TD 2: 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.

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

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

2. En déduire que $\langle X^2 \rangle \langle K^2 \rangle \geq 1/4$.
3. Montrer que la saturation dans l'inégalité implique

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

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 $t = 0$:

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

1. Vérifier que $\tilde{\psi}$ est une fonction normée, et donner un sens physique à la quantité w_0. On rappelle l'intégrale suivante pour $\alpha \in \mathbb{C}$ tel que $\mathrm{Re}(\alpha) > 0$:

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

2. Calculer la fonction d'onde dans l'espace position à l'instant initial $\psi(x, t = 0)$. Puis la représenter graphiquement. On choisira la convention

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

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.

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

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

Interpréter ce résultat.

Bonus

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

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

2. En déduire la densité de probabilité de présence, et montrer que le paquet d'onde gaussien s'étale dans le temps.