Mécanique Quantique I, Corrigé 4

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : Représentations x et p

1. Comme admis dans l'énoncé, nous avons la relation suivante :

$$\langle x|\hat{p}|\varphi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) \tag{1}$$

où $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$. Cette relation est valable quelque soit le vecteur d'état $|\varphi\rangle$ et donc on peut en particulier l'appliquer au cas où l'on choisit $|\varphi\rangle = |p\rangle$ où $|p\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur $\hat{p}$. On obtient donc :

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}p(x) = p\langle x|p\rangle = p\,p(x) \tag{2}$$

Cette équation peut se réécrire sous la forme

$$\frac{dp(x)}{p(x)} = \frac{i}{\hbar}p\,dx \tag{3}$$

que l'on peut intégrer afin de trouver

$$p(x) = Ne^{ipx/\hbar} \tag{4}$$

où N est la normalisation de $p(x)$. Afin de déterminer N, utilisons la relation de fermeture sur p :

$$\delta(x-y) = \langle x|y\rangle = \int dp\,\langle x|p\rangle\langle p|y\rangle = \int dp\,p(x)p^*(y) = |N|^2\int dp\,e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} = 2\pi|N|^2\delta\left(\frac{x-y}{\hbar}\right) \tag{5}$$

où nous avons utilisé la définition intégrale de la distribution de Dirac :

$$\frac{1}{2\pi}\int dx\,e^{iax} = \delta(a) \tag{6}$$

En utilisant $\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x)$, et en choisissant N réel, on trouve :

$$\boxed{p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}} \tag{7}$$

2. La relation entre $\psi(x)$ et $\psi(p)$ est alors immédiate :

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \int dx\,\psi(x)|x\rangle \\ &= \int dx\,dp\,\psi(x)\langle p|x\rangle|p\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\,dp\,\psi(x)e^{-ipx/\hbar}|p\rangle \\ &= \int dp\,\psi(p)|p\rangle\end{aligned} \tag{8}$$

On identifie donc $\psi(p)$ avec la transformée de Fourier de $\psi(x)$:

$$\boxed{\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\,\psi(x)e^{-ipx/\hbar} \quad \text{et} \quad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\,\psi(p)e^{ipx/\hbar}} \tag{9}$$

3. En utilisant deux fois la relation de fermeture sur l'espace des positions, on a :

$$\langle\psi_1|\hat{O}|\psi_2\rangle = \int dx\, dy\, \langle\psi_1|x\rangle\langle x|\hat{O}|y\rangle\langle y|\psi_2\rangle = \int dx\, dy\, \psi_1^*(x) O(x,y)\psi_2(y) \tag{10}$$

où $O(x,y) \equiv \langle x|\hat{O}|y\rangle$ est appelée représentation x de $\hat{O}$ ou élément de matrice de $\hat{O}$.

4. Du point précédent on tire que la représentation x de $\hat{x}$ est donnée par :

$$x(x,y) = \langle x|\hat{x}|y\rangle = y\,\delta(x-y) \tag{11}$$

Si l'on interprête $\langle x|\hat{O}|y\rangle$ comme étant l'élément (x,y) de la matrice $\hat{O}$, alors une matrice est dite diagonale si $\langle x|\hat{O}|y\rangle \propto \delta(x-y)$. C'est manifestement le cas pour pour l'opérateur $\hat{x}$.

5. La représentation x de $\hat{p}$ est donnée par :

$$p(x,y) = \langle x|\hat{p}|y\rangle = \int dp\, \langle x|\hat{p}|p\rangle\langle p|y\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\, p\, e^{\frac{i}{\hbar}p(x-y)} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y) = i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\delta(x-y) \tag{12}$$

L'avant-dernière égalité s'obtient par le raisonnement suivant :

$$\int dp\, p\, e^{ipx} = -i\int dp\, \frac{\partial}{\partial x}e^{ipx} = -i\frac{\partial}{\partial x}\int dp\, e^{ipx} = -2\pi i\frac{\partial}{\partial x}\delta(x) \tag{13}$$

On aurait pu dériver la valeur de $p(x,y)$ en partant à nouveau de la formule (1) appliquée au cas particulier $|\varphi\rangle = |y\rangle$. On aurait obtenu :

$$\langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|y\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y) \tag{14}$$

puisque les vecteurs propres de $\hat{x}$ sont normalisés par $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$. Comme $p(x,y)$ n'est pas proportionnel à $\delta(x-y)$, l'opérateur $\hat{p}$ n'est pas diagonal dans cette base. Voyons maintenant un exemple d'utilisation de $p(x,y)$. Nous allons calculer $\langle\psi_1|\hat{p}|\psi_2\rangle$ de deux façons différentes :

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{p}|\psi_2\rangle &= \int dx\, \langle\psi_1|x\rangle\langle x|\hat{p}|\psi_2\rangle \\ &= -i\hbar\int dx\, \psi_1^*(x)\psi_2'(x)\end{aligned} \tag{15}$$

où nous avons utilisé le résultat (1) admis dans l'énoncé pour exprimer $\langle x|\hat{p}|\psi_2\rangle$. En utilisant notre formule pour $p(x,y)$ nous avons :

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{p}|\psi_2\rangle &= \int dx\, dy\, \langle\psi_1|x\rangle\langle x|\hat{p}|y\rangle\langle y|\psi_2\rangle \\ &= i\hbar\int dx\, dy\, \psi_1^*(x)\left(\frac{\partial}{\partial y}\delta(x-y)\right)\psi_2(y) \\ &= -i\hbar\int dx\, dy\, \psi_1^*(x)\delta(x-y)\frac{\partial}{\partial y}\psi_2(y) \\ &= -i\hbar\int dx\, \psi_1^*(x)\psi_2'(x)\end{aligned} \tag{16}$$

On constate encore une fois dans cette dernière formule que $\hat{p}$ n'est pas diagonal en représentation x. En effet, ψ_1^* est évalué en x alors que ψ_2 est évalué en $x+\epsilon$ puisque cette fonction apparaît dérivée :

$$\psi_2'(x) = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{\epsilon}\left[\psi_2(x+\epsilon) - \psi_2(x)\right] \tag{17}$$

6. On veut maintenant trouver la représentation p de $\hat{x}$. On procède comme au point précédent :

$$x(p,p') = \langle p|\hat{x}|p'\rangle = \int dx\, \langle p|\hat{x}|x\rangle\langle x|p'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\, x\, e^{\frac{i}{\hbar}x(p'-p)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p') \tag{18}$$

7. Finalement on trouve aisément la représentation p de $\hat{p}$:

$$p(p,p') = \langle p|\hat{p}|p'\rangle = p'\delta(p-p') \tag{19}$$

8. Considérons maintenant le cas d'une particule de masse m évoluant dans un potentiel $V(x)$. L'équation de Schrödinger correspondante est donnée par :

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \qquad \text{avec} \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{20}$$

Commençons par la projeter sur $|x\rangle$:

$$\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle \tag{21}$$

Calculons $\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle &= \int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\hat{p}|\psi\rangle \\ &= \int dx' (-i\hbar)^2 \frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x'}\psi(x') \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\end{aligned} \tag{22}$$

Remarque : La généralisation à une puissance n quelconque est immédiate

$$\langle x|\hat{p}^n|\psi\rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi(x) \tag{23}$$

Cette généralisation sera dérivée autrement dans une série ultérieure.
De plus si l'on développe $V(\hat{x})$ en série, il est aisé de constater que

$$\langle x|V(\hat{x})|\psi\rangle = \langle x|V(x)|\psi\rangle = V(x)\psi(x) \tag{24}$$

En mettant toutes ces pièces ensemble, on obtient finalement une équation différentielle pour $\psi(x)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{25}$$

9. En représentation p, l'équation de Schrödinger devient

$$\langle p|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle p|\psi\rangle \tag{26}$$

Le terme cinétique est alors simplement donné par :

$$\langle p|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m}\psi(p) \tag{27}$$

En utilisant l'équation (18), on peut monter :

$$\begin{aligned}\langle p|\hat{x}|\psi\rangle &= \int dp' \langle p|\hat{x}|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle \\ &= \int dp' i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p')\psi(p') \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi(p)\end{aligned} \tag{28}$$

En procédant de la même façon que pour l'équation (23) on montre aisément que $\langle p|\hat{x}^n|\psi\rangle$ s'écrit comme :

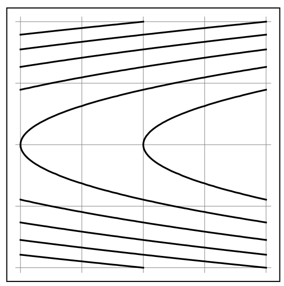
$$\langle p|\hat{x}^n|\psi\rangle = (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n}\psi(p) \tag{29}$$

L'équation de Schrödinger en représentation p est alors donnée par :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\psi(p) = E\psi(p) \tag{30}$$

Exercice 2 : Champ électrique constant

1. Concernant la dynamique classique :
   (a) Le hamiltonien est donné par :
$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} - qE(x - x_0) \tag{31}$$
   où x_0 est une constante d'intégration qui peut être choisie arbitrairement, par exemple à zéro.
   (b) Les équations du mouvement sont données par :
$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = qE \end{aligned} \tag{32}$$
   (c) Le hamiltonien étant indépendant du temps, l'énergie est conservée. Chaque orbite est définie par :
$$p = \pm\sqrt{2m(\epsilon + qEx)} \tag{33}$$
   où nous avons utilisé ϵ pour l'énergie afin d'éviter toute confusion. Ce qui conduit à :



   (d) La particule est en chute libre continue, le mouvement n'est en rien contenu dans une région finie de l'espace. Le temps passé dans une région finie sera donc inversement proportionnel au temps durant lequel on laisse l'expérience se dérouler et tendra vers zéro.
2. En suivant le raisonnement ci-dessus, la particule sera principalement située à l'infini. La probabilité de la trouver dans une région finie de l'espace est nulle, ou, en d'autres termes, la fonction d'onde n'est pas normalisable.

   Cette situation est similaire au cas de la particule libre. Pour donner du sens à ce système, il faut s'imaginer le mettre dans une boîte de dimension finie. Si elle est "suffisamment grande", les états que nous allons trouver en seront de bonnes approximations.
3. Le hamiltonien quantique du système est simplement donné par :
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - qE\hat{x} \tag{34}$$
4. En utilisant les résultats de l'exercice 1 :
   (a) En représentation x :
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) - qEx\psi(x) = \epsilon\psi(x) \tag{35}$$
   (b) En représentation p :
$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) - i\hbar qE\psi'(p) = \epsilon\psi(p) \tag{36}$$
5. En utilisant le point précédent :
   (a) L'équation en représentation p semble plus simple à résoudre, vu qu'elle est d'ordre 1. En effet, nous avons :
$$\psi_\epsilon'(p) = \frac{i}{\hbar qE}\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m}\right)\psi_\epsilon(p) \tag{37}$$

qui peut être résolue par séparation de variables :

$$\psi_\epsilon(p) = A_\epsilon \exp\left[\frac{i}{\hbar qE}\left(\epsilon p - \frac{p^3}{6m}\right)\right] \tag{38}$$

où A_ϵ est une constante d'intégration qui sera "fixée" par la normalisation.
Comme on pouvait s'y attendre, il n'y a aucune contrainte sur ϵ, le spectre est donc $\mathbb{R}$.

(b) En utilisant le résultat du point 1, on a :

$$\psi_\epsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\, \psi_\epsilon(p)\exp\left[i\frac{px}{\hbar}\right] = \frac{A_\epsilon}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p \exp\left[\frac{i}{\hbar qE}\left(\epsilon p - \frac{p^3}{6m}\right) + i\frac{px}{\hbar}\right] \tag{39}$$

(c) En tentant de normaliser ψ_ϵ en représentation p on obtient

$$\langle\psi_\epsilon|\psi_\epsilon\rangle = \int \mathrm{d}p A_\epsilon^* A_\epsilon = |A_\epsilon|^2\infty, \tag{40}$$

ce qui montre, comme anticipé, que cet état ne peut pas être normalisé.

<u>Complément</u> : au même titre que les ondes planes $\{|p\rangle\}$ qui forment un continuum tel que

$$\langle p'|p\rangle = \int \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{-ip'x/\hbar} e^{ipx/\hbar} = \delta(p'-p), \tag{41}$$

les $\{|\psi_\epsilon\rangle\}$ forment un continuum tel que

$$\begin{aligned}\langle\psi_{\epsilon'}|\psi_\epsilon\rangle &= A_{\epsilon'}^* A_\epsilon \int dp \exp\left[-\frac{i}{\hbar qE}\left(\epsilon' p - \frac{p^3}{6m}\right)\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar qE}\left(\epsilon p - \frac{p^3}{6m}\right)\right] \\ &= A_{\epsilon'}^* A_\epsilon \hbar qE \int \frac{dp}{\hbar qE}\exp\left[i(\epsilon - \epsilon')\frac{p}{\hbar qE}\right] \\ &= 2\pi A_{\epsilon'}^* A_\epsilon \hbar qE\delta(\epsilon - \epsilon').\end{aligned} \tag{42}$$

Autrement dit, en choisissant

$$A_\epsilon = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar qE}}, \tag{43}$$

on obtient

$$\langle\psi_{\epsilon'}|\psi_\epsilon\rangle = \delta(\epsilon' - \epsilon). \tag{44}$$

Par abus de langage, on dit parfois que les $\{|\psi_\epsilon\rangle\}$ sont ainsi "normalisés en énergies" ; il faut garder à l'esprit qu'il ne s'agit pas d'états à fonctions d'onde de carré sommable (normalisables au sens strict). De plus, on peut remarquer qu'avec cette "normalisation en énergie" on a

$$\begin{aligned}\left(\int d\epsilon|\psi_\epsilon\rangle\langle\psi_\epsilon|\right)|p\rangle &= \int dp'|p'\rangle\langle p'|\int d\epsilon|\psi_\epsilon\rangle\langle\psi_\epsilon|p\rangle \\ &= \int dp'|p'\rangle\int d\epsilon\langle p'|\psi_\epsilon\rangle\langle\psi_\epsilon|p\rangle \\ &= \int dp'|p'\rangle\int d\epsilon\, \psi_\epsilon(p')\psi_\epsilon^*(p) \\ &= |A_\epsilon|^2\int dp'|p'\rangle\exp\left[\frac{i}{6m\hbar qE}(p^3 - p'^3)\right]\int d\epsilon \exp\left[i(p'-p)\frac{\epsilon}{\hbar qE}\right] \\ &= |A_\epsilon|^2\int dp'|p'\rangle\exp\left[\frac{i}{6m\hbar qE}(p^3 - p'^3)\right]2\pi\hbar qE\delta(p'-p) \\ &= 2\pi\hbar qE|A_\epsilon|^2|p\rangle = |p\rangle,\end{aligned} \tag{45}$$

ce qui permet d'écrire la relation de fermeture

$$\int d\epsilon|\psi_\epsilon\rangle\langle\psi_\epsilon| = \mathbb{1}. \tag{46}$$