PROBLÈME DE MÉCANIQUE QUANTIQUE

Système quantique isolé

Le but de ce problème est d'établir quelques propriétés générales d'une particule quantique isolée. Pour simplifier, nous allons considérer le cas à une dimension. *(les 4 sous-parties peuvent être traitées dans un ordre différent)*

1. **Fonction d'onde**

   (a) Écrire l'équation de Schrödinger pour une particule *libre* (potentiel nul pour tout x) de masse m, dont l'état quantique est décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t)$ dans l'espace des positions[1].

   (b) Résoudre, dans ce cas libre, l'équation de Schrödinger stationnaire pour une énergie $E > 0$. On appelle $\phi(x)$ la solution générale que l'on exprimera en fonction de $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Donner la fonction d'onde $f(x,t) = \phi(x)g(t)$ associée. $f(x,t)$ se nomme onde plane.
   Par quelle égalité k et l'impulsion propre p sont-elles reliées ? La fonction d'onde $f(x,t)$ peut-elle représenter un état physique ?

   (c) Écrire $\psi(x,t)$ en fonction de la fonction d'onde associée dans l'espace des impulsions, notée $\tilde{\psi}(p,t)$, et de p.

   (d) Vérifier, grâce aux questions 1a et 1c, que la forme générale (toujours dans le cas d'une particule *libre*) est $\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\phi}(p)e^{-iE(p)t/\hbar}$, où $\tilde{\phi}(p)$ est une fonction de l'impulsion.

   (e) Exprimer $\psi(x,t)$ en termes de $\tilde{\phi}(p)$. Cette forme revient à une décomposition de $\psi(x,t)$ sur une certaine base. Laquelle ? A priori, $\psi(x,t)$ peut-elle être de carré sommable ? Dans ce cas, comment appelle-t-on ce type de fonction d'onde ? Quel principe assure que $\psi(x,t)$, prise sous cette forme, est bien solution de l'équation de Schrödinger ?

2. **Vitesses** – On considère ici, et dans la suite, des fonctions d'ondes $\psi(x,t)$ de carré sommable.

   (a) On considère la valeur moyenne $\langle x\rangle_t$ (voir les rappels). Calculer la dérivée temporelle $d\langle x\rangle_t/dt$ à l'aide de l'équation de Schrödinger (avec potentiel nul) puis en intégrant une fois par parties chaque nouveau terme obtenu [utliser ici le fait que tout terme proportionnel à $\psi(x,t)$ ou $\partial\psi(x,t)/\partial x$ en $x \to \pm\infty$ est nul]. Donner le résultat sous la forme $\int (C\frac{\partial\psi^\star}{\partial x}\psi + D\psi^\star\frac{\partial\psi}{\partial x})dx$ en spécifiant C et D.

   (b) Par une méthode identique, montrer que l'intégrale obtenue à la question précédente est une constante par rapport au temps. On appellera cette constante v_0.

[1] $\psi(x,t)$ a une forme générique: en particulier, ce n'est pas une simple onde plane.

(c) Déduire de la question précédente que $\langle x \rangle_t = a + b\,t$, où l'on précisera les constantes a et b en fonction de v_0 et $\langle x \rangle_0$. Commenter le mouvement par rapport au cas classique.

(d) Démontrer à l'aide de la formule de Parseval-Plancherel que:

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^\star(x,t)\, \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\, dx \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} p\, \tilde{\psi}^\star(p,t)\, \tilde{\psi}(p,t)\, dp.$$

En déduire que $v_0 = \langle p \rangle_{\tilde{\psi}(p,t)}/m$, où la valeur moyenne de l'impulsion est une constante.

(e) Donner E en fonction de p et m dans le cas libre (onde plane). En déduire, à partir des relations de de Broglie sur p et de Planck-Einstein sur E, la relation de dispersion donnant la fonction $w(k)$, où w est la pulsation propre. Que vaut alors la vitesse de groupe $v_g = dw/dk$ en fonction de p et m ? Exprimer la vitesse de phase $v_\phi = w/k$ en fonction de v_g. Enfin, comparer v_g et v_0 puis commenter.

3. **Evolution temporelle**

(a) Exprimer $\langle x^2 \rangle_t$ dans l'état $\psi(x,t)$, et calculer sa dérivée temporelle $d\langle x^2 \rangle_t/dt$. On posera $d\langle x^2 \rangle_t/dt = A(t)$, puis on donnera le résultat sous la forme $A(t) = F + G \int x \frac{\partial \psi^\star}{\partial x} \psi dx$, grâce à la normalisation de ψ, en spécifiant F et G.

(b) Calculer $dA(t)/dt = B(t)$ et donner le résultat sous la forme $B(t) = L \int \frac{\partial \psi^\star}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$ (spécifier L). Montrer ensuite que $B(t) = B$ est en fait une constante.

(c) Déduire des 2 questions précédentes que $\langle x^2 \rangle_t = \alpha + \beta t + \gamma t^2$, où l'on exprimera les constantes α, β et γ en fonction de $A(0)$, B et $\langle x^2 \rangle_0$.

(d) D'après les questions 2c et 3c, quelle est l'expression de l'écart type $\Delta x^2(t)$ en fonction du temps t, de B, $A(0)$, v_0, $\langle x \rangle_0$ et $\langle x^2 \rangle_0$?

(e) Tracer l'allure de $\Delta x(t)$ en fonction du temps [pour $(B/2) - v_0^2 > 0$ et $A(0) - 2 v_0 \langle x \rangle_0 > 0$]. Indiquer le comportement asymptotique en $t \to \infty$ ainsi que l'ordonnée à l'origine. Interpréter ce résultat. Est-il général ?
Représenter aussi, pour $v_0 > 0$, l'allure typique de $|\psi(x,0)|^2$ et $|\psi(x,t)|^2$ en fonction de x (sur un même graphe). Indiquer de manière schématique sur cette figure: $\langle x \rangle_0$, $\langle x \rangle_t$, $\Delta x(0)$ et $\Delta x(t)$. Préciser enfin la distance entre $\langle x \rangle_0$ et $\langle x \rangle_t$. Commenter.

4. **Cas relativiste**

(a) On aimerait écrire l'équation de Schrödinger en relativité restreinte. Pour cela, commencer par exprimer $\hat{H}^2 \psi(x,t)$ [$\hat{H}$ est l'opérateur Hamiltonien indépendant du temps] en utilisant (deux fois consécutives) l'équation de Schrödinger générale $\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$. Puis identifier avec $\hat{H}^2 \psi(x,t)$ où $\hat{H}^2 = \hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \hat{1}$ [$c \equiv$ vitesse de la lumière; $\hat{1} \equiv$ opérateur identité], $\hat{p}$ étant l'opérateur impulsion que l'on explicitera dans sa représentation x (donc agissant sur $\psi(x,t)$) [2].

[2] L'égalité ainsi obtenue est appelée **équation de Klein-Gordon** et constitue l'équation du mouvement relativiste pour les champs bosoniques libres (ici le champ scalaire $\psi(x,t)$).

(b) Quelle relation entre w et k doit être satisfaite pour que l'onde plane $\chi(x,t) = e^{i(kx-wt)}$ soit solution de l'équation de Klein-Gordon obtenue ci-dessus? Quelle coupure obtenez-vous sur w (à $k=0$) avec cette nouvelle relation de dispersion ?

(c) Quelle relation entre E et $w(k)$ l'égalité $p = \hbar k$ implique-t-elle (on rappelle que $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$) ? Quel commentaire cela inspire-t-il? Interpréter alors en terme d'énergie la coupure précédente sur $w(k)$.

(d) A l'aide de la question 4b, comparer la vitesse de phase $v_\phi = w/k$ à c. Calculer la vitesse de groupe $v_g = dw/dk$ dans ce cas relativiste (en fonction de w, c et k), et la comparer à c. Que vaut le produit $v_g v_\phi$? Exprimer v_g en fonction de p, m et c. Comparer ces deux derniers résultats au cas non-relativiste.

Rappels mathématiques:

• Transformée de Fourier :
La transformée de Fourier de la fonction complexe $\psi(x,t)$ est

$$\tilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\, \psi(x,t)\, dx.$$

La transformée de Fourier inverse est donnée par

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\, \tilde{\psi}(k,t)\, dk.$$

• La transformée de Fourier de $\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}$ est $ik\tilde{\psi}(k,t)$.

• Théorème de Parseval-Plancherel: si $\tilde{\psi}_i(k,t)$ $[i=1,2]$ est la transformée de Fourier de $\psi_i(x,t)$ alors ($\star$ signifie le conjugué complexe):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^\star(x,t)\, \psi_2(x,t)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_1^\star(k,t)\, \tilde{\psi}_2(k,t)\, dk.$$

• La valeur moyenne $\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_{\psi(x,t)}$, pour une distribution selon la densité de probabilité $|\psi(x,t)|^2$, est

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, \psi^\star(x,t)\, \psi(x,t)\, dx.$$