

Corrigé TD Formalisme et Postulats. Cours Physique et Applications Quantiques, UE-D FISE IMT Atlantique

Gines Martinez¹ and Guillaume Batigne¹

¹Subatech (IMT Atlantique, Nantes Université, CNRS/IN2P3), Nantes,
France

October 29, 2024

1 TD Espace des fonctions d'onde $\mathcal{F}$

1. Démontrer que $\mathcal{F}$ est un espace vectoriel.

Pour la fonction (vecteur) $\psi(\vec{r})$, la multiplication par un scalaire $\lambda \in \mathbb{C}$ est défini très intuitivement : $\lambda\psi(\vec{r})$

La somme de fonction à carré sommable, la somme de fonctions est aussi une fonction à carré sommable (voir le cours d'après équation 1) En outre, on peut définir le produit scalaire (voir équation 2 du cours).

2. Démontrer les propriétés du produit scalaire dans $\mathcal{F}$.

Tout d'abord $|\psi|^2 = (\psi, \psi) \in \mathbb{R}$ et $(\psi, \psi) \geq 0$, car la fonction est de carrée sommable. Évidemment si $(\psi, \psi) = 0$, alors $\psi(\vec{r}) = 0$, pour des fonctions qui ne sont pas *pathologiques*)fonctions continues, dérivables, ...).

L'inégalité de Cauchy-Schwartz $|(\phi, \psi)| \leq |\phi||\psi|$ peut se démontrer en partant du fait que $|\psi + t\phi|^2 \geq 0$ avec $t \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} |\psi + t\phi|^2 &= (\psi + t\phi, \psi + t\phi) = t^2(\phi, \phi) + 2t\Re\{(\psi, \phi)\} + (\psi, \psi) \geq 0 \\ 4(\Re\{(\psi, \phi)\})^2 - 4(\phi, \phi)(\psi, \psi) &\leq 0 \\ (\Re\{(\psi, \phi)\})^2 &\leq (\phi, \phi)(\psi, \psi) \\ \Re\{(\psi, \phi)\} &\leq |\phi||\psi| \end{aligned}$$

Soit $\lambda \in \mathbb{C}$ avec $|\lambda| = \sqrt{\lambda\lambda^*} = 1$, tel que

$$\begin{aligned} |(\psi, \phi)| &\in \mathbb{R} \\ |(\psi, \phi)| &= \lambda(\psi, \phi) = (\lambda\psi, \phi) = \Re\{(\lambda\psi, \phi)\} \\ |(\psi, \phi)| &= \Re\{(\lambda\psi, \phi)\} \leq |\lambda\psi||\phi| = |\psi||\phi| \end{aligned}$$

3. Démontrer que l'opérateur parité $\hat{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$ est un opérateur linéaire.

Soit $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \\ \hat{P}\psi(\vec{r}) &= \psi(-\vec{r}) = \lambda_1 \psi_1(-\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(-\vec{r}) = \lambda_1 \hat{P}\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \hat{P}\psi_2(\vec{r})\end{aligned}$$

4. Démontrer que l'opérateur $\hat{X}_i\psi = x_i\psi(\vec{r})$ est un opérateur linéaire.

Soit $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \\ \hat{X}_i\psi(\vec{r}) &= x_i\psi(\vec{r}) = \lambda_1 x_i\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 x_i\psi_2(\vec{r}) = \lambda_1 \hat{X}_i\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \hat{X}_i\psi_2(\vec{r})\end{aligned}$$

5. Démontrer que l'opérateur dérivé partielle $\hat{D}_i\psi(\vec{r}) = \frac{\partial\psi}{\partial x_i}$ est un opérateur linéaire.

Soit $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) &= \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \\ \hat{D}_i\psi(\vec{r}) &= \frac{\partial\psi}{\partial x_i} = \lambda_1 \frac{\partial\psi_1}{\partial x_i} + \lambda_2 \frac{\partial\psi_2}{\partial x_i} = \lambda_1 \hat{D}_i\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \hat{D}_i\psi_2(\vec{r})\end{aligned}$$

6. Calculer le commutateur entre l'opérateur $\hat{X}$ et l'opérateur $\hat{D}_x : [\hat{X}, \hat{D}_x]$.

$$\begin{aligned}[\hat{X}, \hat{D}_x]\psi &= \hat{X}\hat{D}_x\psi(\vec{r}) - \hat{D}_x\hat{X}\psi(\vec{r}) \\ &= x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial x\psi}{\partial x} = x\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi = -\hat{I}\psi\end{aligned}$$

Alors $[\hat{X}, \hat{D}_x] = -\hat{I}$

7. Vérifier que pour une base orthonormée $\{u_i(\vec{r})\}$ avec $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$ alors $c_i = (u_i, \psi)$

$$\begin{aligned}(u_i, \psi) &= \int d\vec{r} u_i^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \int d\vec{r} u_i^*(\vec{r}) \left(\sum_{j=1}^{\infty} c_j u_j(\vec{r}) \right) = \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} c_j \int d\vec{r} u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \delta_{i,j} = c_i\end{aligned}$$

8. Vérifier que $|\psi(\vec{r})|^2 = (\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2$

$$\begin{aligned} (\psi, \psi) &= \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \int d\vec{r} \left(\sum_{i=1}^{\infty} c_i^* u_i^*(\vec{r}) \right) \left(\sum_{j=1}^{\infty} c_j u_j(\vec{r}) \right) = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* c_j \int d\vec{r} u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* c_j \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 \end{aligned}$$

9. Vérifier que pour $\phi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r})$, alors $(\phi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$

$$\begin{aligned} (\phi, \psi) &= \int d\vec{r} \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \int d\vec{r} \left(\sum_{i=1}^{\infty} b_i^* u_i^*(\vec{r}) \right) \left(\sum_{j=1}^{\infty} c_j u_j(\vec{r}) \right) = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} b_i^* c_j \int d\vec{r} u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} b_i^* c_j \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^{\infty} b_i^* c_i \end{aligned}$$

10. Démontrer la relation de fermeture pour une base orthonormée $\sum_i u_i^*(\vec{r}) u_i(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$. Inversement, un ensemble orthonormé vérifiant la relation de fermeture est nécessairement une base orthonormée :

Soit la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$

→

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \int d\vec{r}' \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}) = \int d\vec{r}' \psi(\vec{r}') \sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} u_i(\vec{r}) \int d\vec{r}' u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = \sum_{i=1}^{\infty} (u_i, \psi) u_i(\vec{r}) \end{aligned}$$

←

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i u_i(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} (u_i, \psi) u_i(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} \int d\vec{r}' u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') u_i(\vec{r}) = \\ &= \int d\vec{r}' \psi(\vec{r}') \sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) \end{aligned}$$

donc

$$\sum_{i=1}^{\infty} u_i^*(\vec{r}') u_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$$

11. Vérifier que les relations d'orthonormalisation et de fermeture sont respectées pour les ondes planes à une dimension.

Soit

$$w_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

Relation d'orthonormalisation

$$(w_p, w_{p'}) = \int dx w_p(x) w_{p'}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{i(p'-p)x/\hbar} = \frac{1}{2\pi} \int d\xi e^{i(p'-p)\xi} = \delta(p - p')$$

Relation de fermeture

$$\int dp w_p^*(x') w_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{ip(x-x')/\hbar} = \frac{1}{2\pi} \int d\xi e^{i(x-x')\xi} = \delta(x' - x)$$

12. Exprimer l'opérateur $\hat{X}$ et $\hat{D}_x$ dans l'espace de p

Pour rappel, le changement du espace de positions au espace des impulsions p représente un changement de base. La fonction d'onde dans le espace des impulsions $\bar{\psi}(p)$ représente la composant de la fonction pour chaque onde plane et du coup cette composant est calcule, comme pour les bases discrètes (voir exercice 7),

$$\bar{\psi}(p) = (w_p, \psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx w_p^*(x) \psi(x) = \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \quad (1)$$

Pour $\hat{X}$:

$$\begin{aligned} \hat{X}\psi(x) &= x\psi(x) \\ \hat{X}\bar{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx x \psi(x) e^{-ipx/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (i\hbar) \int dx \psi(x) \frac{de^{-ipx/\hbar}}{dp} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (i\hbar) \frac{d \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar}}{dp} = (i\hbar) \frac{d\bar{\psi}(p)}{dp} \\ \hat{X} &= i\hbar \frac{d}{dp} \end{aligned}$$

Pour $\hat{D}_x$:

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \hat{D}_x \psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} \\
\bar{\phi}(p) &= \hat{D}_x \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \frac{d\psi(x)}{dx} e^{-ipx/\hbar} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \left\{ \frac{d\psi(x)e^{-ipx/\hbar}}{dx} + \psi(x) \frac{ip}{\hbar} e^{-ipx/\hbar} \right\} = \\
&= \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{ip}{\hbar} \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} = \\
&= \frac{ip}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \psi(x) e^{-ipx/\hbar} = \frac{i}{\hbar} p \bar{\psi}(p) = \\
&= \hat{D}_x = \frac{i}{\hbar} p
\end{aligned}$$

2 TD Notation de Dirac

1. Démontrer qu'au ket $\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$ correspond le bra $\lambda_1^*\langle\psi_1| + \lambda_2^*\langle\psi_2|$

Soit le ket $|\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$. Le bra $\langle\psi| = \langle(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle)|$ sera une fonctionnelle linéaire telle que

$$\begin{aligned}
\langle\psi|(|\phi\rangle) &= \langle\psi|\phi\rangle = (\psi, \phi) = \int dx \psi^*(x) \phi(x) = \\
&= \int dx (\lambda_1^*\psi_1^*(x) + \lambda_2^*\psi_2^*(x)) \phi(x) = \lambda_1^* \int dx \psi_1^*(x) \phi(x) + \lambda_2^* \int dx \psi_2^*(x) \phi(x) \\
&= \lambda_1^* \langle\psi_1, \phi\rangle + \lambda_2^* \langle\psi_2, \phi\rangle = \lambda_1^* \langle\psi_1|\phi\rangle + \lambda_2^* \langle\psi_2|\phi\rangle = (\lambda_1^*\langle\psi_1| + \lambda_2^*\langle\psi_2|)|\phi\rangle
\end{aligned}$$

2. Démontrer que $\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^*$

Par définition, le bra associé au ket $|\psi'\rangle = |\hat{A}|\psi\rangle$ est le bra $\langle\psi'| = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|$ en conséquence :

$$\begin{aligned}
\langle\psi'|\phi\rangle &= \langle\phi|\psi'\rangle^* \\
\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle &= \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^*
\end{aligned}$$

3. Démontrer que $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$, $(\lambda\hat{A})^\dagger = \lambda^*\hat{A}^\dagger$, $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$ et $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

$$\langle\psi|(\hat{A}^\dagger)^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$$

$$\langle\psi|(\lambda\hat{A}^\dagger)|\phi\rangle = \langle\phi|\lambda\hat{A}|\psi\rangle^* = \lambda^*\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \lambda^*\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle$$

$$\langle \psi | (\hat{A} + \hat{B})^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | (\hat{A} + \hat{B}) | \psi \rangle^* = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* + \langle \phi | \hat{B} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle + \langle \psi | \hat{B}^\dagger | \phi \rangle$$

$$\langle \psi | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | (\hat{A}\hat{B}) | \psi \rangle^* = \langle \phi | \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \phi \rangle$$

4. Démontrer que $(|\psi\rangle\langle\phi|)^\dagger = |\phi\rangle\langle\psi|$

Soit $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\phi|$, alors $\hat{A}|\varphi\rangle = \langle\phi|\varphi\rangle|\psi\rangle$. Le bra associé au ket $|\psi\rangle$ est $\langle\psi|$, et du coup $\langle\varphi|\hat{A}^\dagger = \langle\phi|\varphi\rangle^*\langle\psi| = \langle\varphi|\phi\rangle\langle\psi| = \langle\varphi|(\phi\rangle\langle\psi|)$

5. Démontrer que le produit de deux opérateurs hermitiens $\hat{A}\hat{B}$ est hermitien seulement si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}$$

et si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, alors $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$, d'où $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}$

6. Démontrer que pour deux opérateurs hermitiens $\hat{A}$ et $\hat{B}$, l'opérateur $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ est hermitien

$$(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger + \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

3 TD Postulats

1. Démontrer que $[\hat{P}, \hat{X}] = -i\hbar$

Dans l'espace de positions, $\hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ et $\hat{X} = x$:

$$\begin{aligned} [\hat{P}, \hat{X}]\psi(x) &= \hat{P}\hat{X}\psi(x) - \hat{X}\hat{P}\psi(x) = \\ &= -i\hbar \frac{dx\psi}{dx} + i\hbar x \frac{d\psi}{dx} = \\ &= -i\hbar\psi - i\hbar x \frac{d\psi}{dx} + i\hbar x \frac{d\psi}{dx} = \\ &= -i\hbar\psi \end{aligned}$$

2. Démontrer que $\hat{P}\bar{\psi}(p) = p\bar{\psi}(p)$

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \hat{P}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \\
\bar{\phi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-i\hbar) \int dx \frac{d\psi(x)}{dx} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-i\hbar) \int dx \left(\frac{de^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x)}{dx} + \psi(x) \frac{ip}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (-i\hbar) \left(\left[e^{-\frac{i}{\hbar}px}\psi(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{ip}{\hbar} \int dx \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} \right) = p\bar{\psi}(p) \\
&\hat{P}\bar{\psi}(p) = p\bar{\psi}(p)
\end{aligned}$$

3. Démontrer que $[\hat{P}, \hat{V}(\hat{X})] = -i\hbar \frac{d\hat{V}(\hat{X})}{d\hat{X}}$

$$\begin{aligned}
[\hat{P}, \hat{X}^2] &= \hat{P}\hat{X}^2 - \hat{X}^2\hat{P} = \hat{P}\hat{X}\hat{X} - \hat{X}\hat{X}\hat{P} = \\
&\hat{P}\hat{X}\hat{X} - \hat{X}\hat{P}\hat{X} + \hat{X}\hat{P}\hat{X} - \hat{X}\hat{X}\hat{P} = \\
&[\hat{P}, \hat{X}]\hat{X} + \hat{X}[\hat{P}, \hat{X}] = -2i\hbar\hat{X}
\end{aligned}$$

Soit $[\hat{P}, \hat{X}^n] = -ni\hbar\hat{X}^{n-1}$

$$\begin{aligned}
[\hat{P}, \hat{X}^{n+1}] &= \hat{P}\hat{X}^{n+1} - \hat{X}^{n+1}\hat{P} = \hat{P}\hat{X}^n\hat{X} - \hat{X}\hat{X}^n\hat{P} = \\
&\hat{P}\hat{X}^n\hat{X} - \hat{X}^n\hat{P}\hat{X} + \hat{X}^n\hat{P}\hat{X} - \hat{X}^n\hat{X}\hat{P} = \\
&[\hat{P}, \hat{X}^n]\hat{X} + \hat{X}^n[\hat{P}, \hat{X}] = -(n+1)\hat{X}^n
\end{aligned}$$

Si $\hat{V}(\hat{X}) = \sum_{i=0}^{\infty} v_i \hat{X}^i$

$$[\hat{P}, \hat{V}(\hat{X})] = \sum_{i=0}^{\infty} v_i [\hat{P}, \hat{X}^i] = (-i\hbar) \sum_{i=1}^{\infty} v_i i \hat{X}^{i-1} = -i\hbar \frac{d\hat{V}(\hat{X})}{d\hat{X}}$$

4. Calculer les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion

Soit l'état quantique d'un système $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{X} \left(\int dx \psi(x) |x\rangle \right) = \\
&\int dx \psi(x) \langle \psi | \hat{X} | x \rangle = \int dx x \psi(x) \langle \psi | x \rangle = \int dx x \psi(x) \psi^*(x) = \\
&\langle x \rangle = \int dx x |\psi(x)|^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P} \left(\int dp \bar{\psi}(p) | p \rangle \right) = \\
&= \int dp \bar{\psi}(p) \langle \psi | \hat{P} | p \rangle = \int dp p \bar{\psi}(p) \langle \psi | p \rangle = \int dp p \bar{\psi}(p) \bar{\psi}^*(p) = \\
&= \int dp p |\bar{\psi}(p)|^2
\end{aligned}$$

Qui équivaut à :

$$\langle p \rangle = (-i\hbar) \int dx \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx}$$

Parce que nous avons démontré que pour

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \int dx \psi(x) |x\rangle = \\
|\phi\rangle &= \hat{P} |\psi\rangle \\
|\phi\rangle &= \int dx \frac{d\psi(x)}{dx} |x\rangle
\end{aligned}$$

5. Calculer la valeur moyenne de l'énergie cinétique.

$$\langle E_c \rangle = \langle \psi | \frac{\hat{P}^2}{2m} | \psi \rangle = \langle p \rangle = \int dp \frac{p^2}{2m} |\bar{\psi}(p)|^2$$

qui équivaut à

$$\langle p \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \psi^*(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

4 TD La particule quantique en repos libre. Corrigé

Fonction d'onde avec une densité de probabilité gaussienne. Comme fonction d'onde localisée, nous pouvons supposer par simplicité mathématique une densité de probabilité gaussienne autour de $x_0 = 0$

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |\langle x | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \quad (2)$$

ce qui donne une fonction d'onde

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}} e^{if(x)} \quad (3)$$

où $f(x)$ est une fonction réelle. Evidemment, cette fonction d'onde est normalisée à l'unité et vous pourriez démontrer que $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

Pour simplicité, nous supposons que $f(x) = \text{cte} = 0$

Fonction d'onde dans l'espace des impulsions. Une propriété très intéressante de la gaussienne est que la transformée de Fourier d'une fonction gaussienne est une autre fonction gaussienne, et, pour cette raison, la distribution en impulsion d'une fonction gaussienne donne :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \quad (4)$$

donc

$$|\bar{\psi}(p)|^2 = \sqrt{\frac{4\sigma_x^2}{2\pi\hbar^2}} e^{-\frac{4\sigma_x^2 p^2}{2\hbar^2}} \quad (5)$$

Cela veut dire qu'une fonction gaussienne de largeur inversement proportionnelle à la largeur spatiale:

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_x} \quad (6)$$

C'est le principe d'indétermination de Heisenberg pour la fonction gaussienne. Pour toute autre fonction :

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (7)$$

Calculer les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion Pour la fonction gaussienne les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion sont nulles :

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= 0 \\ \langle p \rangle &= 0 \end{aligned}$$

car les gaussiennes au carré sont des fonctions d'onde paires.

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} x dx \\ \langle p \rangle &= \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_p^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{p^2}{2\sigma_p^2}} p dp = \sqrt{\frac{4\sigma_x^2}{2\pi\hbar^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{4\sigma_x^2 p^2}{2\hbar^2}} p dp \end{aligned}$$

Calculer la valeur moyenne de l'énergie cinétique L'opérateur énergie cinétique étant $\hat{P}^2/2m$ et par simplification des calculs, nous allons exprimer la fonction d'onde dans l'espace des impulsions :

$$\langle E_c \rangle = \langle \psi | \frac{\hat{P}^2}{2m} | \psi \rangle = \sqrt{\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}} \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\sigma_x^2 p^2}{\hbar^2}} p^2 dp \quad (8)$$

avec le changement de variable $\xi = \frac{2\sigma_x p}{\hbar}$ ($p = \frac{\hbar\xi}{2\sigma_x}$) nous obtenons :

$$\langle E_c \rangle = \sqrt{\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}} \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi^2 \left(\frac{\hbar}{2\sigma_x} \right)^3 d\xi = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{16m} \left(\frac{\hbar}{\sigma_x} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi^2 d\xi \quad (9)$$

L'intégrale est facile à résoudre par partie :

$$\begin{aligned}
 v &= \xi \\
 du &= \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} d\xi \\
 \int_{-\infty}^{+\infty} v du &= [uv]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} u dv \\
 dv &= d\xi \\
 u &= -e^{-\frac{\xi^2}{2}}
 \end{aligned}$$

ainsi

$$\begin{aligned}
 [uv]_{-\infty}^{+\infty} &= [-\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \\
 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi^2 d\xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} d\xi = \sqrt{2\pi}
 \end{aligned}$$

et par conséquent

$$\langle E_c \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{16m} \left(\frac{\hbar}{\sigma_x} \right)^2 \sqrt{2\pi} = \frac{\hbar^2}{8m\sigma_x^2} \quad (10)$$

Classiquement, l'énergie cinétique est nulle quand l'impulsion est nulle. En revanche, nous obtenons un résultat clef de la mécanique quantique car l'énergie n'est pas nulle et cela malgré une l'impulsion moyenne nulle :

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{\hat{P}^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{8m\sigma_x^2} \quad (11)$$

Le fait de confiner une particule dans un espace limité, nécessite de l'énergie non nulle, qui devienne infinie pour $\sigma_x \rightarrow 0$.

Nous pouvons calculer également la racine de la valeur moyenne de $\hat{P}^2$:

$$\sqrt{\langle p^2 \rangle} = \sqrt{\langle \hat{P}^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2\sigma_x} \quad (12)$$

En utilisant les unités naturelles, les calculs peuvent devenir plus simples et dans le cas particulier de l'équation 11

$$\langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{\hat{P}^2}{2m} \right\rangle = E = \frac{(\hbar c)^2}{8mc^2\sigma_x^2} \quad (13)$$

et

$$\sigma_x = \frac{\hbar c}{2\sqrt{2mc^2E}} \quad (14)$$

Calculer l'évolution temporelle de la fonction d'onde. La fonction d'onde dans l'espace des impulsions à $t = 0$ s'écrit comme

$$|\bar{\psi}\rangle = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sigma_x^2 p^2}{\hbar^2}} |p\rangle dp \quad (15)$$

L'évolution temporelle est donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (16)$$

avec $\hat{H} = \hat{P}^2/(2m)$ pour la particule libre. Ainsi, $|p\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur hamiltonien du système avec la valeur propre $E = p^2/2m$ et nous avons :

$$|p(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |p\rangle = e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar}t} |p\rangle \quad (17)$$

et d'où

$$|\psi(t)\rangle = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sigma_x^2 p^2}{\hbar^2}} e^{-\frac{ip^2}{2m\hbar}t} |p(t=0)\rangle dp \quad (18)$$

$$|\psi(t)\rangle = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{\sigma_x^2}{\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)p^2} |p(t=0)\rangle dp \quad (19)$$

Dans l'espace des position, la fonctions d'onde $\psi(x, t)$ du ket $|\psi(t)\rangle$ est une fonction également gaussienne avec une largeur qui augmente avec le temps : c'est l'élargissement du paquet d'onde

$$\sigma_x(t) = \sigma_x(t=0) \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_x(t=0)}\right)^2} \quad (20)$$

Si à un instant donnée, nous connaissons la position d'une particule avec une précision σ_x , nous aurons une incertitude sur l'impulsion $\sigma_p \leq \hbar/(2\sigma_x)$. Par conséquent, plus le temps avance, plus la prédiction sur l'incertitude de positions se dégrade.

4.1 Applications numériques

Balle de tennis dans l'amphi. Nous allons calculer la précision maximale avec laquelle, selon la physique quantique, nous pouvons déterminer la position d'une balle de tennis placé en repos sur une table. L'application bête de l'expression de De Broglie pourrait nous mener à la paradoxe suivante : si la balle est en repos sur une table, du coup son impulsion est nulle et l'expression de De Broglie ($\lambda = h/p$), nous donnerait comme résultat une longueur d'onde infinie et en conséquence une balle qui se trouve partout dans la salle, ce qui est forcément faux. En fait, même si en moyenne l'impulsion de la balle est nulle, la balle a à chaque instant une impulsion qui n'est pas nulle, et au minimum l'impulsion est donnée par les fluctuations thermiques.

Nous pouvons supposer que la taille de l'amphi est de 5 m. L'ordre de grandeur de l'impulsion minimale de la balle de tennis est de seulement $h/(2\sigma_x) = 1.05 \cdot 10^{-35}$ kg·m/s. Cette valeur est très petite. Par exemple, une balle de tennis en repos dans cette salle possède une impulsion qui sera largement supérieure à cette valeur. Il y a les vibrations, le son, le contact avec l'air, les photons du soleil ou de la lumière artificielle etc. Évidemment nous pourrions mettre la balle de tennis dans le vide et dans un satellite, il nous resterait les vibrations thermiques qui sont de l'ordre de $k_B T$, avec k_B la constante de Boltzmann : $1.380649 \cdot 10^{-23}$ J K⁻¹ (également sans erreur car elle définit l'unité du degré Kelvin qui vaut en électron volts $8.617333262 \cdot 10^{-5}$ eV K⁻¹). Pour une température de 300 K, la valeur de $k_B T$ est d'environ $\sim 4 \cdot 10^{-21}$ J (≈ 25 meV). Avec une telle énergie moyenne, en supposant une masse de 100 g pour la balle de tennis (une balle un peu lourde) et en utilisant l'équation 11 (avec un facteur 3 additionnel pour considérer les 3 dimensions de l'espace), nous pouvons sans grand problème avoir une fonction d'onde de la balle de tennis très localisée :

$$\sigma_x \sim \frac{\sqrt{3}\hbar}{2\sqrt{2mk_B T}} \approx 0.3 \cdot 10^{-23} \text{ m} \quad (21)$$

Ce n'est pas surprenant car personne n'a pu être sensible à la fonction d'onde d'une balle de tennis. Vous pouvez maintenant calculer à quelle température la localisation de la balle de tennis est limitée à $\sigma_x \sim 1$ m et l'interférence lors que la balle passe par deux trous en même temps est plausible. Cette température sera de l'ordre

$$T \sim \frac{3\hbar^2}{8mk_B \sigma_x^2} \quad (22)$$

et cela donne une température ridiculement faible de 10^{-45} K.

Atome d'un gaz Il est maintenant intéressant de faire le même calcul pour un atome dans un gaz en utilisant l'équation 21. Nous allons supposer un atome l'hydrogène $M_H = 1.7 \cdot 10^{-27}$ kg ≈ 1000 MeV/c²:

$$\sigma_x \sim \frac{\sqrt{3}\hbar c}{2\sqrt{2M_H c^2 k_B T}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2 \times 10^9 \times 0.025}} \text{ eV}^{-1} \approx 0.5 \cdot 10^{-3} \text{ eV}^{-1}$$

En se rappelant que $\hbar c = 2000 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$, nous obtenons $\sigma_x \sim 1 \text{\AA}$ qui devient comparable à la taille de l'atome, mais inférieure à la distance moyenne entre les atomes dans un gaz qui est de l'ordre de $30 \text{\AA}$. Cela explique pourquoi nous pouvons considérer les atomes dans un gaz comme de petites balles de tennis et que la mécanique newtonienne et la physique statistique fonctionnent très bien.

En revanche, si nous refroidissons le gaz à une température de, par exemple, 1 mK,

$$\sigma_x \sim \frac{\sqrt{3}\hbar c}{2\sqrt{2mc^2 k_B T}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2 \times 10^9 \times 10^{-7}}} \text{ eV}^{-1} \approx 0.5 \cdot 10^{-3} \text{ eV}^{-1} \approx 15 \text{ nm}$$

Avec $\sigma_x \sim 150 \text{\AA}$, il s'agit d'un gaz quantique pour lequel nous pouvons imaginer une expérience type fentes de Young (F. Shimizu, K. Shimizu, Takuma Phys, Rev A46 R17 (1992)). Le refroidissement des atome est une avancé majeure technologique permettant d'utiliser la technologie quantique pour les horloges atomiques et la mesure de la gravité (gravitomètre quantique).

Electrons dans un métal Le même calcul pour des électrons dans un métal à température ambiante ($m_e = 9 \cdot 10^{-31}$ kg = 511000 eV et $T = 300$ K) donne une fonction d'onde pour les électrons avec

$$\sigma_x \sim \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2mk_BT}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{10^6 \times 2.5 \cdot 10^{-2}}} \text{ eV}^{-1} \approx 0.5 \cdot 10^{-2} \text{ eV}^{-1} \approx 10 \text{ \AA}$$

supérieure à la distance entre les atome de cuivre d'un métal. Un électron dans un métal aura un comportement quantique. Imaginer les électrons comme associé à un seul ion à température ambiante, est une erreur.

Electron dans atome Un atome est à la première approximation un état lié électromagnétique entre un noyau chargé positivement et des électrons chargés négativement. Supposons le cas simple de l'atome d'hydrogène et considérons seulement le potentiel attractif de Coulomb :

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

D'une certaine façon, grâce à l'interaction coulombienne attractive, le proton réussit à confiner l'électron dans l'atome, et en conséquence l'énergie quantique pour pouvoir confiner l'électron devrait être fournie par l'interaction coulombienne.

Supposons que la distance moyenne entre l'électron et le proton est σ_{atome} , on s'attend que l'état lié devra satisfaire la condition d'équilibre

$$V(r) = E_{\text{quantique}}$$

dont l'énergie quantique est approximativement donnée par l'expression précédente

$$E_{\text{quantique}} = \frac{\hbar^2 c^2}{8m_e c^2 \sigma_{\text{atome}}^2}$$

La première conclusion ici est très intéressante. L'énergie quantique est inversement proportionnelle au carré de la distance du confinement et l'énergie de coulomb est inversement proportionnelle à la distance entre le proton et l'électron. Comme $\hbar$ est petit, pour un système macroscopique, on s'attend que l'énergie quantique soit très petit par rapport à l'énergie de coulomb. En revanche, au fur et à mesure que la distance de confinement diminue, on s'attend que l'énergie quantique devient comparable à l'énergie de coulomb et cela donne la taille attendu pour l'état lié dans son état fondamental. Une plus basse énergie n'est plus possible car il n'y a pas assez d'énergie pour confiner encore l'électron :

$$\frac{3\hbar^2 c^2}{8m_e c^2 \sigma_{\text{atome}}^2} \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sigma_{\text{atome}}}$$

On défini la constante de couplage électromagnétique, connue comme constante de structure fine, comme :

$$\alpha_{QED} = \alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

On obtient que

$$\sigma_{atome} \approx \frac{3\hbar c}{8m_e c^2 \alpha}$$

En utilisant les unités naturelles ($\hbar = 1$, $c=1$, et $\hbar c \approx 2000 \text{ \AA} \cdot \text{eV}$), la masse de l'électron en unités d'énergie de 511000 eV, nous obtenons

$$\sigma_{atome} \approx \frac{3 \times 137 \times 2000}{8 \times 511000} = 0.2 \text{ \AA}$$

Ce qui colle très bien avec le 0.5 $\text{\AA}$ de l'atome de Böh.

L'énergie associée est

$$E = \frac{\hbar^2 c^2}{8m\sigma_x^2} \approx \frac{2000^2 [\text{eV}^2 \cdot \text{\AA}^2]}{8 \times 5 \times 10^5 [\text{eV}] \times 0.25 [\text{\AA}^2]} \approx \frac{2000^2}{10^6} \text{ eV} = 4 \text{ eV}$$

l'énergie de l'électron dans l'atome est de l'ordre de 10 eV. Cela correspond bien avec l'énergie de l'électron dans l'atome. Pour rappel, l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène est de 13.6 eV. L'électron dans l'atome se trouve alors à l'énergie minimale permise par la mécanique quantique. Nous observons que l'atome est un cas extrême où l'énergie fournie par l'interaction coulombienne est compensée pour l'énergie nécessaire pour confiner l'électron à $a \sim 0.5 \text{ \AA}$ autour du proton : énergie zéro quantique = énergie coulombienne :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 c^2}{8m_e c^2 \sigma_{atome}^2} &\approx \frac{\alpha}{\sigma_{atome}} \\ \sigma_{atome} &\approx \frac{\hbar c}{8m_e \alpha} \approx 5 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Nous pouvons affirmer qu'à température ambiante, la structure interne des atomes se trouve à $T=0$ car pour les amener aux premiers niveaux d'excitation disponibles selon la mécanique quantique, il faut une énergie de l'ordre de 1 eV et, pour cela, il faut des températures proches de 7000 K ($k_B T \approx 1 \text{ eV}$). Evidemment cela n'est pas vraie pour les molécules car d'autre degrés des libertés apparaissent comme les vibrations ou les rotations et l'états quantiques sont multiples et ont une énergie plus petite et du coup sont excités à température ambiante.

Nucléon dans un noyau. Pour un nucléon dans un noyau, l'estimation est similaire à la précédente. Nous allons supposer une taille pour le noyau de 10^{-15} m . La masse du nucléon est 2000 fois plus grande que celle de l'électron.

$$E = \frac{\hbar^2 c^2}{8M_N \sigma_x^2} \approx \frac{200^2 [\text{MeV}^2 \cdot \text{fm}^2]}{8 \times 1000 [\text{MeV}] \times 1 [\text{fm}^2]} \approx \frac{200^2}{10^4} \text{ MeV} = 4 \text{ MeV}$$

qui est cohérent avec l'énergie de liaison nucléaire de l'ordre de 8 MeV.

Quarks dans le nucléon Dans le modèle le plus simple du nucléon, le nucléon est constitué de 3 quarks dont la masse est de l'ordre de 5 MeV et qui sont confinés dans un rayon de l'ordre du fm également :

$$E = \frac{\hbar^2 c^2}{8m\sigma_x^2} \approx \frac{200^2 [\text{MeV}^2 \cdot \text{fm}^2]}{8 \times 5 [\text{MeV}] \times 1 [\text{fm}^2]} \approx \frac{200^2}{40} \text{ MeV} = 1000 \text{ MeV}$$

Nous obtenons un résultat extraordinaire car l'énergie quantique devient largement supérieure à la masse de la particule. La physique classique n'est plus valable. Pour cette raison la mécanique quantique basée sur la physique classique échoue en essayant de comprendre la structure interne du nucléon. Il faudra utiliser la mécanique quantique relativiste qui utilise comme outil mathématique la théorie quantique de champs. Nous pouvons conclure que pour être relativiste, soit nous allons à une vitesse proche de la vitesse de la lumière soit nous sondons l'infiniment petit.

Nous observons que les effets quantiques deviennent importants quand la température baisse car nous nous approchons de l'énergie minimale. Nous l'avons estimé avec les atomes froids ou le cas très hypothétique d'une balle de tennis refroidie à une température très proche du zéro absolu. A température ambiante et si la masse du corpuscule est faible, nous observons des effets quantiques comme la conductivité dans un métal. Et finalement, nous observons des effets quantiques dans le monde de l'infiniment petit car l'impulsion minimale est inversement proportionnelle à la taille de l'objet étudié. C'est le cas de l'atome et du noyau atomique.