TD n°25 - Particule quantique libre

1 Particule libre

Selon Louis de Broglie, l'état d'une particule libre d'énergie E et de quantité de mouvement $\overrightarrow{p}$ est représenté par la fonction :

$$\psi(\overrightarrow{r}, t) = \psi_0 exp\left[\frac{i}{\hbar}(\overrightarrow{p} \cdot \overrightarrow{r} - Et)\right]$$

1. Vérifier que cette fonction est solution de l'équation de Schrödinger et que les opérateur $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ et $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ s'identifient respectivement aux opérateurs énergie totale et énergie cinétique.
2. Rappeler les différentes relations entre le vecteur d'onde $\overrightarrow{k}$ et la pulsation ω de cette onde plane, et la quantité de mouvement $\overrightarrow{p}$ et l'énergie E de la particule libre.
3. Interpréter les difficultés de normalisation de la fonction $\psi(\overrightarrow{r}, t)$ proposée par de Broglie.

2 Paquet d'onde gaussien

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

1. On cherche un état stationnaire $\Psi_{\text{stat}}(x, t) = \varphi(x)\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$ 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.
   Dans la suite, on ne s'intéressera qu'à l'état stationnaire qui se propage dans la direction $+\overrightarrow{u_x}$ et on notera A la constante associée.
2. Pourquoi un tel état ne peut décrire convenablement l'état quantique de la particule ? Pour remédier à ce problème on considère une superposition continue de ces états stationnaires que l'on écrit sous la forme :
   $$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\exp(ikx)\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\mathrm{d}k$$
   où le coefficient $A(k)$ dépend de k selon l'expression :
   $$A(k) = A_0\exp\left(-a^2k^2\right)$$
   où A_0 et a sont deux constantes réelles positives. On parle de paquet d'onde gaussien. Quelle est la dimension de a ?
   Pour simplifier, on étudie ce paquet d'onde à l'instant $t = 0$.
3. Déterminer l'expression de $\Psi(x, 0)$.
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.
5. Déterminer la constante A_0.
6. Montrer sans calcul que $\langle X\rangle(t = 0) = 0$. Calculer l'indétermination quantique $\Delta X(t = 0)$ sur la position du quanton à l'instant $t = 0$.

Données : on pourra utiliser les intégrales gaussiennes suivantes, avec $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$ et $\beta \in \mathbb{C}$:

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

et

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

3 Conservation locale de la densité de probabilité

En électromagnétisme, l'équation locale de conservation de la charge totale contenue dans un volume donné d'un conducteur s'écrit $\dfrac{\partial \rho(M,t)}{\partial t} + div\vec{j}(M,t) = 0$ où $\rho(M,t)$ est la densité volumique de charge au point M à l'instant t et $\vec{j}(M,t)$ le vecteur densité volumique de courant. Ce qui donne, pour un problème à une dimension suivant l'axe (Ox), avec $\vec{j} = j\vec{e}_x$: $\dfrac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \dfrac{\partial j}{\partial x} = 0$.

En mécanique quantique, la probabilité totale de trouver la particule dans un volume donné doit aussi être conservée.

1. En combinant l'équation de Schrödinger à une dimension et son expression complexe conjuguée, établir l'équation locale de conservation de la probabilité, reliant la densité de probabilité ρ à la densité de courant de probabilité $\vec{J}$ définie par :

$$\overrightarrow{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi\frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial x}\right]\vec{e}_x$$

2. En déduire l'expression simplifiée de $\overrightarrow{J}$ dans le cas d'une particule quantique libre décrite par l'état stationnaire : $\psi(x,t) = \psi_0 exp\left[i(kx - \omega t)\right]$.
3. Proposer une analogie entre mécanique quantique et électromagnétisme dans ce contexte.