-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}} e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}. \tag{9}$$

(10)

On veut utiliser l'intégrale gaussienne :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, e^{-\alpha(\xi-\beta)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \, \forall \alpha \in \mathbb{C} \, (\operatorname{avec} \Re(\alpha) > 0), \, \forall \beta \in \mathbb{C}.$$
 (11)

Il faut donc mettre l'argument de l'exponentielle sous cette forme :

$$-\left(\frac{it}{2m\hbar} + \frac{\sigma^2}{\hbar^2}\right)p^2 + \frac{ipx}{\hbar} = -\left(\frac{it}{2m\hbar} + \frac{\sigma^2}{\hbar^2}\right)\left(p^2 - \frac{ipx}{\frac{it}{2m} + \frac{\sigma^2}{\hbar}}\right) \tag{12}$$

$$= -\left(\frac{it}{2m\hbar} + \frac{\sigma^2}{\hbar^2}\right) \left(\left(p - \frac{ix}{2} \frac{1}{\frac{it}{2m} + \frac{\sigma^2}{\hbar}}\right)^2 + \frac{x^2}{4} \frac{1}{\left(\frac{it}{2m} + \frac{\sigma^2}{\hbar}\right)^2}\right)$$
(13)

A partir de l'équation (11), on voit que :

- le préfacteur α devant la grande parenthèse va donner un terme qui va permettre de normaliser la fonction d'onde $\psi(x,t)$ (comme attendu avec l'équation de Schrödinger)
- le terme $\beta = \frac{ix}{2}$... va disparaître lors de l'intégration le terme en x^2 va sortir de l'intégrale (sur p) et donner une gaussienne

L'argument de cette dernière exponentielle se met sous la forme :

$$-\left(\frac{it}{2m\hbar} + \frac{\sigma^2}{\hbar^2}\right) \left(\frac{x^2}{4} \frac{1}{\left(\frac{it}{2m} + \frac{\sigma^2}{\hbar}\right)^2}\right) = -\frac{x^2}{4\hbar} \frac{1}{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}$$
(14)

$$= -\frac{x^2}{4} \frac{\sigma^2 - \frac{i\hbar t}{2m}}{\sigma^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}}.$$
 (15)

Si on ne regarde que la partie réelle de l'argument de la gaussienne (celle qui va donner la probabilité de présence), on trouve finalement :

$$\psi(x,t) \simeq (...) \frac{1}{\sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2}}} e^{-\frac{x^2}{4} \frac{1}{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma^2}}}.$$
 (16)

On peut extraire de ces différentes fonctions d'onde (en position/impulsion, toutes gaussiennes) les variances 1 Δx_0^2 , $\Delta x^2(t)$, Δp_0^2 , $\Delta p^2(t)$. On obtient successivement :

$$\psi_{0}(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^{2})^{1/4}}e^{-\frac{x^{2}}{4\sigma^{2}}} \qquad \Delta x_{0}^{2} = \sigma^{2}$$

$$\overline{\psi}_{0}(p) = \left(\frac{2\sigma^{2}}{\pi\hbar^{2}}\right)^{1/4}e^{-\frac{\sigma^{2}p^{2}}{\hbar^{2}}} \qquad \Delta p_{0}^{2} = \frac{\hbar^{2}}{4\sigma^{2}}$$

$$\overline{\psi}(p,t) = e^{-\frac{ip^{2}t}{2m\hbar}}\overline{\psi}_{0}(p) \qquad \Delta p^{2} = \Delta p_{0}^{2}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\alpha^{2})^{1/4}}e^{-\frac{x^{2}}{4\alpha^{2}}}, \text{ avec } \alpha^{2} = \sigma^{2} - \frac{i\hbar t}{2m} \qquad \Delta x^{2}(t) = \Delta x_{0}^{2} + \Delta p_{0}^{2} \frac{t^{2}}{m^{2}}$$

On vérifie que $\Delta x_0 \Delta p_0 = \frac{\hbar}{2}$: le paquet d'ondes gaussien (avec une fonction d'onde initialement purement réelle) est minimal vis-à-vis de l'inégalité d'Heisenberg.

^{1.} Attention, ce sont $|\psi|^2$ et $|\overline{\psi}|^2$ qui sont les densités de probabilité en position et impulsion : il faut donc d'abord prendre le module carré des fonctions d'ondes pour en déduire les variances.

La formule pour $\Delta x^2(t)$ peut aussi être démontrée à partir du théorême d'Ehrenfest, qui s'écrit pour un opérateur \hat{A} qui ne dépend pas explicitement du temps (comme c'est le cas de \hat{X} ou de \hat{P}):

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle. \tag{17}$$

Pour une particule libre, on trouve alors :

$$\frac{d}{dt}\hat{P} = 0 \implies \langle \hat{P}\rangle(t) = \langle \hat{P}\rangle(0) \tag{18}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{X} = \frac{\hat{P}}{m} \implies \langle \hat{X} \rangle(t) = \langle \hat{X} \rangle(0) + \langle \hat{P} \rangle(0)t/m. \tag{19}$$

On peut sans nuire à la généralité prendre $\langle \hat{X} \rangle(0) = 0$ en translatant l'origine des positions. De même, en effectuant un changement de référentiel galiléen, on peut poser $\langle \hat{P} \rangle(0) = 0$. Dans ce cas, le centre du paquet d'ondes reste immobile durant l'évolution. C'est le cas du paquet d'ondes gaussien étudié plus haut. On peut lui donner une impulsion moyenne en rajoutant une terme de phase $e^{ip_0x/\hbar}$ à l'expression de $\psi_0(x)$.

On cherche ensuite à caractériser la largeur du paquet d'ondes, aussi bien en impulsion qu'en position. Dans le cas général, la dispersion $\Delta \hat{A}$ des valeurs trouvées pour l'observable \hat{A} dans une série de mesures est définie par $\Delta \hat{A}^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$. Les valeurs moyennes des opérateurs position et impulsion étant prises constantes égales à zéro, on a simplement :

$$\Delta \hat{X}^2 = \langle \hat{X}^2 \rangle$$
$$\Delta \hat{P}^2 = \langle \hat{P}^2 \rangle.$$

L'opérateur impulsion commutant avec le hamiltonien, on a pour commencer :

$$\frac{d\langle \hat{P}^2 \rangle}{dt} = 0. {20}$$

L'application du théorème d'Ehrenfest à \hat{X}^2 nécessite de calculer $[\hat{X}^2, \hat{P}^2/2m]$. Or, on a :

$$[\hat{X}^2, \hat{P}^2/2m] = \hat{X}[\hat{X}, \hat{P}^2/2m] + [\hat{X}, \hat{P}^2/2m]\hat{X}.$$

Comme on a montré précédemment que $[\hat{X}, \hat{P}^2/2m] = i\hbar \hat{P}/m$, on trouve :

$$\frac{d\langle \hat{X}^2 \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X} \rangle}{m}.$$
 (21)

La largeur spatiale $\Delta \hat{X}$ du paquet d'ondes n'est donc pas constante dans le cas général. Pour trouver son évolution temporelle il faut au préalable étudier celle de l'opérateur $\hat{C} = \hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X}$. En appliquant une dernière fois le théorème d'Ehrenfest, on obtient :

$$\frac{d\langle \hat{C} \rangle}{dt} = 2 \frac{\langle \hat{P}^2 \rangle}{m}.$$
 (22)

Les équations (20), (21) et (22) fournissent un système fermé d'équations sur les variables $\langle \hat{X}^2 \rangle$, $\langle \hat{P}^2 \rangle$ et $\langle \hat{C} \rangle$. Ce système linéaire se résout sans difficulté et on trouve :

$$\begin{split} \langle \hat{P}^2 \rangle(t) &= \hat{P}^2(0) \\ \langle \hat{C} \rangle(t) &= 2\hat{P}^2(0)t/m + \langle \hat{C} \rangle(0) \\ \langle \hat{X}^2 \rangle(t) &= \hat{P}^2(0)t^2/m + \langle \hat{C} \rangle(0)t + \langle \hat{X}^2 \rangle(0) \end{split}$$

 $\langle \hat{C} \rangle$ dépendant linéairement de t, il est toujours possible de choisir l'origine des temps de façon à avoir $\langle \hat{C} \rangle(0) = 0$. L'observable \hat{C} représente physiquement les corrélations entre position et impulsion. Si ces deux quantités sont décorrélées, on a en effet $\langle \hat{C} \rangle = 2 \langle \hat{X} \rangle \langle \hat{P} \rangle = 0$.

Dans le cas où $\langle \hat{C} \rangle(0) = 0$ (c'est le cas ici, sans facteur de phase dans l'expression de $\psi_0(x)$), on trouve d'après les résultats de la question précédente :

$$\Delta \hat{X}^2 = \Delta \hat{X}^2 + \Delta \hat{P}^2(0)t^2/m^2, \tag{23}$$

qui correspond bien à l'équation trouvée précédemment :

$$\Delta x^{2}(t) = \Delta x_{0}^{2} + \Delta p_{0}^{2} \frac{t^{2}}{m^{2}}$$
(24)

$$\operatorname{avec} \Delta p_0^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}. \tag{25}$$

Après propagation, les différentes ondes planes composant le paquet d'ondes se déphasent les unes des autres (chaque onde plane ayant une impulsion différente), ce qui tend à l'étalement spatial du paquet d'ondes, alors que sa largeur en impulsion reste constante. Celui-ci n'est alors plus minimal vis-à-vis de l'inégalité d'Heisenberg.

On peut enfin remarquer que si les atomes sont initialement dans un **mélange statistique** décrit par une fonction de partition $f_0(x, p)$ qui se met sous la forme du produit d'une gaussienne (en position) par une autre gaussienne (en impulsion), alors on peut montrer que la fonction de partition à un temps ultérieur reste une gaussienne, avec une variance (classique) en position :

$$\Delta x^2(t) = \Delta x_0^2 + \Delta p_0^2 \frac{t^2}{m^2}.$$
 (26)

On verra que cette propriété est utilisée pour imager la fonction d'onde (quantique) ou la distribution (thermique) en impulsion (**technique du temps de vol**).

Attention toutefois à ne pas confondre les deux situations! Dans le cas d'un mélange statistique, on peut interpréter $f_0(x, p)$ comme la densité de probabilité pour les atomes d'avoir à la fois une position x et une impulsion p), contrairement au cas quantique (où les opérateurs \hat{X} et \hat{P} ne partagent aucun état propre).

Signalons pour finir que le résultat donné par l'équation (23) est à la fois moins riche que le calcul sur l'état gaussien (puisqu'il ne donne pas la forme de la densité de probabilité de présence, seulement sa variance), mais plus général (puisqu'il est toujours valable, indépendamment de la forme de l'état de départ).

On lira avec profit le Complément G_I du Cohen-Tannoudji, où le résultat complet (incluant le facteur de phase) est donné.

2 Expérience d'interférences

1. On considère deux paquets d'ondes identiques séparés initialement d'une distance a. La fonction d'onde s'écrit :

$$\psi(x, t = 0) \simeq \frac{\psi_0(x) + \psi_0(x - a)}{\sqrt{2}},$$

 ψ_0 étant la fonction d'onde d'un seul paquet d'ondes et le facteur $1/\sqrt{2}$ servant à la normalisation de la fonction d'onde (si la taille initiale Δx_0 est faible devant la distance a, le recouvrement des deux fonctions d'ondes est négligeable).

Après expansion, on aura d'après la partie 1 :

$$\psi(x,t) \propto \overline{\psi}_0\left(\frac{mx}{t}\right)e^{imx^2/2\hbar t} + \overline{\psi}_0\left(\frac{m(x-a)}{t}\right)e^{im(x-a)^2/2\hbar t}.$$

2. Après une durée d'expansion τ suffisante, la largeur de chaque paquet d'ondes devient beaucoup plus grande que a, de sorte que l'on peut faire l'approximation de $\overline{\psi}\left(\frac{m(x-a)}{\tau}\right)$ par $\overline{\psi}\left(\frac{mx}{\tau}\right)$. La fonction d'onde est alors (toujours en négligeant le terme en a^2):

$$\psi(x,\tau) \propto \overline{\psi}_0\left(\frac{mx}{\tau}\right)\left(e^{\frac{imx^2}{2\hbar\tau}} + e^{\frac{im(x-a)^2}{2\hbar\tau}}\right)$$
 (27)

$$\psi(x,\tau) \propto \overline{\psi}_0\left(\frac{mx}{\tau}\right)e^{\frac{imx^2}{2\hbar\tau}}\left(1+e^{\frac{-imxa}{\hbar\tau}}\right).$$
 (28)

La densité de probabilité à l'instant τ s'écrit par conséquent :

$$\rho(x,\tau) \propto \left| \overline{\psi}_0 \left(\frac{mx}{\tau} \right) \right|^2 \cos^2 \left(\frac{xma}{2\hbar \tau} \right).$$

On retrouve donc pour le profil de densité après expansion la distribution dans l'espace des impulsions (qui reste égale à la distribution initiale), modulée par un terme d'interférence en $\cos^2\left(\frac{mxa}{2\hbar\tau}\right)$.

Le pas de cette figure d'interférence vaut :

$$\delta = \frac{h\tau}{ma}.$$

On réalise ainsi l'équivalent de l'**expérience des fentes d'Young** (pour laquelle, de la même façon, on sait que la figure d'interférences est la figure de diffraction d'une fente simple, multipliée par le terme d'interférences entre les deux fentes).

3. L'interfrange sur la figure de l'énoncé vaut à peu près $\delta \approx 24 \ \mu \text{m}$. D'après la relation précédente, ceci correspond à une distance initiale $a=5 \ \mu \text{m}$.