MQI: Cours 4a (supplément)

Dynamique Quantique
&
Paquets d’onde

Particule Libre:
Paquet d’onde gaussien

Particule libre: Paquet d'onde gaussien (diapo1)

Rappel: $i\hbar \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$

a) On choisit comme état initial (à $t = 0$) « un état gaussien » $\psi_0(x)$ soit:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-(x-x_0)^2/(4\sigma^2)}\, e^{i\,p_0 x/\hbar}$$

b) Alors $\rho_0(x) = |\psi_0(x)|^2$ est une loi de probabilité normale gaussienne et:

c) $< \hat{X} >_0 = x_0,\ \Delta_0\hat{X} = \sigma,\ < \hat{P} >_0 = p_0,\ \Delta_0\hat{P} = \dfrac{\hbar}{2\,\sigma}$ => $\Delta_0\hat{X}\Delta_0\hat{P} = \dfrac{\hbar}{2}$

d) On sait résoudre (dans ce cas) l'équation de Schrödinger de manière explicite et on trouve:

$$\forall x, \forall t, \psi(x,t) = \left[\frac{1}{2\pi\sigma^2\left(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma^2}\right)^2}\right]^{1/4} e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_0 x - \frac{p_0^2}{2m}t\right)} e^{-\frac{1}{4}\frac{\left(x - x_0 - \frac{p_0}{m}t\right)^2}{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}}$$

Remarque importante: La solution est valable pour $t \geq 0$ et aussi pour $t \leq 0$.

Particule libre: Paquet d'onde gaussien (diapo2)

$$\psi(x,t)=\left[\frac{1}{2\pi\sigma^2\left(1+\frac{i\hbar t}{2m\sigma^2}\right)^2}\right]^{1/4} e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_0 x-\frac{p_0^2}{2m}t\right)} e^{-\frac{1}{4}\frac{\left(x-x_0-\frac{p_0}{m}t\right)^2}{\sigma^2+\frac{i\hbar t}{2m}}}$$

a) On a un facteur de phase de type « onde plane » $e^{i(k\,x\,-\omega t)}$ avec

$p_0=\hbar k$ et $E_0=\frac{p_0^2}{2m}=\hbar\omega$ (on retrouve l'idée de Louis De Broglie)

b) On trouve que la loi de probabilité de présence $\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2$ s'écrit

$$\rho(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2}}e^{-\frac{(x-x_t)^2}{2\sigma_t^2}} \text{ avec } \mathrm{x_t}=\mathrm{x_0}+\frac{p_0 t}{m} \; et\; \sigma_t=\sqrt{\sigma^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma^2}}$$

D'où: $\forall \boldsymbol{t}\in\mathbb{R}, <\hat{X}>_t=x_0+\frac{p_0 t}{m}$ et $\Delta_t\hat{X}=\sigma_t=\sqrt{\sigma^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma^2}}$ donc $\sigma_t \nearrow$ pour $\boldsymbol{t}\geq\mathbf{0}$

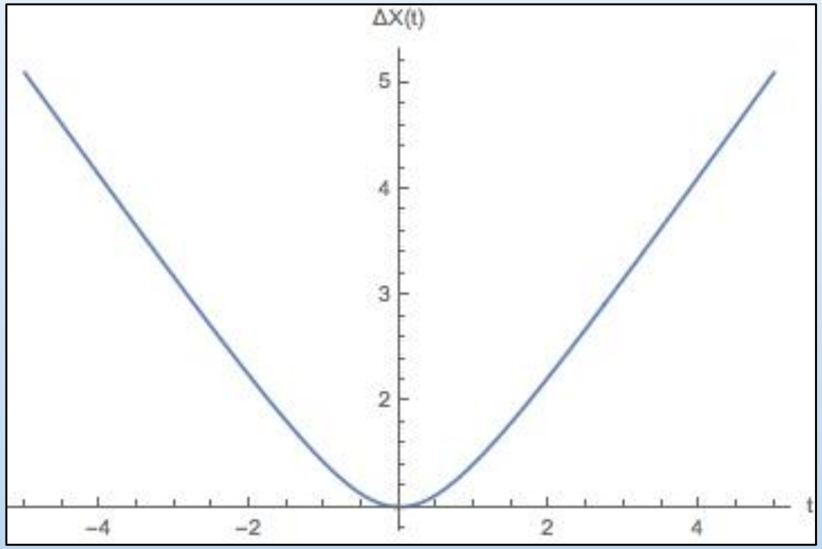
$\Rightarrow$ Il y a « **étalement du paquet** » pour $\boldsymbol{t}\geq\mathbf{0}$ (spreading en anglais).

c) Par contre il n'y a pas d'évolution pour la distribution d'impulsion:

$$<\hat{P}>_t=<\hat{P}>_0=p_0 \text{ et } \Delta_t\hat{P}=\Delta_0\hat{P}=\frac{\hbar}{2\sigma}$$

Particule libre: Paquet d’onde gaussien (diapo3)

« Spreading » du paquet gaussien $\Delta_t \hat{X} = \sigma_t = \sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2}}$



Si $|t| \gg \frac{2m\sigma^2}{\hbar}$ alors $\Delta_t \hat{X} \simeq \frac{\hbar|t|}{2m\sigma}$
=> Evolution linéaire

Il n’y a « étalement » du paquet qu’à partir de $t = 0$. Au contraire si on part de l’état $\psi(x, t_0)$ avec $t_0 \leq 0$, il y a alors d’abord « compression » du paquet jusqu’à la compression maximale $\Delta\hat{X} = \sigma$, puis « expansion ». Le « spreading » n’est pas obligatoire en MQ.

=> La MQ est réversible dans le temps comme la mécanique analytique:
Tout état initial peut être un état final.

Particule libre: Paquet d'onde gaussien (diapo4)

Comparaison avec le phénomène de diffusion

Rappel: La diffusion est un **phénomène statistique <u>irréversible</u>**.

L'équation de la diffusion pour une une densité $n(x,t) \geq 0$ de particules est

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \quad \text{avec} \;\; D > 0.$$

a) $N = \int n(x,t)dx$ est le nombre (conservé) de particules,

b) $\tilde{n} = \frac{1}{N} n$ vérifie aussi l'équation de la diffusion avec $\int \tilde{n}(x,t)dx = 1$ => $\tilde{n}$ est la **densité de probabilité** de trouver une particule au point x.

Solution gaussienne: Si on choisit $\tilde{n}_0(x) = \tilde{n}(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ alors on trouve

$$\forall x, \forall \boldsymbol{t} \geq \boldsymbol{0}, \qquad \tilde{n}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_t^2}} \text{ avec } \sigma_t = \sqrt{\sigma^2 + 2Dt} \;\Rightarrow\; \frac{d\sigma_t}{dt} > 0$$

$\tilde{n}(x,t)$ <u>n'existe que si</u> $t > -\frac{\sigma^2}{2D}$ et $\frac{d\sigma_t}{dt} > 0$ =><u>**Irréversibilité**</u>. Si $t \gg \frac{\sigma^2}{2D}$, $\sigma_t \simeq \sqrt{2Dt} \neq K\,t$

=> **Le « spreading » est inévitable dans la diffusion.**

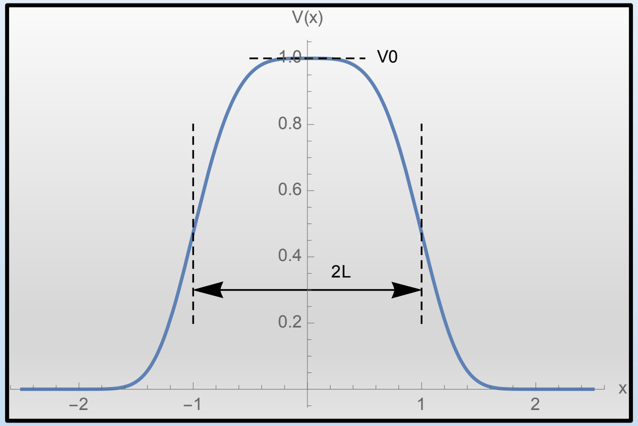
Barrière de potentiel:
Dynamique d’un Paquet d’onde
(simulation numérique)

Barrière de potentiel: les conditions

Equation de Schrödinger: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$

Le potentiel: $V(x) = V_0 e^{-\frac{3x^4}{4L^4}}$

On choisit $V_0 = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$ pour que l'effet tunnel soit visible.

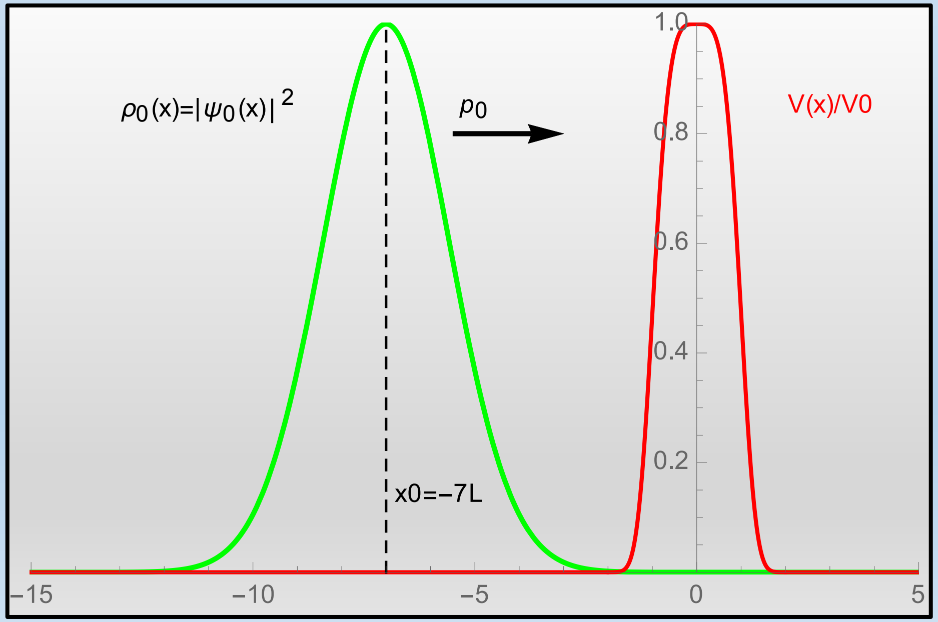


- **L'état initial** $\psi_0(x) = \psi(x, t=0)$: **Etat gaussien**

  $\psi_0(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-(x-x_0)^2/(4\sigma^2)}\, e^{i\,p_0 x/\hbar}$
- **On choisit**: $x_0 = -7L$ (paquet loin de la barrière),

$\sigma = 2L$ (paquet et barrière de largeur similaire) et on fera des simulations avec 3 valeurs de p_0 telles que

$$E_0 = \frac{p_0^2}{2m} \gg V_0, \quad E_0 \gtrsim V_0, \quad E_0 < V_0$$

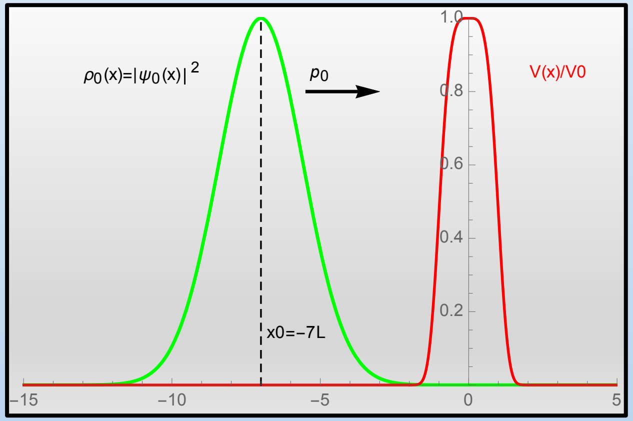


Barrière de potentiel: la simulation (diapo1)

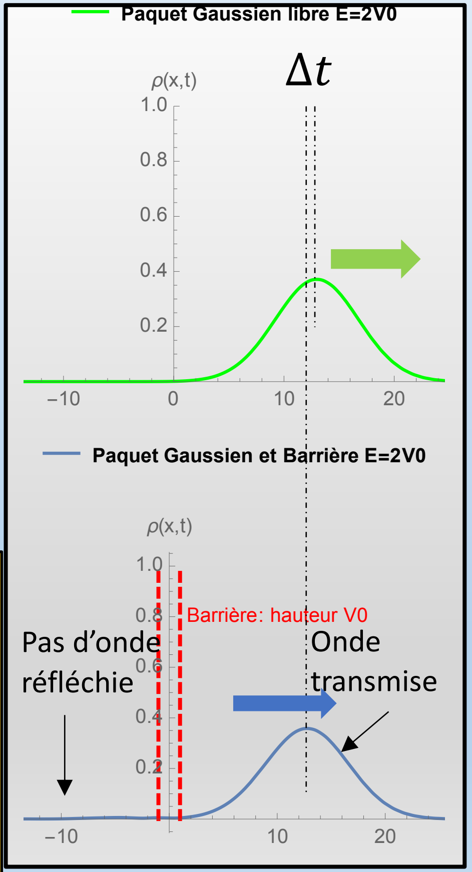
Trois Simulations pour $E_0 = \dfrac{p_0^2}{2m} = 4\ V_0, \quad E_0 = 2.25\ V_0, \quad E_0 = 0.5\ V_0$

Comparaison avec « une évolution libre »

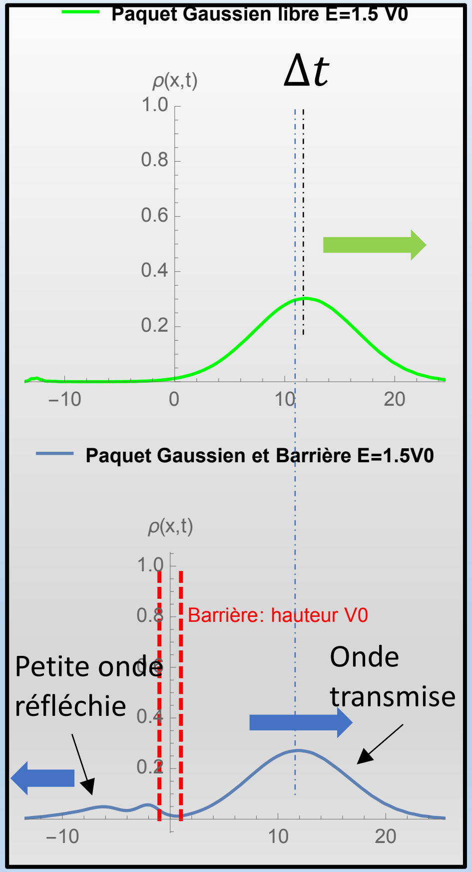
Etat Initial



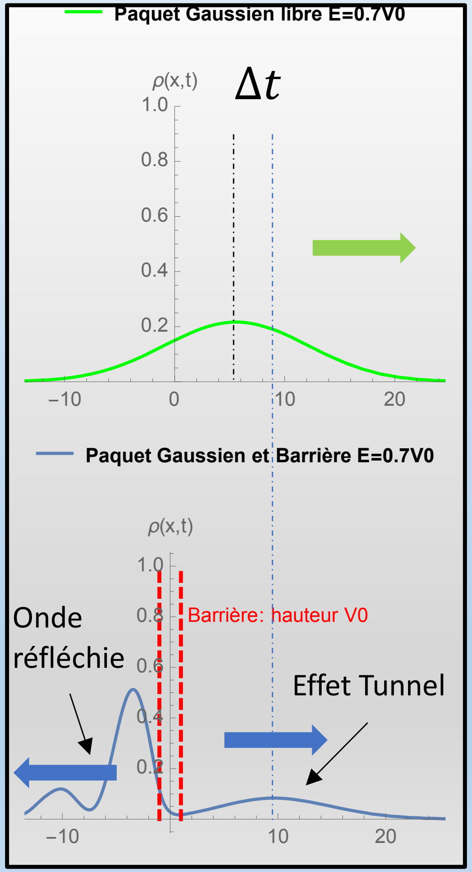
Evolution



$E_0 = 4\ V_0$



$E_0 = 2.25\ V_0$

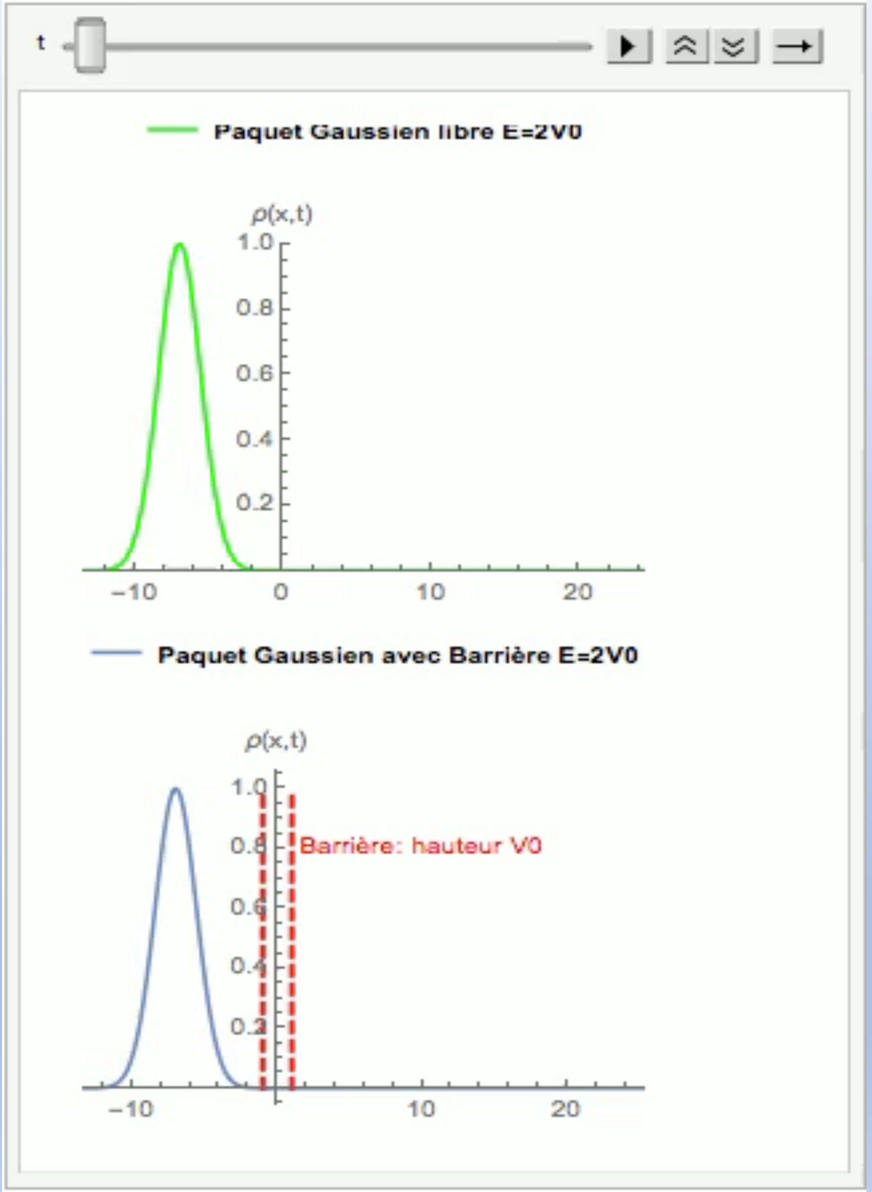


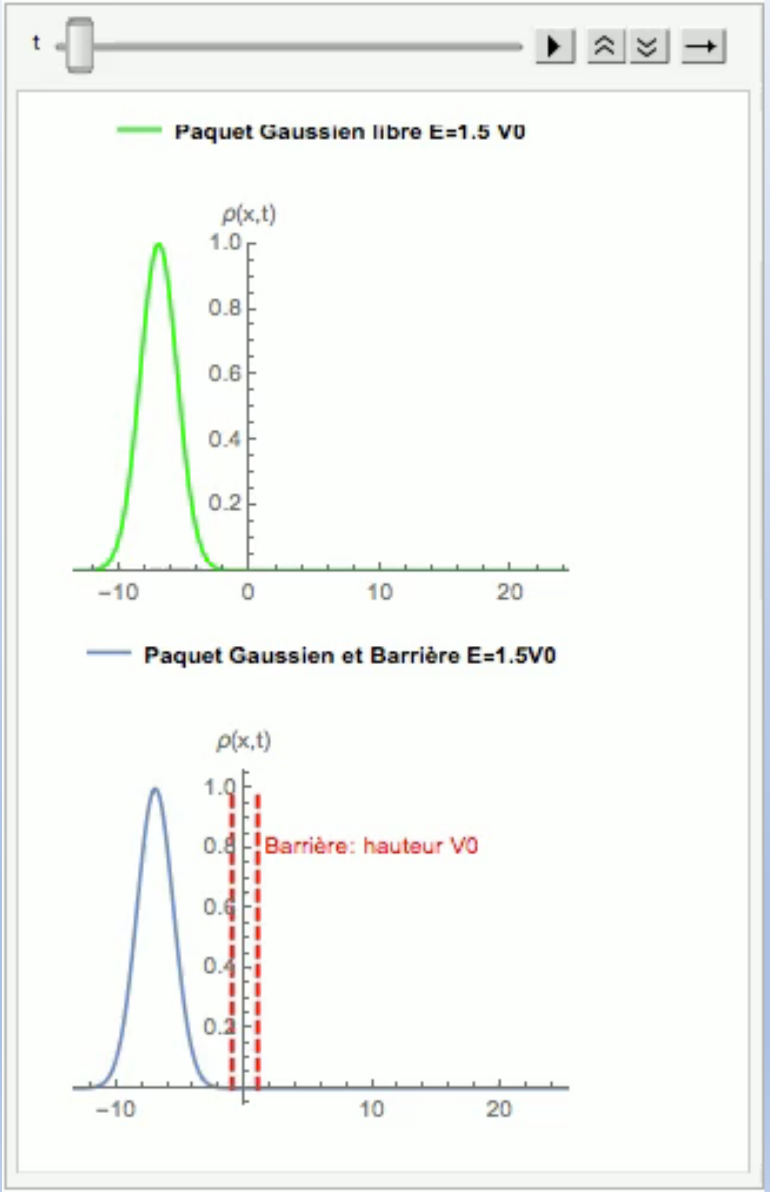
$E_0 = 0.5\ V_0$

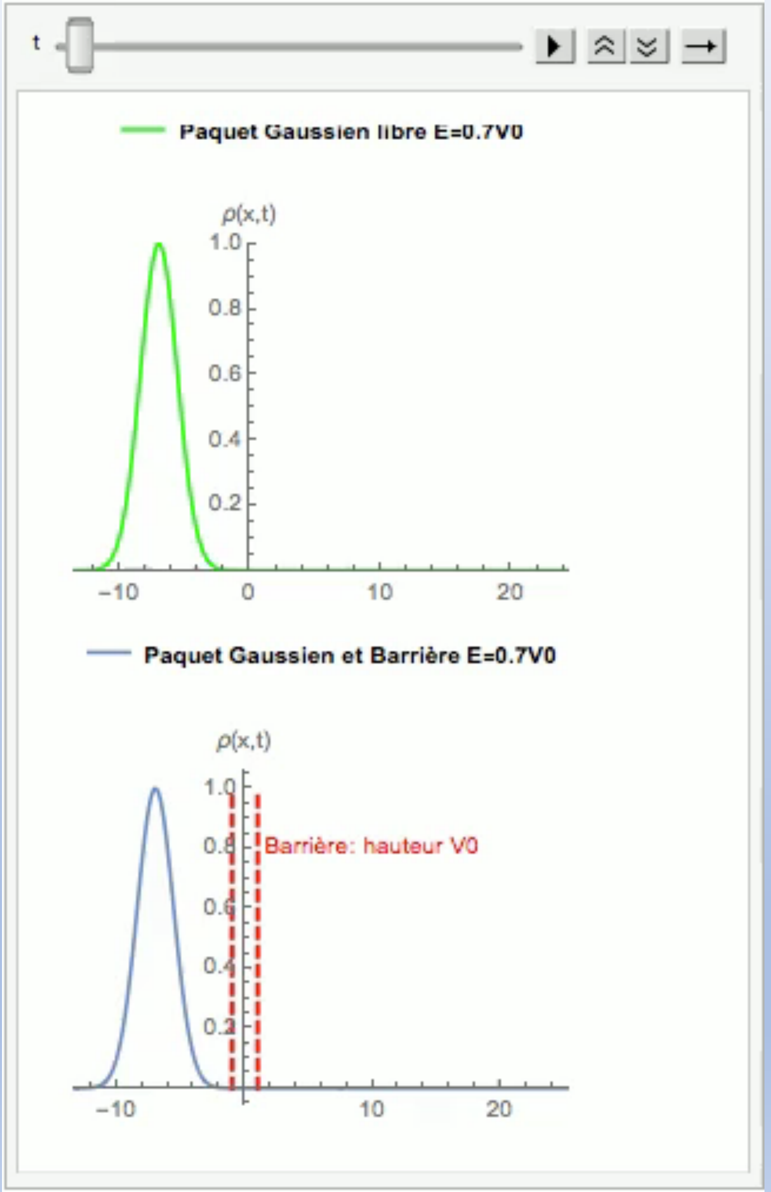
Remarque:

- Pour $E_0 = 4\ V_0$ et $E_0 = 2.25\ V_0$:
  $\Delta t = t_B - t_L < 0$
- Pour $E_0 = 0.5\ V_0$:
  $\Delta t = t_B - t_L > 0$

Barrière de potentiel: la simulation (diapo2)







FIN COURS 4a