Université de Strasbourg

TD1 - Paquets d'ondes

Jean-Pascal Lavoine

Transcrit par

Pierre Guichard

L3 Semestre 5 2020

Rappels de mécanique quantique

Équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t)$$
$$= \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)} + \boxed{V(x)\psi(x,t)}$$

L'encadré rouge caractérise la partie d'énergie cinétique, et l'éncadré bleu la partie d'énergie potentielle.

En cours on a vu qu'a l'impulsion on peut lui associé un opérateur, $\hat{p}$

$$\hat{p} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Si désormais on réécrit l'équation de Schrödinger avec cet opérateur impulsion :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[\boxed{\frac{\hat{p}^2}{2m}} + \boxed{\hat{V}(\hat{x})}\right]\psi(x,t)$$

L'énergie cinétique et l'énergie potentielle sont immédiatement reconnaissable.

Quand le système est conservatif, on peut alors écrire

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

On définit une observable comme étant un opérateur associé à une quantité mesurée ou mesurable.

Opérateur hermitique :

- diagonalisable
- les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles
- $\hat{o}^\dagger = \hat{o}$

Préliminaires.

Soit $\psi(x,t)$ la fonction d'onde à l'instant t d'un système physique à une dimension. Montrer que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$$

est une constante au cours du temps.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t)\psi^*(x,t)\mathrm{d}x \\
&= \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\psi^*(x,t)\mathrm{d}x}_{(1)} + \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t)\frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t}\mathrm{d}x}_{(2)}
\end{aligned}$$

$$(1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) - \frac{i}{\hbar}V(x)\psi(x,t)\right]\psi^*(x,t)\mathrm{d}x$$

On prend le conjugué de l'équation ci-dessus :

$$(2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t)\left[\frac{-i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t) + \frac{i}{\hbar}V(x)\psi^*(x,t)\right]\mathrm{d}x$$

$$\begin{aligned}
(1)+(2) &= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)\right]\psi^*(x,t)\mathrm{d}x - \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,t)\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t)\right]\mathrm{d}x \\
\text{IPP} \rightarrow &= \frac{i\hbar}{2m}\left\{\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right]_{-\infty}^{+\infty} - \left[\psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right]_{-\infty}^{+\infty}\right\} \\
&= 0 \text{ par interprétation de la fonction d'onde}
\end{aligned}$$

Exercice I - Paquet d'ondes.

On considère une particule libre de masse m, d'énergie E et assujettie à se déplacer selon une direction Ox. on note $\psi(x,t)$ la fonction d'onde caractérisant l'état de la particule au temps t.

1. **Dans un premier temps on suppose que**

$$\psi(x,t) = A \exp^{i(kx-\omega t)}$$

où A, k et ω sont des constantes.

(a) **Donner la relation qui existe entre ω et k pour que $\psi(x,t)$ soit solution de l'équation de Schrödinger. En déduire la valeur de l'énergie E en fonction de ω.**

C'est une particule libre donc l'équation de Schrödinger devient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

$$\begin{aligned} i\hbar(-i\omega)\psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\psi(x,t) \\ \hbar\omega\psi(x,t) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x,t) \end{aligned}$$

D'où

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

On a donc :

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

(b) **Calculer ρ_ψ, la densité de probabilité associée à $\psi(x,t)$. L'état du système peut-il être décrit par $\psi(x,t)$ ainsi définie ?**

On a

$$\rho_\psi = |\psi(x,t)|^2 = A^2$$

Ce n'est pas une fonction de carré sommable, le système ne peut-être décrit par une telle fonction d'onde $\psi(x,t)$.

2. On propose maintenant

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \exp^{i(kx-\omega t)} \mathrm{d}k$$

où $g(k)$ est une fonction de k.

(a) $\psi(x,t)$ ainsi définie est-elle solution de l'équation de Schrödinger ?

C'est une combinaison linéaire des fonctions d'onde de la 1ère partie : elle est donc bien solution de l'équation de Schrödinger.

(b) Quelle condition doit satisfaire $g(k)$ pour que $\psi(x,t)$ représente un état physique ?

Rappel : soit $f(x)$ une fonction de la variable x, sa transformée de Fourier, quand elle existe, est une fonction $\tilde{f}(k)$ de la variable k définie par

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{ikx} f(x) \mathrm{d}x$$

La transformée de Fourier inverse est donnée par :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{ikx} \tilde{f}(k) \mathrm{d}k$$

La transformée de Fourier conserve la norme (relation de Parseval) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\tilde{f}(k)\right|^2 \mathrm{d}k$$

Si on écrit $\psi(x,0)$:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \exp^{ikx} \mathrm{d}k$$

En appliquant la formule de Parseval :

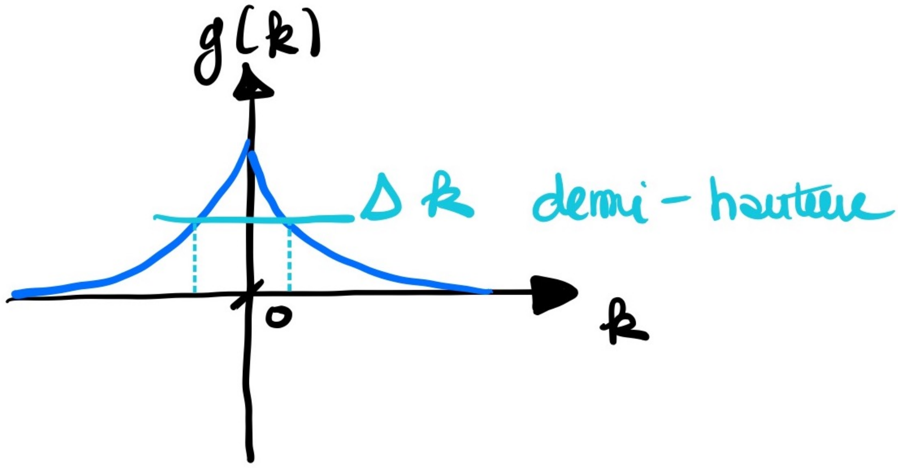
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 \mathrm{d}k$$

On peut donc analysé le système soit dans l'espace des x, soit l'espace des k. Pour faire le lien entre les deux on réalise une transformée de Fourier.
Dans le préliminaire, on a montré que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$$

est une constante au cours du temps.
Alors, d'après la formule de Parseval, si $g(k)$ est de carré sommable, alors $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x$ existe, et alors $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$ aussi d'après la constance au cours du temps.

(c) A titre d'exemple, on choisit $g(k) = \exp^{-\frac{|k|}{k_0}}$ où $k_0 > 0$. Calculer $\psi(x,0)$ et déterminer Δx et Δk les largeurs à mi-hauteur respectives de $\psi(x,0)$ et $g(k)$. Calculer $\Delta x \Delta k$.



$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\frac{2}{k_0}}{(x^2 + \frac{1}{k_0^2})}$$

$$\Delta x = \frac{2}{k_0}$$

$$\begin{aligned} g(k) &= \frac{1}{2} \\ \exp^{-\frac{|k|}{k_0}} &= \frac{1}{2} \\ -\frac{|k|}{k_0} &= -\ln(2) \\ |k| &= k_0 \ln(2) \end{aligned}$$

Donc :

$$\sigma_k = k_0 \ln(2)$$
$$\Delta k = 2\sigma_k$$
$$\boxed{\Delta k = 2k_0 \ln(2)}$$

Cela entraine :

$$\Delta x \Delta k = 4 \ln(2)$$

C'est une constante.

Exercice II - Paquet d'onde gaussien

La paquet d'ondes décrivant une particule quantique à une dimension est au temps $t = 0$

$$\psi(x) = a \exp^{ik_0 x} \exp^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \tag{1}$$

où k_0**,** x_0 **et** σ $(\sigma > 0)$ **sont des constantes données.**

Indications : On rappelle que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad , \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-\alpha x^2} \exp^{iyx} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp^{-y^2/4\alpha}$$

1. **Déterminer** a **de telle sorte que** $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$**.**

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x &= |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}x \\ &= |a|^2 \sigma \sqrt{\pi}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}|a|^2 \sigma \sqrt{\pi} &= 1 \\ a &= \pm \sqrt{\frac{1}{\sigma \sqrt{\pi}}}\end{aligned}$$

Autant prendre la valeur la plus simple possible.

2. **Calculer à** $t = 0$**, la valeur moyenne** $< x >$ **et l'écart quadratique moyen** $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$**, l'état du système étant caractérisé par la fonction d'onde** $\Psi(x, 0) = \psi(x)$**.**

$$\begin{aligned}\langle \hat{o} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \left[\hat{o}\psi(x,t)\right] \mathrm{d}x \\ &= \langle \psi | \hat{o} \psi \rangle\end{aligned}$$

Donc si $\hat{o}$ est l'opérateur position, $< \hat{x} >$:

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \left[\hat{x}\psi(x,t)\right] \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) x \psi(x,t) \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x\end{aligned}$$

On sait que c'est une loi normale, donc la moyenne est la valeur la plus probable x_0 d'où :

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x)|^2 \mathrm{d}x \\
&= |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (u + x_0) \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u \\
&= |a|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} u \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u}_{\text{fonction impaire}} + |a|^2 x_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u \\
&= 0 + x_0 \\
&= x_0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2|\psi(x)|^2 \mathrm{d}x \\
&= |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (u + x_0)^2 \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u \\
&= |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (u^2 + 2ux_0 + x_0^2) \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u \\
&= |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u + |a|^2 x_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u \\
&= x_0^2 + |a|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp^{-\frac{u^2}{\sigma^2}} \mathrm{d}u \\
&= x_0^2 + \frac{\sigma^2}{2}
\end{aligned}$$

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$$

3. **On montre que $\tilde{\psi}(k)$ l'amplitude de probabilité dans l'espace des impulsions est reliée à l'amplitude de probabilité $\psi(x)$ par la relation**

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp^{-ikx} \mathrm{d}x \Leftrightarrow \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) \exp^{ikx} \mathrm{d}k$$

Calculer $\langle p \rangle$, $\Delta p \Delta x$ avec $p = \hbar k$.

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \langle \psi(x) | \hat{p} \psi(x) \rangle \\
&= \left\langle \tilde{\psi}(k) \middle| \hat{p} \tilde{\psi}(k) \right\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp^{-ikx} \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a \exp^{ik_0 x} \exp^{-ikx} \exp^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \mathrm{d}x \\
&= \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{ix(k_0-k)} \exp^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \mathrm{d}x
\end{aligned}
$$

On pose $X = x - x_0 \Leftrightarrow x = X + x_0$, d'où $\mathrm{d}X = \mathrm{d}x$.

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}(k) &= \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \exp^{i(X+x_0)(k_0-k)} \exp^{-X^2/2\sigma^2} \mathrm{d}X \\
&= \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \exp^{ix_0(k_0-k)} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{iX(k_0-k)} \exp^{-X^2/2\sigma^2} \mathrm{d}X \\
&= \boxed{a\sigma \exp^{ix_0(k_0-k)} \exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2/2}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \hbar \langle k \rangle \\
&= \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} k \left| \tilde{\psi}(k) \right| \mathrm{d}k \\
&= \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} k a^2 \sigma^2 \exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2} \\
&= \hbar a^2 \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} k \exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2}
\end{aligned}
$$

On pose $z = k_0 - k \to k = k_0 - z$.

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \hbar a^2 \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (k_0 - z) \exp^{-\sigma^2 z^2} \\
&= \hbar a^2 \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} k_0 \exp^{-\sigma^2 z^2} - \hbar a^2 \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} z \exp^{-\sigma^2 z^2} \\
&= \hbar a^2 \sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} k_0 \exp^{-\sigma^2 z^2} \\
&= \hbar a^2 \sigma^2 k_0 \frac{\sqrt{\pi}}{\sigma} \\
&= \hbar a^2 \sigma k_0 \sqrt{\pi} \\
&= \hbar k_0
\end{aligned}
$$

La transformée de Fourier d'une Gaussienne est une Gaussienne.

$$\begin{aligned}\langle p^2\rangle &= \hbar^2\langle k^2\rangle \\ &= \hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty} k^2\left|\tilde{\psi}(k)\right|\mathrm{d}k \\ &= \hbar^2a^2\sigma^2\int_{-\infty}^{+\infty} k^2\exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2}\,\mathrm{d}k\end{aligned}$$

On pose, $Z = k_0 - k$ ce qui veux dire $k = k_0 - Z)$:

$$\begin{aligned}\hbar^2a^2\sigma^2\int_{-\infty}^{+\infty} k^2\exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2}\,\mathrm{d}k &= \hbar^2a^2\sigma^2\int_{-\infty}^{+\infty}(k_0-z)^2\exp^{-\sigma^2z^2}\,\mathrm{d}z \\ &= \hbar^2a^2\sigma^2\left[\underbrace{k_0^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp^{-\sigma^2z^2}\,\mathrm{d}z}_{(1)}+\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}z^2\exp^{-\sigma^2z^2}\,\mathrm{d}z}_{(2)}\right]\end{aligned}$$

Le terme croisé est une fonction impaire, donc il s'annule.

$$(1)\Rightarrow k_0^2\frac{\sqrt{\pi}}{\sigma}$$

$$\begin{aligned}(2)\Rightarrow\int_{-\infty}^{+\infty}z^2\exp^{-\sigma^2z^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty}z\times z\exp^{-\sigma^2z^2} \\ &= \left[-z\frac{1}{2\sigma^2}\exp^{-\sigma^2z^2}\right]_{-\infty}^{+\infty}+\frac{1}{2\sigma^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp^{-\sigma^2z^2}\,\mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{2\sigma^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\sigma}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hbar^2a^2\sigma^2\left[(1)+(2)\right] &= \hbar^2a^2\sigma^2k_0^2\frac{\sqrt{\pi}}{\sigma}+\hbar^2a^2\sigma^2\frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma^2} \\ &= \hbar^2\left[k_0^2+\frac{1}{2\sigma^2}\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta p &= \sqrt{\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2} \\ &= \sqrt{\hbar^2\left[k_0^2+\frac{1}{2\sigma^2}\right]-(\hbar k_0)^2} \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma}\end{aligned}$$

On trouve alors

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Les paquets d'ondes Gaussien minimisent les relations d'Heisenberg.

4. On suppose qu'aucune force ne s'exerce sur la particule (particule libre), montrer que l'amplitude de probabilité au temps t est donnée par

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) \exp^{i(kx-\omega t)} \mathrm{d}k$$

où $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, m étant la masse de la particule. En déduire que $\psi(x,t)$ est encore de la forme (1) et calculer les nouvelles quantités x_0, k_0 et σ.

On se rappel que $\psi(x,t)$ est solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t)$$

On se pose la question : est-ce qu'il existe un couple d'une valeur E et d'une fonction $\psi(x)$ tel qu'on ai :

$$\boxed{\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)}$$

$\hat{H}$ est un opérateur hermitique, donc les valeurs propre de cet opérateur sont réelles.
Dans le cas d'une particule libre :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \Leftrightarrow \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

On peut posé $K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\psi''(x) + K^2\psi(x) = 0$$

E varie continument sur tout $\mathbb{R}^+$
D'où on obtient la forme de $\psi(x)$:

$$\psi(x) = A\exp^{ikx} + B\exp^{-ikx}$$

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad n \in \mathbb{N}$$

Ici, on chercherais une combinaison linéaire :

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(x)$$

Désormais on cherche $\psi(x,t)$ de façon continue :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k,t)\exp^{ikx}\,\mathrm{d}k$$

On peut injecté cela dans l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial C(k,t)}{\partial t}\exp^{ikx}\,\mathrm{d}k &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} C(k,t)\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\exp^{ikx}\right)\mathrm{d}k \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} k^2 C(,k,t)\exp^{ikx}\,\mathrm{d}k \end{aligned}$$

Ici, on se place dans le cas d'une particule libre.
On regroupe :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left[i\hbar\frac{\partial C(k,t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2k^2}{2m}C(k,t)\right]\exp^{ikx}\,\mathrm{d}k = 0$$

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial C(k,t)}{\partial t} - \hbar\omega C(k,t) = 0 \\ i\frac{\partial C(k,t)}{\partial t} - \omega C(k,t) = 0 \\ \frac{\partial C(k,t)}{\partial t} + i\omega C(k,t) = 0 \end{aligned}$$

D'où

$$C(k,t) = A(k)\exp^{-i\omega t}$$

D'où

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\exp^{i(kx-wt)}\,\mathrm{d}k$$

On a vu que

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\psi}(k)\exp^{ikx}\,\mathrm{d}k$$

On retrouve bien alors

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\tilde{\psi}(k)\exp^{i(kx-wt)}\,\mathrm{d}k$$

Pour le calculer, on connait $\tilde{\psi}(k)$, on l'insère dans l'équation précédente et on y calcule :

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a\sigma \exp^{ix_0(k_0-k)} \exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2/2} \exp^{i(kx-\omega t)}\,\mathrm{d}k \\ &= \frac{a\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp^{ik_0x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-ikx_0} \exp^{-\sigma^2(k_0-k)^2/2} \exp^{i(kx-\omega t)}\,\mathrm{d}k\end{aligned}$$

$u = k_0 - k \Rightarrow k = k_0 - u$

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{a\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp^{ik_0x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{-i(k_0-u)x_0} \exp^{-u^2\sigma^2/2} \exp^{i\left((k_0-u)x - \frac{\hbar(k_0-u)^2 t}{2m}\right)}\,\mathrm{d}u \\ &= \frac{a\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp^{ik_0x_0} \exp^{-ik_0x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{iux_0} \exp^{-u^2\sigma^2/2} \exp^{ik_0x} \exp^{-iux} \exp^{-i\frac{\hbar k_0^2 t}{2m}} \exp^{i\frac{\hbar u^2 t}{2m}}\,\mathrm{d}u \\ &= \frac{a\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp^{ik_0x_0} \exp^{ik_0\left(x-x_0-\frac{\hbar k_0 t}{2m}\right)} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp^{iu\left(x_0-x+\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)} \exp^{-u^2(\sigma^2/2+i\hbar t/2m)}\,\mathrm{d}u \\ &= \frac{a\sigma}{\sqrt{2\pi}} \exp^{ik_0x_0} \exp^{ik_0\left(x-x_0-\frac{\hbar k_0 t}{2m}\right)} \sqrt{\frac{\pi}{\sigma^2/2+i\hbar t/2m}} \exp^{-\frac{\left(x-x_0-\frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{2(\sigma^2+i\hbar t/m)}}\end{aligned}$$

On trouve bien :

$$\boxed{\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} a\sigma \exp^{ik_0x_0} \exp^{i\frac{t\hbar k_0^2}{2m}} \exp^{ik_0(x-x_0-\frac{\hbar t k_0}{m})} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sigma^2}{2}+\frac{it\hbar}{2m}}} \exp^{-\frac{\left(x-x_0-\frac{t\hbar k_0}{m}\right)^2}{2(\sigma^2+\frac{it\hbar}{m})}}}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\Gamma\sqrt{\pi}} \exp^{-\frac{(x-X_0)^2}{\Gamma^2}}$$

où $X_0 = x_0 + \frac{\hbar t k_0}{m}$ et $\Gamma = \sigma\sqrt{1+\frac{t^2\hbar^2}{m^2\sigma^4}}$
Au cours du temps, le paquet d'onde Gaussien, reste Gaussien.
On retrouve alors

$$\langle x \rangle = X_0$$

$$\Delta x = \frac{\Gamma}{\sqrt{2}}$$

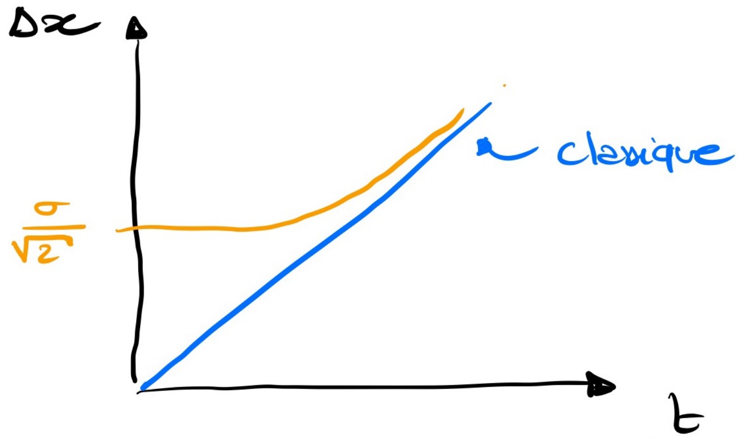
On se place en classique :

$$\Delta x_{\text{classique}} = t\Delta v = \frac{\hbar t}{m\sigma\sqrt{2}}$$

Pour des temps long, on trouve

$$\Gamma \propto \sigma t \frac{\hbar}{m\sigma^2}$$

5. Représenter Δx en fonction du temps et interpréter le résultat.



étalement du paquet d'onde

Exercice III - Inégalités d'Heisenberg

Soient $\theta(x)$ et $\Phi(x)$ deux fonctions de carré sommable, de normes $\|\Phi\|$ et $\|\theta\|$ telles que

$$\|\Phi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi(x)|^2 \mathrm{d}x \qquad \|\theta\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\theta(x)|^2 \mathrm{d}x$$

On pose

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \theta^\star(x)\Phi(x)\mathrm{d}x = \exp^{-i\alpha} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^\star(x)\Phi(x)\mathrm{d}x \right|$$

où α est un nombre réel.

1. **On pose**

$$\chi(x) = \frac{\theta(x)}{\|\theta\|} - \exp^{i\alpha} \frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|}$$

En remarquant que $\|\chi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x$ est une quantité positive, montrer

$$\|\Phi\|\|\theta\| \geq \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^\star(x)\Phi(x)\mathrm{d}x \right| = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\exp^{-i\alpha} \Phi^\star(x)\theta(x) + \exp^{i\alpha} \Phi(x)\theta^\star(x) \right] \mathrm{d}x$$

On peut définir le produit scalaire :

$$\langle \theta(x) | \Phi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^\star(x)\Phi(x)\mathrm{d}x$$

$$\|\Phi\|^2 = \langle \Phi | \Phi \rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle \chi(x) | \chi(x) \rangle &= \left\langle \frac{\theta(x)}{\|\theta\|} - \exp^{i\alpha} \frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|} \middle| \frac{\theta(x)}{\|\theta\|} - \exp^{i\alpha} \frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|} \right\rangle \\
&= \frac{1}{\|\theta\|\|\theta\|} \langle \theta | \theta \rangle + \frac{1}{\|\Phi\|\|\Phi\|} \langle \Phi | \Phi \rangle - \frac{1}{\|\Phi\|\|\theta\|} \left\langle e^{i\alpha}\Phi \middle| \theta \right\rangle - \frac{1}{\|\theta\|\|\Phi\|} \left\langle \theta \middle| e^{i\alpha}\Phi \right\rangle \\
&= 1 + 1 - \frac{1}{\|\Phi\|\|\theta\|} \left(e^{-i\alpha} \langle \Phi | \theta \rangle + e^{i\alpha} \langle \theta | \Phi \rangle \right)
\end{aligned}$$

On sait que

$$\langle \chi(x) | \chi(x) \rangle \geq 0$$

D'où

$$\begin{aligned}
1 + 1 - \frac{1}{\|\Phi\|\|\theta\|} \left(e^{-i\alpha} \langle \Phi | \theta \rangle + e^{i\alpha} \langle \theta | \Phi \rangle \right) &\geq 0 \\
\frac{1}{\|\Phi\|\|\theta\|} \left(e^{-i\alpha} \langle \Phi | \theta \rangle + e^{i\alpha} \langle \theta | \Phi \rangle \right) &\leq 2 \\
e^{-i\alpha} \langle \Phi | \theta \rangle + e^{i\alpha} \langle \theta | \Phi \rangle &\leq 2\|\Phi\|\|\theta\|
\end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{1}{2} \left(e^{-i\alpha} \langle \Phi | \theta \rangle + e^{i\alpha} \langle \theta | \Phi \rangle \right) \leq \|\Phi\|\|\theta\|}$$

2. Soit un système physique à l'instant $t = t_0$. On note $\Psi(x, t_0) = \psi(x)$ sa fonction d'onde à $t = t_0$ et Δx et Δp_x les écarts quadratiques moyens des observables $\hat{x}$ et $\hat{p_x}$, le système étant dans l'état caractérisé par $\psi(x)$.

$$(\Delta x)^2 =< (\hat{x}- < \hat{x} >)^2 > \quad \text{et} \quad (\Delta p_x)^2 =< (\hat{p_x}- < \hat{p_x} >)^2 >$$

On introduit les fonctions $\theta(x)$ et $\Phi(x)$ définies à une phase près par les relations

$$\theta(x) = (\hat{x}- < x >)\psi(x) \quad \text{et} \quad \Phi(x) = (\hat{p_x}- < p_x >)\psi(x)$$

En choisissant leur phase relative de sorte que $\exp^{i\alpha} = -i$, montrer que

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\begin{aligned}
\|\theta(x)\|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{x} - \langle x\rangle|^2 |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x \\
&= \langle (\hat{x} - \langle x\rangle)\psi(x) | (\hat{x} - \langle x\rangle)\psi(x)\rangle \\
&= \left\langle \psi(x) \middle| (\hat{x} - \langle x\rangle)^2 \psi(x) \right\rangle \\
&= \langle \hat{x} - \langle x\rangle\rangle^2 \\
&= (\Delta x)^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\|\Phi(x)\|^2 &= \langle (\hat{p_x} - \langle p_x\rangle)\psi(x) | (\hat{p_x} - \langle p_x\rangle)\psi(x)\rangle \\
&= \langle \hat{p_x} - \langle p_x\rangle\rangle^2 \\
&= (\Delta p_x)^2
\end{aligned}$$

D'où on trouve que

$$\begin{aligned}
\Delta x \Delta p_x = \|\theta(x)\| \|\Phi(x)\| &\geq \frac{1}{2}\left(e^{-i\alpha} \langle \Phi|\theta\rangle + e^{i\alpha} \langle \theta|\Phi\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(i \langle \Phi|\theta\rangle - i \langle \theta|\Phi\rangle\right) \\
&= \frac{i}{2}\left(\langle \Phi|\theta\rangle - \langle \theta|\Phi\rangle\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \Phi|\theta\rangle - \langle \theta|\Phi\rangle &= \langle (\hat{p_x} - \langle p_x\rangle)\psi(x) | (\hat{x} - \langle x\rangle)\psi(x)\rangle - \langle (\hat{x} - \langle x\rangle)\psi(x) | (\hat{p_x} - \langle p_x\rangle)\psi(x)\rangle \\
&= \langle \psi | [(\hat{p} - \langle p\rangle)(\hat{x} - \langle x\rangle) - (\hat{x} - \langle \hat{x}\rangle)(\hat{p} - \langle \hat{p}\rangle)]\, \psi\rangle \\
&= [\hat{p} - \langle p\rangle, \hat{x} - \langle x\rangle] \langle \psi|\psi\rangle \\
&= [\hat{p_x}, \hat{x}] = -[\hat{x}, \hat{p_x}] = -i\hbar
\end{aligned}$$

D'où

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

3. Montrer que $\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$ implique que $\psi(x)$ est un paquet d'onde gaussien.

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p_x &= \frac{\hbar}{2} \\ \|\theta(x)\|\|\Phi(x)\| &= \frac{\hbar}{2}\end{aligned}$$

$$\langle \chi(x)|\chi(x)\rangle \geq 0 \Rightarrow \frac{1}{2}\left(e^{-i\alpha}\langle \Phi|\theta\rangle + e^{i\alpha}\langle \theta|\Phi\rangle\right) \leq \|\Phi\|\|\theta\|$$

$$\langle \chi(x)|\chi(x)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{1}{2}\left(e^{-i\alpha}\langle \Phi|\theta\rangle + e^{i\alpha}\langle \theta|\Phi\rangle\right) = \|\Phi\|\|\theta\|$$

D'où

$$\langle \chi(x)|\chi(x)\rangle = 0$$

Alors

$$\chi(x) = \frac{\theta(x)}{\|\theta\|} - \exp^{i\alpha}\frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|} = 0$$

D'où

$$\begin{aligned}\frac{\theta(x)}{\|\theta\|} &= \exp^{i\alpha}\frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|} \\ &= -i\frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|}\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}\chi(x) &= \frac{\theta(x)}{\|\theta\|} + i\frac{\Phi(x)}{\|\Phi\|} \\ &= \frac{\theta(x)}{\Delta x} + i\frac{\Phi(x)}{\Delta p_x} \\ &= \frac{(\hat{x} - \langle x\rangle)\psi(x)}{\Delta x} + i\frac{(\hat{p_x} - \langle p_x\rangle)\psi(x)}{\Delta p_x}\end{aligned}$$

On pose $\langle x\rangle = x_0$ et $\langle p_x\rangle = \hbar k_0$.

$$\begin{aligned}\frac{(\hat{x} - \langle x\rangle)\psi(x)}{\Delta x} + i\frac{(\hat{p_x} - \langle p_x\rangle)\psi(x)}{\Delta p_x} &= \frac{(\hat{x} - x_0)\psi(x)}{\Delta x} + i\frac{(\hat{p_x} - \hbar k_0)\psi(x)}{\Delta p_x} \\ &= \frac{(\hat{x} - x_0)\psi(x)}{\Delta x} + i\frac{(-i\hbar\nabla - \hbar k_0)\psi(x)}{\Delta p_x} \\ &= \frac{(x - x_0)\psi(x)}{\Delta x} + \frac{\hbar}{\Delta p_x}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - i\frac{\hbar k_0\psi(x)}{\Delta p_x} \\ &= \frac{\hbar}{\Delta p_x}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} + \psi(x)\left(\frac{x - x_0}{\Delta x} - i\frac{\hbar k_0}{\Delta p_x}\right) \\ &= 0\end{aligned}$$

$$\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = -\frac{\Delta p_x}{\Delta x}\frac{(x-x_0)}{\hbar} + ik_0$$

D'où on intégrant :

$$\psi(x) = \psi(0)\exp\left[\frac{-(x-x_0)^2}{2}\frac{\Delta p_x}{\Delta x\hbar}\right]\exp\left[ik_0 x\right]$$

On sait que

$$\Delta x\Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \Leftrightarrow \frac{\Delta p_x}{\Delta x} = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\Delta x^2} \Leftrightarrow \boxed{\frac{\Delta p_x}{\Delta x\hbar} = \frac{1}{2\Delta x^2}}$$

$$\boxed{\psi(x) = \psi(0)\exp\left[\frac{-(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right]\exp\left[ik_0 x\right]}$$

Avec $\sigma^2 = 2\Delta x^2$

Ce qui est bien un paquet d'onde gaussien.