

Corrigé exercice 3 : Mécanique quantique

Valeur numérique de la constante de Planck :

$$h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J.s} \quad \text{et} \quad \hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Formulaire : pour $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$ et $\beta \in \mathbb{C}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2 + \beta u) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

3 Paquet d'onde gaussien

On étudie une particule libre ($V = 0$) dans un modèle unidimensionnel où sa fonction d'onde est de la forme $\Psi = \Psi(x, t)$. La position de cette particule peut prendre toute valeur sur l'axe (Ox) entre $-\infty$ et $+\infty$.

- 1) On cherche un état stationnaire $\Psi_{\text{stat}}(x, t) = \varphi(x) \exp(-i \frac{Et}{\hbar})$ associé à une énergie $E > 0$ donnée. En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, déterminer l'expression générale de $\varphi(x)$. On introduira : $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et deux constantes complexes A et B .

La partie spatiale de l'état stationnaire quantique obéit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) = E \varphi(x)$$

qui se met sous la forme :

$\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

La solution générale de cette équation différentielle est donc :

$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (A, B) \in \mathbb{C}^2$

Dans la suite, on ne s'intéressera qu'à l'état stationnaire qui se propage dans la direction $+\vec{u}_x$ et on notera A la constante associée.

On a donc :

$$\varphi(x) = A e^{ikx} \quad \text{et} \quad \Psi_{\text{stat}}(x, t) = A e^{ikx} \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right)$$

qui est une OPPH de pulsation $\omega = E/\hbar$ qui se propage dans le sens $+\vec{u}_x$. On peut aussi remarquer qu'il s'agit d'une onde de De Broglie qui indique que l'impulsion de la particule est $\vec{p} = \hbar k \vec{u}_x$.

- 2) Pourquoi un tel état ne peut décrire convenablement l'état quantique de la particule ?

C'est parce que son module au carré n'est pas intégrable de $-\infty$ à $+\infty$: l'intégrale diverge. On ne peut donc pas normaliser la probabilité à 1.

Pour remédier à ce problème on considère une superposition continue de ces états stationnaires que l'on écrit sous la forme :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \exp(ikx) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) dk$$

où le coefficient $A(k)$ dépend de k selon l'expression :

$$A(k) = A_0 \exp(-a^2 k^2)$$

où A_0 et a sont deux constantes réelles positives. On parle de paquet d'onde gaussien. Quelle est la dimension de a ?

Les termes dans les exponentielles sont sans dimension. Il en résulte que :

$[k] = \text{m}^{-1} \quad \text{et} \quad [a] = [k^{-1}] = \text{m}$

a est donc homogène à une longueur.

Pour simplifier, on étudie ce paquet d'onde à l'instant $t = 0$.

3) Déterminer l'expression de $\Psi(x, 0)$.

On a :

$$\begin{aligned}\Psi(x, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \exp(ikx) dk \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} A_0 \exp(-a^2 k^2) \exp(ikx) dk \\ &= A_0 \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2}\right)\end{aligned}$$

à l'aide du formulaire. On a donc :

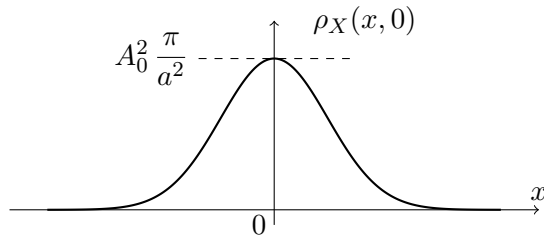
$$\Psi(x, 0) = A_0 \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2}\right)$$

4) Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence $\rho_X(x, t = 0)$ en fonction de x . Indiquer ses caractéristiques remarquables : maximum, largeur à mi-hauteur.

Par définition (A_0 étant une constante réelle) :

$$\rho_X(x, t = 0) = |\Psi(x, 0)|^2 = A_0^2 \frac{\pi}{a^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

Il s'agit d'une application gaussienne, paire en x , atteignant son maximum en $x = 0$ et qui tend vers 0 lorsque $x \rightarrow \pm\infty$.



Son maximum est :

$$\rho_{\max} = A_0^2 \frac{\pi}{a^2}$$

et sa largeur à mi-hauteur $L_{1/2}$ se calcule en écrivant que :

$$A_0^2 \frac{\pi}{a^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) = \frac{1}{2} A_0^2 \frac{\pi}{a^2}$$

d'où :

$$\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) = \frac{1}{2} \iff x^2 = 2a^2 \ln(2)$$

ce qui donne deux racines :

$$x_{\pm} = \pm a \sqrt{2 \ln(2)} \quad \text{et donc} \quad L_{1/2} = x_+ - x_- = 2a \sqrt{2 \ln(2)}$$

5) Déterminer la constante A_0 .

Il faut normaliser la probabilité de présence de la particule à 1.

On écrit donc :

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = A_0^2 \frac{\pi}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) dx = A_0^2 \frac{\pi \sqrt{2\pi}}{a}$$

grâce au formulaire. On a donc :

$$A_0 = \sqrt{\frac{a}{\pi \sqrt{2\pi}}}$$

6) Montrer sans calcul que $\langle X \rangle(t = 0) = 0$. Calculer l'indétermination quantique $\Delta X(t = 0)$ sur la position de la particule à l'instant $t = 0$.

En utilisant la définition de la valeur moyenne :

$$\langle X \rangle(t = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, 0)|^2 dx$$

il est facile de voir que :

$$\langle X \rangle(t=0) = 0$$

puisque l'application $x \mapsto x |\Psi(x, 0)|^2$ est impaire par rapport à x et qu'on intègre de $-\infty$ à $+\infty$.

On en déduit que $(\Delta X)^2(t=0) = \langle X^2 \rangle(t=0)$ et donc :

$$\begin{aligned} (\Delta X)^2(t=0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= A_0^2 \frac{\pi}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) dx \\ &= A_0^2 \frac{\pi}{a^2} \sqrt{\frac{\pi 8a^6}{4}} \\ &= a^2 \end{aligned}$$

en utilisant le formulaire et l'expression de A_0 . Il vient donc :

$$\Delta X(t=0) = a$$

Le résultat est donc bien homogène.