

TD3 : Commutateurs et étalement du paquet d'onde

On considère une particule libre décrite par une fonction d'onde (ou *paquet d'onde*) $\Psi(x, t)$. Dans cet état nous supposons que la particule a une position et une impulsion moyennes non nulles : $\langle x \rangle \neq 0$ et $\langle p \rangle \neq 0$. Nous dénotons par $\sigma_x(t)$ et $\sigma_p(t)$ les écarts quadratiques moyens de la position et de l'impulsion de cette particule décrite par ce paquet d'ondes $\Psi(x, t)$:

$$\sigma_x^2(t) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle, \quad (3.50)$$

$$\sigma_p^2(t) = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle. \quad (3.51)$$

Le but de cet exercice est d'étudier l'évolution temporelle de ces quantités $\sigma_x(t)$ et $\sigma_p(t)$.

3.1 Préliminaires autour des commutateurs

1. Montrez que :

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C, \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B. \quad (3.52)$$

Solution

$$\begin{aligned} [A, BC] &= ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = (AB - BA)C + B(AC - CA) \\ &= [A, B]C + B[A, C] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [AB, C] &= ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A(BC - CB) + (AC - CA)B \\ &= A[B, C] + [A, C]B \end{aligned}$$

2. Déduisez de ces identités (3.52) une expression des commutateurs suivants

- (i) $[x, p^2]$
- (ii) $[x^2, p^2]$
- (iii) $[xp, p^2]$
- (iv) $[px, p^2]$

Solution

Rappelons que le commutateur $[x, p]$ vaut $i\hbar$. En utilisant les identités (3.52), on a donc :

- (i) $[x, p^2] = [x, p]p + p[x, p] = i\hbar p + pi\hbar = 2i\hbar p$
- (ii) $[x^2, p^2] = x[x, p^2] + [x, p^2]x = 2i\hbar(xp + px)$
- (iii) $[xp, p^2] = x[p, p^2] + [x, p^2]p = [x, p^2]p = 2i\hbar p^2$
- (iv) $[px, p^2] = p[x, p^2] + [p, p^2] = p[x, p^2] = 2i\hbar p^2$

3. La moyenne d'un opérateur A (dans un état quantique donné) sera noté $\langle A \rangle$. Montrez que si l'opérateur A ne dépend pas explicitement du temps t , c'est-à-dire $\partial_t A = 0$ alors

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle, \quad (3.53)$$

où H est le Hamiltonien du système.

Solution

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\ &= i\hbar \left(\langle \psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{H}{-i\hbar} A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \frac{H}{i\hbar} | \psi(t) \rangle \right) \\ &= \langle \psi(t) | AH - HA | \psi(t) \rangle = \langle [A, H] \rangle \end{aligned}$$

3.2 Evolution temporelle du paquet d'onde

1. A l'aide de l'identité précédente (3.53) calculez les dérivées temporelles suivantes :

- (i) $i\hbar \frac{d}{dt} \langle p \rangle,$
- (ii) $i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_p^2,$
- (iii) $i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_x^2,$
- (iv) $i\hbar \frac{d^2}{dt^2} \sigma_x^2.$

Solution

Pour une particule libre, l'hamiltonien se réduit au terme cinétique, uniquement dépendant de p : $H = \frac{p^2}{2m}$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle [p, H] \rangle = 0 \quad (3.54)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_p^2 = i\hbar \frac{d}{dt} (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2) = \langle [p^2, H] \rangle - 2\langle p \rangle \langle [p, H] \rangle = 0 \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \sigma_x^2 &= i\hbar \frac{d}{dt} (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2) = \langle [x^2, H] \rangle - 2\langle x \rangle \langle [x, H] \rangle = \left\langle \frac{i\hbar}{m} (xp + px) \right\rangle - \langle x \rangle \left\langle \frac{2i\hbar}{m} p \right\rangle \\ &= \frac{i\hbar}{m} \langle (xp + px) \rangle - 2\langle x \rangle \langle p \rangle \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d^2}{dt^2} \sigma_x^2 &= \frac{d}{dt} \left[\frac{i\hbar}{m} (\langle (xp + px) \rangle - 2\langle x \rangle \langle p \rangle) \right] = \frac{1}{m} (\langle [xp + px, H] \rangle - 2\langle [x, H] \rangle \langle p \rangle) \\ &= \frac{2i\hbar}{m^2} \langle p^2 \rangle - \frac{2i\hbar}{m^2} \langle p \rangle^2 = \frac{2i\hbar}{m^2} \sigma_p^2 \end{aligned} \quad (3.57)$$

2. Intégrez deux fois la dernière relation (3.57) pour obtenir $\sigma_x^2(t)$. Les conditions initiales, prises en $t_0 = 0$ sans perte de généralités, seront notées par un indice '0'.

Solution

L'équation (3.55) montre que σ_p^2 est une constante, en intégrant deux fois l'équation (3.57), on a donc :

$$\frac{d\sigma_x^2}{dt} = \frac{2\sigma_p^2}{m^2} t + \frac{d\sigma_{x0}^2}{dt}$$

soit

$$\sigma_x^2(t) = \frac{\sigma_p^2}{m^2} t^2 + \frac{d\sigma_{x0}^2}{dt} t + \sigma_{x0}^2$$

3. Montrez que si $\Psi(x, t = 0)$ est réelle alors les valeurs moyennes $\langle xp + px \rangle$, $\langle p \rangle$ et finalement $\partial_t \sigma_x^2|_0$ sont nulles. Calculez puis tracez $\sigma_x(t)$ pour $t < 0$ et $t > 0$ dans ce cas. Le paquet peut-il se contracter avant de s'étaler ?

Solution

Si $\Psi(x, t = 0) = \phi(x)$ est réelle, alors $\phi^* = \phi$ et on a :

$$\begin{aligned}\langle xp + px \rangle_0 &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} [\phi x \phi' + \phi(x\phi)'] dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} [2x\phi\phi' + \phi^2] dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} (x\phi^2)' dx = 0\end{aligned}$$

Une façon de justifier cette dernière égalité est de constater que $\langle xp + px \rangle_0$ est réel car $xp+px$ est un opérateur hermitien (cf PC2), et $x\phi^2$ est également réel.

L'égalité $\langle xp+px \rangle_0 == -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} (x\phi^2)' dx$ entraîne donc nécessairement la nullité des deux membres (un réel = un imaginaire pur).

$$\langle p \rangle_0 = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \phi' dx = -\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi^2)' dx = 0$$

En utilisant l'équation (3.56), on voit que $\frac{d}{dt}\sigma_{x0}^2$ vaut 0. On obtient alors

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\frac{\sigma_p^2}{m} t^2 + \sigma_{x0}^2} \quad (3.58)$$

$\sigma_x(t)$ passe par un minimum en $t=0$: le paquet d'onde se contracte donc jusqu'à $t=0$, avant de s'étaler.

3.3 Applications numériques

1. Caractérisez l'étalement du paquet d'onde, au bout d'une seconde, pour les deux systèmes suivants :
 - (i) un électron pour lequel $\sigma_x(t = 0) = 1 \text{ \AA}$, c'est-à-dire du même ordre de grandeur que la distance inter-atomiques,
 - (ii) un grain de sable, dont la masse est de $1 \text{ }\mu\text{g}$ et $\sigma_x(t = 0) = 1 \text{ mm}$.

Solution

26

Pour obtenir la valeur de σ_p , on utilise l'inégalité d'Heisenberg : $\sigma_p \sigma_x \gtrsim \frac{\hbar}{2}$. σ_p étant une constante, et σ_x étant minimal en $t=0$, le produit $\sigma_p \sigma_x$ est minimal en $t=0$, et on peut alors considérer qu'il est environ égal à $\frac{\hbar}{2}$.

On a alors une différence d'étalement du paquet d'onde entre $t_0 = 0$ et t qui vaut :

$$\sqrt{\sigma_x^2(t) - \sigma_{x0}^2} = \frac{\sigma_p}{m} t = \frac{\hbar t}{2m\sigma_{x0}}$$

- (i) Pour un électron, on trouve $\frac{\sigma_p}{m} t \approx 600 \text{ km!} \gg \sigma_{x0}$: le paquet d'onde s'étale extraordinairement vite. Même au bout d'une nanoseconde, cela fait déjà 0,6 mm ! **La notion de trajectoire n'a donc guère de sens pour un électron.**
- (ii) Pour un grain de sable, on trouve $\frac{\sigma_p}{m} t \approx 5.10^{-23} \text{ m!} \ll \sigma_{x0}$: **il est parfaitement inutile de tenir compte des inégalités de Heisenberg au niveau macroscopique.** Même au bout de l'âge de l'univers (≈ 15 milliards d'années), $\frac{\sigma_p}{m} t$ ne vaut que le quarantième de σ_{x0} ... L'étalement quantique du paquet d'un objet macroscopique est parfaitement négligeable, et tout à fait inférieur aux erreurs de mesure.

3.4 Paquet d'onde Gaussien

- On considère une particule libre en une dimension. Montrez qu'il existe une solution de l'équation de Schrödinger (dépendant du temps) sous la forme

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a(t)}} \exp \left[-\frac{x^2}{2a(t)} \right], \quad (3.59)$$

où $a(t)$ est complexe.

Solution

On a d'une part :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{x^2}{a(t)} - 1 \right) \frac{a'(t)}{2a^{3/2}(t)} e^{-\frac{x^2}{2a(t)}}$$

D'autre part :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{-x}{a^{3/2}(t)} e^{-\frac{x^2}{2a(t)}}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{x^2}{a(t)} - 1 \right) \frac{1}{a^{3/2}(t)} e^{-\frac{x^2}{2a(t)}}$$

En utilisant l'équation de Schrödinger, on en déduit une équation sur la fonction $a(t)$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} = i\hbar \frac{a'(t)}{2} \Rightarrow a(t) = a_0 + \frac{i\hbar}{m} t$$

- Montrez que $\Psi(x, t)$ donnée en (3.59) peut s'écrire comme une superposition d'ondes planes. La notion de *paquet d'ondes* prend alors tout son sens dans ce cas.

Solution

On cherche à décomposer la fonction Ψ sur une base d'ondes planes : il faut donc déterminer les coefficients c_k tels que

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (3.60)$$

Dans un premier temps, on effectue la transformée de Fourier de Ψ sur les positions (on obtiendra ainsi des $c_k(t)$ tels que $\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k(t) e^{ikx} dk$).

$$c_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi a(t)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-x^2}{2a(t)} - ikx} dx$$

On fait le changement de variable $u = \frac{x}{\sqrt{2a(t)}} + \frac{ik\sqrt{2a(t)}}{2}$ ($dx = \sqrt{2a(t)} du$) de sorte que

$$e^{\frac{-x^2}{2a(t)} - ikx} = e^{-u^2} e^{-\frac{k^2 a(t)}{2}}.$$

En utilisant $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$, et en remplaçant $a(t)$ par $a_0 + \frac{i\hbar}{m}t$ on obtient alors

$$c_k(t) = e^{-\frac{k^2 a(t)}{2}} = e^{-\frac{k^2 a_0}{2}} e^{-i\omega t}$$

où on a posé $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} (= \frac{E}{\hbar})$.

On obtient bien une superposition d'ondes planes sous la forme (3.60) avec $c_k = e^{-\frac{k^2 a_0}{2}}$.

3. On considère le cas où $\Psi(x, t = 0)$ est réelle. Calculez $\sigma_x(t)$ et $\sigma_p(t)$ dans ce cas.

Solution

Si $\Psi(x, t = 0)$ alors a_0 est réel et on peut écrire :

$$\frac{1}{a} = \frac{1}{a_0 + \frac{i\hbar}{m}t} = \frac{a_0 - \frac{i\hbar}{m}t}{a_0^2 + \frac{\hbar^2}{m^2}t^2}$$

On en déduit que $|\Psi|^2$ prend la forme standard d'une gaussienne :

$$|\Psi|^2 = \frac{\exp \left[-\frac{x^2}{a_0 + \frac{\hbar^2}{m^2}t^2} \right]}{\left(a_0^2 + \frac{\hbar^2}{m^2}t^2 \right)^{1/2}}$$

de variance :

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{2} \left(a_0 + \frac{\hbar^2}{m^2}t^2 \right)$$

En comparant avec la forme trouvée précédemment (cf équation (3.58)), on en déduit :

$$\sigma_{x0}^2 = \frac{1}{2}a_0 \text{ et } \sigma_p^2 = \frac{\hbar^2}{2a_0}.$$

4. Constatez que l'inégalité de Heisenberg est vérifiée.

Solution

On vérifie alors aisément qu'initialement $\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$ et pour tout t , $\sigma_x \sigma_p > \frac{\hbar}{2}$.

