Physique générale : quantique, Corrigé 8

Assistants et tuteurs :

elena.acinapura@epfl.ch
sara.alvesdossantos@epfl.ch
felice.bordereau@epfl.ch
jeanne.bourgeois@epfl.ch
sofia.brizigotti@epfl.ch
thomas.chetaille@epfl.ch
marco.dimambro@epfl.ch
leo.goutte@epfl.ch
douaa.salah@epfl.ch
arianna.vigano@epfl.ch

Exercice 1 : Valeurs moyennes des observables

1. La moyenne de x est donnée par :

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\hat{x}\psi(x) \, = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi(x)|^2 x \, = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{-x^2}{2\sigma^2}} x \, = 0$$

car la fonction dans l'intervalle est impaire sous inversion $x \to -x$

2. La moyenne de p est donnée par :

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\hat{p}\psi(x) \, = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} \, = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}-ikx}(ik - \frac{x}{2\sigma^2})e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}+ikx}$$

$$= -\frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(ik - \frac{x}{2\sigma^2}\right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Le terme propre à x donne de nouveau zéro. Reste le terme propre à k.

$$= \frac{k\hbar}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Posons

$$\frac{x^2}{2\sigma^2} = y^2, dx = \sqrt{2\sigma^2}dy$$

$$= \frac{k\hbar}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\sqrt{2\sigma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-y^2} = \hbar k \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\pi}} = \hbar k$$

3. L'écart type Δx est défini comme :

$$\Delta x = \sqrt{< \hat{x}^2 > - < \hat{x} >^2} = \sqrt{< \hat{x}^2 >}$$

$$< \hat{x}^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 x^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{\frac{-x^2}{2\sigma^2}}$$

Posons $\frac{x^2}{2\sigma^2} = y^2, x^2 = 2\sigma^2 y^2$ et $dx = \sqrt{2\sigma^2}dy$

$$< \hat{x}^2 >= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\sqrt{2\sigma^2}2\sigma^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy y^2 e^{-y^2} = \frac{2\sigma^2}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2} = \sigma^2$$

$$\Delta x = \sqrt{< \hat{x}^2 >} = \sigma$$

4. L'écart-type Δp est donnée par :

$$\Delta p = \sqrt{< \hat{p}^2 > - < p >^2}$$

Il faut calculer $< \hat{p}^2 >$:

$$< \hat{p}^2 >= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\hat{p}^2\psi(x) = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}-ikx}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}+ikx}$$

La dérivée est donnée par :

$$\begin{aligned}\tfrac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}+ikx} &= \tfrac{d}{dx}\left[\left(ik - \tfrac{x}{2\sigma^2}\right)e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}+ikx}\right]\\ &= \left[-\tfrac{1}{2\sigma^2} + \left(ik - \tfrac{x}{2\sigma^2}\right)^2\right]e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}+ikx}\end{aligned}$$

$$\text{Donc } \langle \hat{p}^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{x^2}{4\sigma^4} - \frac{ikx}{\sigma^2} - k^2 - \frac{1}{2\sigma^2}\right)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Comme avant, le terme propre a x donne zéro, les deux autres termes sont :

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\left[\left(k^2 + \frac{1}{2\sigma^2}\right)\sqrt{2\pi\sigma^2} - \frac{\sqrt{2\sigma^2}2\sigma^2}{4\sigma^4}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right]\\ &= \hbar^2k^2 + \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} - \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} = \hbar^2k^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}\\ \Delta p &= \sqrt{< \hat{p}^2 > - < \hat{p} >^2} = \frac{\hbar}{2\sigma}\end{aligned}$$

5. Le produit d'incertitude est donc :

$$\Delta x \Delta p = \sigma\frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}$$

qui correspond exactement à la limite fixée par le principe d'incertitude. L'état en question est un paquet d'onde avec une impulsion moyenne $p = \hbar k$ et avec incertitude minimale.

Exercice 2 : Problème inverse

1. Pour calculer le potentiel $U(x)$, sachant que $\psi(x)$ est une solution propre, il faut simplement inverser l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

$$U(x)=E+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

Calculons la dérivée

$$\frac{d^2}{dx^2}e^{-\alpha x^2}=\frac{d}{dx}\left(-2\alpha x e^{-\alpha x^2}\right)$$
$$=\left(-2\alpha+4\alpha^2x^2\right)e^{-\alpha^2x^2}$$

Remplaçons dans l'expression pour $U(x)$ (on voit qu'un éventuel facteur multiplicatif se simplifie entre $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$ et $\psi(x)$).

$$U(x)=E+\frac{\hbar^2}{2m}\left(4\alpha^2x^2-2\alpha\right)$$
$$=E-\frac{\hbar^2\alpha}{m}+\frac{2\hbar^2\alpha^2}{m}x^2$$

2. Il s'agit du potentiel harmonique $U(x)\propto x^2$, à moins d'une constante additive.
3. On voit que la valeur de E n'est pas déterminée. C'est parce que le problème est le même si on ajoute au potentiel $U(x)$ une constante arbitraire. En particulier la fonction d'onde $\psi(x)$ solution de l'équation de Schrödinger ne dépend pas d'une constante additive dans le potentiel. Physiquement, la dynamique d'un oscillateur harmonique est la même indépend. d'une telle constante, c'est vrai aussi en physique classique.

Exercice 3 : Etat fondamental d'un puits de potentiel

1. Posons les conditions au bord en $x=-\frac{L}{2}$. La condition de continuité de la fonction donne :

$$Ae^{-CL/2}=F\cos\left(k\frac{L}{2}\right)$$

Pour celle sur la dérivée, il faut d'abord calculer les dérivées

$$\frac{d}{dx}Ae^{Cx}=ACe^{Cx}$$
$$\frac{d}{dx}F\cos(kx)=-kF\sin(kx)$$

Et la condition en $x=-L/2$ donne :

$$CAe^{-CL/2}=+kF\sin\left(k\frac{L}{2}\right)$$

Divisons la deuxième équation par la première.

$$C=k\tan\left(k\frac{L}{2}\right)$$

qui est une équation pour E, car C et k sont fonctions de E.

2. Faisons des petites manipulations de l'équation obtenue. Prenons le carré :

$$C^2 = k^2 \tan^2\left(k\frac{L}{2}\right)$$

(pour ça il faut d'abord supposer $\tan\left(k\frac{L}{2}\right) > 0$, ce qui sera le cas ici)

$$\frac{2m}{\hbar^2}(U-E) = \frac{2m}{\hbar^2}E\tan^2\left(\frac{kL}{2}\right)$$
$$k_0^2 - k^2 = k^2\tan^2\left(\frac{kL}{2}\right)$$

où nous avons défini $k_0 = \sqrt{\frac{2mU}{\hbar^2}}$

$$\frac{k_0^2}{k^2} = 1 + \tan^2\left(k\frac{L}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2\left(k\frac{L}{2}\right)}$$

Nous pouvons prendre maintenant la racine carrée, en supposant $\cos(\frac{kL}{2}) > 0$.

$$\frac{k}{k_0} = \cos\frac{kL}{2}$$

Cette équation est dite transcendante et n'a pas de solutions analytiques (c'est à dire qu'on peut écrire sur une feuille de papier).
Cependant, nous pouvons déduire graphiquement les propriétés de la solution. Faisons un plot des deux côtés de l'équation. On voit tout de suite que, pour toute valeur de k_0, et donc de U, les deux courbes sont obligées de se croiser, donc une solution existe toujours.

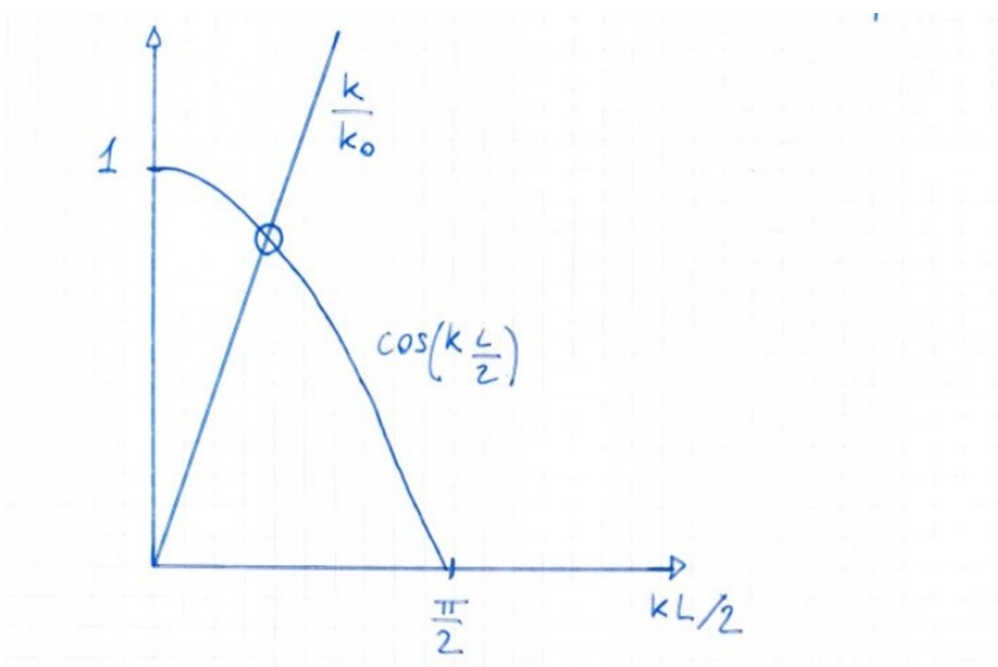

FIGURE 1

3. Dans la limite $U \to 0$ on a que $E < U$ et donc $E \to 0$. Donc $k \to 0$. Pour $k\frac{L}{2} \to 0$ on a $\cos\left(k\frac{L}{2}\right) \to 1$. Les deux courbes doivent donc se croiser pour :

$$\cos\left(\frac{kL}{2}\right) \simeq 1$$

ce qui implique $\frac{k}{k_0} = 1$ et $k = k_0$, donc $E = U$. On peut calculer la première correction à $E = U$.

Faisons l'expansion limite de $\cos(x)$ pour $x \to 0$ et gardons le terme $O\left(x^2\right)$.

$$\cos\left(k\frac{L}{2}\right) \simeq 1 - \frac{k^2L^2}{8}$$

On a donc

$$\begin{aligned} 1 - \frac{k^2L^2}{8} &= \frac{k}{k_0} \\ k^2\frac{L^2}{8} + \frac{k}{k_0} - 1 &= 0 \\ k &= \frac{-\frac{1}{k_0} \pm \sqrt{\frac{1}{k_0^2} + \frac{L^2}{2}}}{L^2/4} \\ &= -\frac{1}{k_0} + \frac{1}{k_0}\sqrt{1 + k_0^2\frac{L^2}{2}} \end{aligned}$$

Utilisons

$$\begin{aligned} \sqrt{1+x} &= 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} \\ &= \frac{-\frac{1}{k_0} + \frac{1}{k_0} + k_0\frac{L^2}{4} - \frac{k_0^3L^4}{32}}{L^2/4} \\ &= k_0\left(1 - \frac{k_0^2L^2}{8}\right) < k_0 \quad (E < U) \end{aligned}$$

4. Dans la limite $U \to \infty$ on a $k_0 \to \infty$. Donc la dérivée de la droite dans la figure est zéro et le croisement a lieu en $k\frac{L}{2} = \frac{\pi}{2}$.

$$\begin{aligned} kL &= \pi \\ k &= \frac{\pi}{L} \\ E &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2} \end{aligned}$$

C'est en effet l'énergie propre du problème avec barrière infinie et puits de largeur L.