SCIENCES SORBONNE UNIVERSITÉ

AGRÉGATION DE PHYSIQUE

Master de physique
2022-2023

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.

Correction

L'équation de Schrödinger dépendant du temps détermine l'évolution temporelle d'un état $|\psi\rangle$. On peut l'écrire en termes de fonction d'onde, et à une dimension :

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

Cette équation est d'ordre 1 en t mais d'ordre 2 en x. Elle fait penser à l'équation de la diffusion $\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ qui n'est pas réversible en temps (en effet si $c(x,t)$ est solution, $c(\pm x,-t)$ n'est pas solution). Cependant l'équation de Schrödinger **est** réversible car si $\psi(x,t)$ est solution, alors $\bar{\psi}(x,-t)$ aussi.

Pour cette raison, elle est plus proche de l'équation de d'Alembert : $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - c^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = 0$.

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.

Correction

La *relation de dispersion* est le pendant spectral de l'équation de propagation. Elle relie la pulsation temporelle ω et le vecteur d'onde k, sous la forme $k(\omega)$. L'exemple le plus simple est celle de l'équation de d'Alembert : $\omega^2 = c^2k^2$.

Plusieurs définitions et utilisations co-existent pour le terme de *célérité*. De mon point de vue, je pense qu'il faut réserver ce nom à la constante qui apparaît dans l'équation de d'Alembert. Cette constante, homogène à une vitesse, correspond à la vitesse de phase et de groupe d'une onde vérifiant cette équation.

La *vitesse de phase* $v_\varphi(\omega) = \omega/k$ est la vitesse de propagation de l'OPPH à la pulsation ω. Si cette vitesse n'est pas constante, la propagation est dite *dispersive*.

La *vitesse de groupe* $v_g(\omega) = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$ est la vitesse de propagation d'un paquet d'onde dont la pulsation centrale est ω.

Pour l'équation de Schrödinger, en remplaçant $\psi(x,t) = A\,\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$ dans l'équation, on obtient $i\hbar(-i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2$, d'où $\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$. On retrouve l'expression de l'énergie pour un vecteur d'onde k en mécanique quantique. La vitesse de phase vaut $v_\varphi = \frac{\hbar k}{2m}$, et la vitesse de groupe $v_g = \frac{\hbar k}{m}$. On remarque donc que même la propagation libre est *dispersive* en mécanique quantique !

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.

Correction

Un paquet d'onde est une superposition continue d'OPPH, dont la largeur spectrale est fine, c'est-à-dire qu'il est centré sur un vecteur d'onde k_0, sur une largeur $\Delta k \ll k_0$. C'est à cette condition que l'on peut définir une vitesse de groupe unique pour le paquet d'onde $v_g(k_0)$.

Dynamique d'un paquet d'onde :

- la pulsation principale ω_0 avance à la vitesse $v_\varphi(\omega_0)$.
- l'enveloppe du paquet d'onde se déplace à la vitesse $v_g(\omega_0)$.
- à l'ordre suivant du développement limité (si le milieu est très dispersif ou le paquet d'onde assez large spectralement), celui-ci s'étale.

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

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

Correction

On peut développer $I(\alpha)$:

$$I(\alpha) = \underbrace{\int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x}_{=\langle X^2 \rangle} + \alpha \underbrace{\int_{\mathbb{R}} x \times 2\,\mathrm{Re}\left(\psi(x) \frac{\mathrm{d}\psi^\star}{\mathrm{d}x}\right) \mathrm{d}x}_{=\int_{\mathbb{R}} x \left(\psi \frac{\mathrm{d}\psi^\star}{\mathrm{d}x} + \psi^\star \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) \mathrm{d}x = -\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 \mathrm{d}x = 1} + \alpha^2 \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \left| \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \right|^2 \mathrm{d}x}_{=\langle K^2 \rangle}$$

Ainsi $I(\alpha) = \langle X^2 \rangle - \alpha + \alpha^2 \langle K^2 \rangle$.

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

Correction

$I(\alpha)$ est un polynôme d'ordre 2 en α, de minimum $\alpha_{\text{min}} = -b/2a = 1/2 \langle K^2 \rangle$, avec $I(\alpha_{\text{min}}) = \langle X^2 \rangle - \frac{1}{4\langle K^2 \rangle}$.
Par définition de $I(\alpha)$, cette intégrale est nécessairement positive. En appliquant ce résultat au minimum du polynôme, on trouve $\langle X^2 \rangle \langle K^2 \rangle \geq \frac{1}{4}$. Cette relation constitue la relation d'indétermination d'Heisenberg pour les fonctions d'onde qui sont centrées ($\langle X \rangle^2 = \langle K \rangle^2 = 0$). Cette démonstration est quand même limitée puisque les termes $\langle X^2 \rangle$ et $\langle K^2 \rangle$ sont des « boites noires » difficilement interprétables sans parler d'opérateurs position et impulsion.

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.

Correction

Lorsque l'inégalité devient une égalité $I(\alpha) = 0$. Comme $I(\alpha)$ est une fonction positive, l'égalité est atteinte au minimum de I, donc en α_{min}. De plus, I est l'intégrale d'une fonction positive, cela signifie que la fonction elle-même est nulle : $x\psi + \alpha_{\text{min}} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = 0$. En séparant les variables, il vient $\frac{\mathrm{d}\psi}{\psi} = -x\mathrm{d}x/\alpha_{\text{min}}$, soit en intégrant : $\psi(x) = C\,\mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2}$ avec $\sigma^2 = \alpha_{\text{min}} = 1/2 \langle K^2 \rangle$.

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 $\mathrm{Re}(\alpha) > 0$:

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

Correction

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \mathrm{d}k = \frac{w_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\frac{w_0^2(k-k_0)^2}{2}}\,\mathrm{d}k \overset{u=w_0(k-k_0)}{=} \frac{w_0}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-u^2}\,\frac{\mathrm{d}u}{w_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \times \sqrt{\pi} = 1$$

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.

Correction

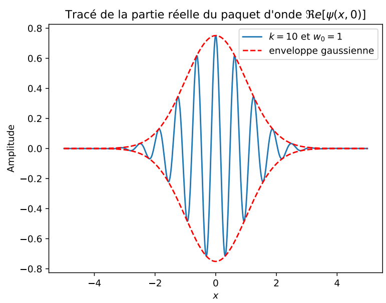
$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{w_0^2(k-k_0)^2}{2}}\,\mathrm{e}^{ikx}\,\mathrm{d}k = \sqrt{\frac{w_0}{2\pi}}\,\frac{1}{\pi^{1/4}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\frac{w_0^2\overline{k}^2}{2}}\,\mathrm{e}^{i(\overline{k}+k_0)x}\,\mathrm{d}k$$

Et

$$-\frac{w_0^2\overline{k}^2}{2} + i\overline{k} + ik_0 = -\frac{w_0^2}{2}\left(\overline{k}^2 - i\frac{2x}{w_0^2}\overline{k}\right) + ik_0 = -\frac{w_0^2}{2}\left[\left(\overline{k} - i\frac{x}{w_0^2}\right)^2 + \frac{x^2}{w_0^4}\right] + ik_0$$

Et en utilisant finalement l'intégrale (5), on obtient

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ik_0x}\,\mathrm{e}^{-x^2/2w_0^2}\,\frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}}\sqrt{\frac{2\pi}{w_0^2}} = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{w_0}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2w_0^2}}\,\mathrm{e}^{ik_0x}$$



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.

Correction

$\tilde{\psi}(k)$ est une fonction propre du hamiltonien, de valeur propre $E_k = \hbar\omega_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Donc son évolution temporelle est simplement une phase : $\tilde{\psi}(k,t) = \mathrm{e}^{-i\omega_k t}\,\tilde{\psi}(k)$. On en déduit l'évolution de $\psi(x,t)$ en l'exprimant en fonction de $\tilde{\psi}(k,t)$:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}}\, \mathrm{e}^{-\frac{w_0^2 (k-k_0)^2}{2}}\, \mathrm{e}^{-i\omega_k t}\, \mathrm{e}^{ikx}\, \mathrm{d}k = \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\frac{w_0^2 \bar{k}^2}{2}}\, \mathrm{e}^{-i\omega_{\bar{k}+k_0} t}\, \mathrm{e}^{i(\bar{k}+k_0)x}\, \mathrm{d}\bar{k}.$$

avec le même changement de variable $\bar{k} = k - k_0$. En développant $\omega_{\bar{k}+k_0}$, cela donne :

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{ik_0 x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\frac{w_0^2 \bar{k}^2}{2}}\, \mathrm{e}^{-i\frac{\hbar \bar{k}^2}{2m} t}\, \mathrm{e}^{i\left(\bar{k}x - \frac{\hbar \bar{k} k_0}{m} t\right)}\, \mathrm{d}\bar{k}.$$

Le terme dynamique a donc donné trois morceaux : un constant qui est sorti de l'intégrale, un linéaire qui s'est naturellement ajouté à l'exponentielle e^{ikx}, et enfin un dernier quadratique complexe. C'est ce dernier qui complique les calculs. Mais à temps court, c'est-à-dire pour $\omega_{\bar{k}} t \ll 1$, celui-ci va pouvoir être négligé. Dans ce cas, on se ramène exactement au calcul précédent, en remplaçant x par $x - \frac{\hbar k_0}{m} t$ dans l'intégrale. En se rappelant que $v_g(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m}$, on en déduit l'expression de l'énoncé :

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-i\frac{\hbar k_0^2}{2m} t}\, \mathrm{e}^{ik_0 x}\, \psi(x - v_g t, 0) = {\color{red}\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{w_0}}\, \mathrm{e}^{-\frac{(x - v_g t)^2}{2 w_0^2}}}\; {\color{blue}\mathrm{e}^{ik_0(x - v_\varphi t)}}$$

Le terme rouge représente l'enveloppe du paquet d'onde, qui se déplace à la vitesse de groupe, tandis que le terme bleu représente la phase, qui se déplace comme une OPPH à k_0 se déplaçant à la vitesse de phase.

Revenons sur l'approximation faite : $\frac{\hbar \bar{k}^2}{2m} t \ll 1$. Comme $\bar{k}$ varie entre 0 et quelques fois l'écart-type de la distribution en impulsions du paquet d'onde, on peut remplacer $\bar{k} \leq \Delta k \sim 1/w_0$. Ainsi plus le paquet d'onde sera étalé spectralement, plus on sortira vite de cette approximation.

Bonus

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

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

Correction

Il est possible de résoudre exactement le calcul de la question précédente car il s'agit d'une intégrale gaussienne. On introduit le terme quadratique complexe avec la gaussienne réelle, pour obtenir :

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4}\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{ik_0 x - i\frac{\hbar k_0^2}{2m}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\frac{w(t)^2 \bar{k}^2}{2}}\, \mathrm{e}^{i\bar{k}(x - v_\varphi t)}\, \mathrm{d}\bar{k}.$$

puis on résout de la même façon que dans le calcul de $\psi(x,0)$:

$$\psi(x,t) = {\color{red}\frac{\sqrt{w_0}}{\pi^{1/4} w(t)}\, \mathrm{e}^{-\frac{(x - v_g t)^2}{2 w(t)^2}}}\; {\color{blue}\mathrm{e}^{ik_0(x - v_\varphi t)}}$$

Il faut bien sûr donner un sens à $w(t)$ qui est une racine carrée d'un nombre complexe (on prendra celle de partie réelle positive).

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

Correction

La probabilité de présence $|\psi(x,t)|^2$ va éliminer les complexes de l'expression précédente :

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{w_0}{\pi^{1/2} w(t)^2}\, \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{|w(t)|^2}}$$

et l'étalement du paquet d'onde est donc donné par

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