Mécanique quantique – Corrigé du TD 7

Chayma Bouazza - Antoine Bourget - Sébastien Laurent

On cherche à établir l'évolution temporelle de la fonction d'onde d'une particule libre.

1. Les grandeurs $\psi_0(x) = \langle x|\psi_0\rangle$ et $\tilde{\psi}_0(p) = \langle p|\psi_0\rangle$ sont liées par une transformation de Fourier :
$$\tilde{\psi}_0(p) = \langle p|\psi_0\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\; e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi_0(x)$$

2. Le hamiltonien libre $H = \frac{P^2}{2m}$ agit de manière très simple en représentation p :
$$\begin{aligned} i\hbar\langle p|\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= \langle p|H|\psi(t)\rangle = \frac{p^2}{2m}\langle p|\psi(t)\rangle \\ i\hbar\frac{d\tilde{\psi}(p,t)}{dt} &= \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t) \end{aligned}$$
L'intégration donne alors $\tilde{\psi}(p,t) = \tilde{\psi}_0(p)\; e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}$. L'impulsion étant une constante du mouvement, on retrouve sans surprise que (la norme du carré de) sa distribution est conservée : $|\tilde{\psi}(p,t)|^2 = |\tilde{\psi}_0(p)|^2$.
La variance Δp^2 reste alors inchangée dans l'espace des impulsions, i.e. $\Delta p^2 = \Delta p_0^2$.

3. Connaissant $\tilde{\psi}(p,t)$, une transformation de Fourier permet de repasser dans l'espace des positions pour obtenir $\psi(x,t)$:
$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,t) \\ &= \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}\tilde{\psi}_0(p) \\ &= \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx'\; e^{\frac{-ipx'}{\hbar}} \psi_0(x') \\ &= \int dx' \underbrace{\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\; e^{\frac{ip(x-x')}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}}_{\mathcal{G}(x,x',t)} \psi_0(x') \end{aligned}$$

On peut ensuite calculer $\mathcal{G}(x,x',t)$, en utilisant la formule de l'énoncé sur les intégrales gaussiennes :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(x,x',t) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\; e^{\frac{ip(x-x')}{\hbar}} e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(-\frac{it}{2m\hbar}(p^2 - \frac{2mp(x-x')}{t})\right) \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(-\frac{it}{2m\hbar}\Big((p - \frac{m(x-x')}{t})^2 - \frac{m^2(x-x')^2}{t^2}\Big)\right) \\
&= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{im(x-x')^2/2\hbar t}
\end{aligned}$$

Cette relation est analogue à la relation de Huyghens-Fresnel en optique : elle indique comment se propage un champ (ici la fonction d'onde, le champ électromagnétique en optique) à partir d'une situation connue (ici le champ à $t = 0$, le champ au niveau de l'objet diffractant en optique). Le noyau $\mathcal{G}$ est baptisé fonction de Green, ou encore propagateur de Feynman, du hamiltonien. $\mathcal{G}$ peut en fait être vu comme l'opérateur d'évolution dans la représentation position :

$$\psi(x,t) = \langle x|U(t)|\psi_0\rangle = \int dx' \underbrace{\langle x|U(t)|x'\rangle}_{\mathcal{G}(x,x',t)} \psi_0(x')$$

On peut de même identifier l'opérateur d'évolution en représentation impulsion, et remarquer qu'il est diagonal dans la base des $|p\rangle$ pour une évolution libre :

$$\tilde{\psi}(p,t) = \langle p|U(t)|\psi_0\rangle = \int dp' \underbrace{\langle p|U(t)|p'\rangle}_{\mathcal{G}(p,p',t)} \tilde{\psi}_0(p')$$

$$\mathcal{G}(p,p',t) = e^{-\frac{ip^2t}{2m\hbar}}\delta(p-p')$$

4. Dans la relation intégrale entre $\psi(x)$ et $\psi_0(x')$, x varie sur une échelle de l'ordre de Δx, x' sur Δx_0 avec $\Delta x^2 = \Delta x_0^2 + \Delta p^2 \frac{t^2}{m^2}$(cf. TD2). Aux temps longs, $\Delta x \gg \Delta x_0$, on va donc négliger le terme en x'^2 dans le propagateur. On a alors :

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \int dx' \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} \psi_0(x') \\
&\simeq e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \int dx' e^{\frac{2imxx'}{2\hbar t}} \psi_0(x') \\
&= \sqrt{\frac{m}{it}} e^{\frac{imx^2}{2\hbar t}} \tilde{\psi}_0\left(\frac{mx}{t}\right)
\end{aligned}$$

Le calcul effectué correspond à celui de l'approximation de Fraunhofer en optique. La densité dans l'espace réel est proportionnelle à la densité initiale dans l'espace des p. Le facteur de phase correspond à la propagation libre habituelle : on sait qu'une onde plane se déphase de $\frac{Et}{\hbar}$. Or, pour aller de l'origine au point x en un temps t, la particule doit avoir une vitesse $v = \frac{x}{t}$, soit une énergie $E = \frac{mv^2}{2} = \frac{mx^2}{2t^2}$.

5. En prenant l'état de départ gaussien, on peut calculer exactement la distribution en position et en impulsion à tout instant. Une manière de faire les calculs est de suivre ce qui a été fait précédemment : $\psi_0(x)$ donne accès (par transformation de Fourier) à la distribution en impulsion $\tilde{\psi}_0(p)$ à l'instant initial. $\tilde{\psi}(p,t)$ s'en déduit aisément, et une transformation de Fourier inverse donne alors $\psi(x,t)$. On peut extraire de ces différentes distributions (toutes gaussiennes) les variances [1] $\Delta x_0, \Delta x(t), \Delta p_0, \Delta p(t)$. On obtient successivement :

$$
\begin{aligned}
\psi_0(x) &= \tfrac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} & \qquad \Delta x_0^2 = \sigma^2 \\
\tilde{\psi}_0(p) &= \left(\tfrac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2}} & \qquad \Delta p_0^2 = \tfrac{\hbar^2}{4\sigma^2} \\
\tilde{\psi}(p,t) &= e^{-\frac{ip^2 t}{2m\hbar}} \tilde{\psi}_0(p) & \qquad \Delta p^2 = \Delta p_0^2 \\
\psi(x,t) &= \tfrac{1}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha^2}}, \text{ avec } \alpha^2 = \sigma^2 - \tfrac{it\hbar}{2m} & \qquad \Delta x^2(t) = \Delta x_0^2 + \Delta p_0^2 \tfrac{t^2}{m^2}
\end{aligned}
$$

On vérifie que $\Delta p_0 \Delta x_0 = \frac{\hbar}{2}$: le paquet d'ondes gaussien est minimal pour l'inégalité d'Heisenberg. La formule pour $\Delta x^2(t)$, démontrée en toute généralité au TD2 (à partir des équations d'Ehrenfest), est ici redémontrée par un calcul direct dans le cas très particulier du paquet d'ondes gaussien. Après propagation, les différentes ondes planes composant le paquet d'ondes se déphasent les unes des autres (chaque onde plane ayant une impulsion différente), ce qui tend à l'étalement du paquet d'ondes. Celui-ci n'est alors plus minimal au sens de l'inégalité d'Heisenberg.

1. Attention ! $|\psi|^2$ et $|\tilde{\psi}|^2$ sont les densités de probabilité en position et impulsion : il faut donc d'abord prendre le module carré des fonctions d'ondes pour en déduire les variances.