LU3PY101
Physique Quantique 1
2023-2024

# TD 3 - Boîte quantique et théorème d'Ehrenfest – Corrigé –

On s'intéresse aux états quantiques d'une particule de masse $m$ piégée dans un puits de potentiel infini de largeur $a$ et centré en $x = 0$. On pose pour tout entier $n > 0$ :

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(\frac{a}{2} - x\right)\right) \tag{1}$$

1. Retrouver rapidement l'expression des énergies propres $E_n = n^2 E_1$ du puits carré infini, et montrer que les fonctions d'ondes associées sont les $\phi_n(x)$.

**Solution:** Les calculs sont ici (trop) détaillés, mais il vous faut parfaitement connaître les caractéristiques et la méthode de résolution du puits de potentiel carré infini, qui est un cas standard de résolution de l'équation de Schrödinger.

L'énergie potentielle est supposée être nulle (ou non-nulle, mais constante et uniforme) dans la zone du puits $x \in \left[-\frac{a}{2}, +\frac{a}{2}\right]$ et infinie à l'extérieur. En dehors du puits, cette énergie potentielle infinie empêche la particule d'y exister et la fonction d'onde $\psi(x,t)$ de la particule est donc rigoureusement nulle pour $x < -\frac{a}{2}$ et $x > +\frac{a}{2}$. Toute fonction d'onde étant continue dans l'espace, on en déduit par continuité que $\psi\left(-\frac{a}{2}, t\right) = 0 = \psi\left(+\frac{a}{2}, t\right)$ à tout instant $t$.
Dans la zone du puits, comme $V(x,t) = 0$, l'équation de Schrödinger est simplement égale à

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= \widehat{H}(\psi(x,t)) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \end{aligned}$$

C'est une équation séparable, ce qui signifie qu'elle possède des solutions particulières pour lesquelles les variables $x$ et $t$ peuvent être séparées, du type $\psi(x,t) = \theta(t)\,\phi(x)$. Attention, une solution générale de l'équation n'est pas séparable ! Mais toute solution peut s'exprimer comme combinaison linéaire de solutions particulières séparables (qui, en fait, forment une base de l'espace des fonctions solutions).
Divisant par $\psi(x,t)$ l'équation de Schrödinger, on obtient

$$i\hbar \frac{1}{\theta(t)}\frac{\partial}{\partial t}\theta(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x)$$

valable pour tout $t$ et pour tout $x$, et donc constante. Comme cette constante est homogène à une énergie, on la dénomme $E$. C'est une inconnue et la résolution du problème va nous

dire quelles sont les valeurs de $E$ possibles (les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{H}$). À chaque valeur propre $E$, on associera alors une fonction d'onde propre.
On obtient donc après intégration :

$$\theta(t) = \theta(t_0)\,\mathrm{e}^{-iE(t-t_0)/\hbar}$$

que l'on peut simplifier en $\theta(t) = \mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$ en supposant l'instant initial nul et en mettant la constante d'intégration $\theta(t_0)$ dans l'autre expression

$$\phi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}$$

avec $k$ défini par

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

et où il faut tenir compte des conditions aux limites :

$$\phi\left(-\frac{a}{2}\right) = 0 = \phi\left(+\frac{a}{2}\right)$$

On constate que $E \geq 0$. En effet, pour $E < 0$, et donc $k$ imaginaire pur, ces deux conditions conduisent nécessairement à $\phi(x) = 0$ pour tout $x$, ce qui est impossible puisque la particule est bien quelque part et que la (densité de) probabilité de présence est égale à $|\psi(x,t)|^2 = |\phi(x)|^2$.
Pour $E \geq 0$, $k$ est réel et les deux conditions aux bords donnent

$$A\mathrm{e}^{-ika/2} + B\mathrm{e}^{ika/2} = 0$$
$$A\mathrm{e}^{ika/2} + B\mathrm{e}^{-ika/2} = 0$$

qu'on résout en exprimant $B$ en fonction de $A$ à l'aide d'une des deux équations (par exemple $B = -\mathrm{e}^{ika}A$ et en remplaçant $B$ par cette expression dans l'autre équation.
On peut aussi remarquer que c'est un système d'équations (pour les inconnues $A$ et $B$) qui ne possède de solution que si le déterminant suivant est nul :

$$\begin{vmatrix} \mathrm{e}^{-ika/2} & \mathrm{e}^{ika/2} \\ \mathrm{e}^{ika/2} & \mathrm{e}^{-ika/2} \end{vmatrix} = 0$$

ce qui donne la condition

$$\sin(ka) = 0$$

dont les solutions (pour $k$, donc pour $E$) sont quantifiées selon

$$k_n = n\frac{\pi}{a} \quad \longleftrightarrow \quad E_n = n^2 E_1$$

avec $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = \frac{h^2}{8ma^2}$ et $n$ un entier positif non-nul (non-nul, car sinon la fonction d'onde solution pour $n = 0$ serait nulle partout).
Quant aux fonctions $\phi(x)$ solutions, elles peuvent également être repérées par l'indice entier $n$ :

$$\phi_n(x) = A\left(\mathrm{e}^{ik_n x} - \mathrm{e}^{ik_n a}\mathrm{e}^{-ik_n x}\right)$$

qu'on peut ré-écrire :

$$\begin{aligned}\phi_n(x) &= A\mathrm{e}^{ik_n a/2}\left(\mathrm{e}^{ik_n\left(x-\frac{a}{2}\right)} - \mathrm{e}^{-ik_n\left(x-\frac{a}{2}\right)}\right)\\ &= C\sin\left(k_n\left(\frac{a}{2}-x\right)\right)\end{aligned}$$

avec la constante $C = -2iA\mathrm{e}^{ik_n a/2}$. La détermination de $C$ (de son module en fait) vient ensuite de la condition de normalisation des fonctions d'ondes :

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} |\phi_n(x)|^2\, dx = 1$$

qui exprime que pour chaque fonction d'onde propre, la somme des probabilités de présence redonne bien 1 : le particule est bien présente dans le puits.
Cette équation donne

$$\begin{aligned}1 &= |C|^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \sin^2\left(k_n\left(\frac{a}{2}-x\right)\right) dx\\ &= |C|^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \frac{1-\cos\left(k_n\left(\frac{a}{2}-x\right)\right)}{2} dx\\ &= |C|^2\,\frac{a}{2}\end{aligned}$$

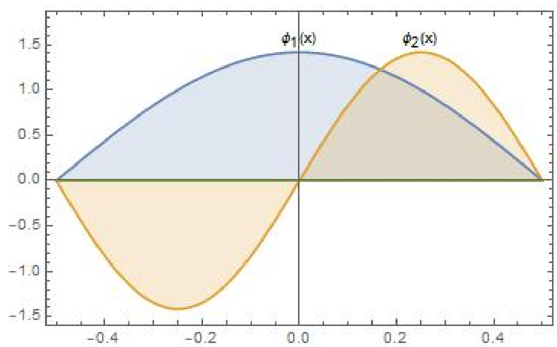
d'où

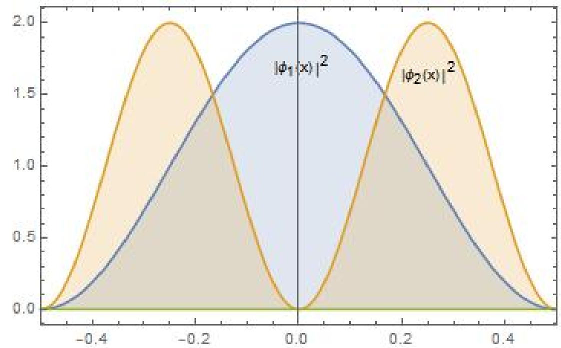
$$|C| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Reste à "choisir" l'argument du nombre complexe $C$ puisqu'il n'est pas contraint. C'est un choix, et le plus simple est de choisir $C$ réel : $C = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Ce qui finit de démontrer ce qui était demandé dans l'énoncé.

2. Représenter les fonctions d'ondes ainsi que les densités de probabilité des deux premiers niveaux.

**Solution:** Que ce soit à la main ou à l'aide d'un logiciel de calcul formel (comme Mapple ou Mathematica), il faut bien faire attention, lors du tracé, à marquer les différences entre fonctions d'ondes et densités de probabilité : les densités de probabilité sont positives et sont "arrondies" vers les endroits où elles s'annulent (des paraboles en fait) :




Remarque : attention, ici les fonctions d'ondes sont très particulières puisque ce sont des fonctions réelles et non complexes... Dans le cas général, on ne peut pas représenter en un seul graphique une fonction d'onde complexe. Il faut deux graphiques : un pour la partie réelle et un pour la partie imaginaire, ou bien un pour le module et un pour l'argument.

## Superposition d'états stationnaires

On suppose que la particule est préparée dans l'état quantique suivant :

$$|\psi(t=0)\rangle = N\left(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle\right) \tag{2}$$

avec $N$ un coefficient réel positif.

3. Déterminer la valeur de $N$ pour normer cet état à l'unité.

**Solution:**

$$\begin{aligned}\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle &= |N|^2(\langle\phi_1| - \langle\phi_2|)(|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle)\\ &= |N|^2\left(\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \langle\phi_2|\phi_2\rangle\right)\\ &= 2|N|^2,\end{aligned}$$

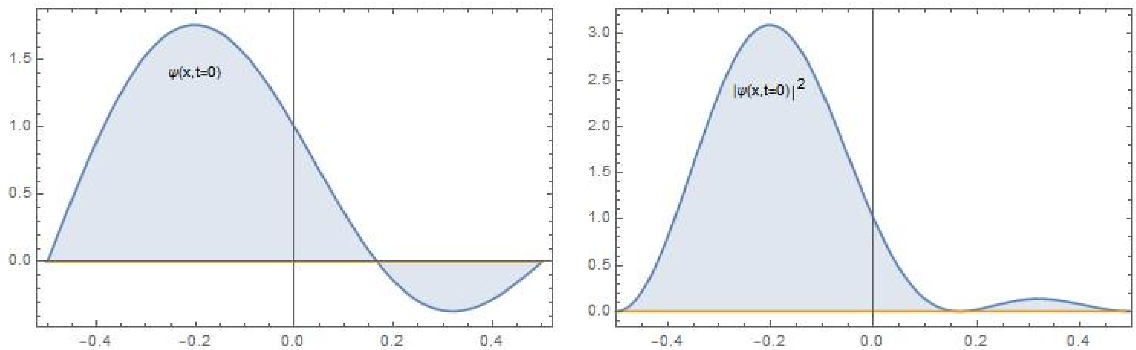
d'où,

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

On peut choisir $N = \frac{1}{\sqrt{2}}$

4. Représenter l'allure de la fonction d'onde associée, ainsi que la densité de probabilité correspondante. De quel côté du puits s'attend-on à davantage trouver la particule lors d'une mesure de position ?

**Solution:**




La densité de probabilité étant beaucoup plus concentrée du côté gauche du puits, c'est de ce côté-ci qu'on aura plus de chance de trouver la particule dans une mesure de position.

5. Déterminer l'endroit $x_0$ où la densité de probabilité s'annule vers le milieu du puits. Comment interpréter la possibilité de détecter la particule de chaque coté de ce point si la particule ne peut pas exister en ce point ?

**Solution:** La fonction d'onde totale s'écrit

$$\begin{aligned}\psi\left(x,t=0\right) &= \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi}{a}\left(\frac{a}{2}-x\right)\right)-\sin\left(\frac{2\pi}{a}\left(\frac{a}{2}-x\right)\right)\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi}{2}-\frac{\pi x}{a}\right)-\sin\left(\pi-\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)-\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\left(1-2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right)\end{aligned}$$

pour une densité de probabilité égale à

$$\left|\psi\left(x,t=0\right)\right|^2 = \frac{1}{a}\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\left(1-2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right)^2$$

qui s'annule si $\frac{\pi x}{a} = +\frac{\pi}{2}$ ou $-\frac{\pi}{2}$ (pour la partie en cosinus) ou $\frac{\pi x}{a} = +\frac{\pi}{6}$ (pour la partie en sinus), c'est-à-dire finalement pour

$$\left|\psi\left(x,t=0\right)\right|^2 = 0 \iff x = -\frac{a}{2}, \frac{a}{6} \text{ ou } \frac{a}{2}$$

d'où

$$x_0 = \frac{a}{6}$$

La particule ne peut donc pas être détectée en ce point et une interprétation classique du problème peut poser question : comment en effet la particule peut être détectée de chaque coté de ce point si elle ne peut pas exister en ce point ? En effet, du point de vue de la mécanique classique, une particule piégée dans un puits de potentiel passe nécessairement par tous les points accessibles du puits et la probabilité qu'elle soit détectée en un endroit est non-nulle et s'obtient en calculant la proportion de temps passé à cet endroit (forcément non-nul puisque la vitesse d'une particule ne peut être infinie).

La solution à cet apparent paradoxe vient de l'interprétation de la fonction d'onde et de la nécessité d'abandonner les notions classiques pour décrire l'état d'une particule. Premièrement, la fonction d'onde n'est *pas* la particule, elle décrit simplement son état dans l'espace. De même, la courbe de son module au carré nous renseigne sur sa probabilité de présence, *pas* sur sa "forme".
Ensuite, il faut bien comprendre que la probabilité de présence en "un" point est *toujours* nulle... C'est sur un intervalle (de taille non-nulle) que l'on calcule la probabilité de présence : $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \, dx$. La probabilité de présence dans un petit intervalle autour du point $x_0$, elle, n'est donc pas nulle. Soulignons que cette remarque vaut également pour une description classique.
Enfin, la physique quantique nous force à abandonner certaines (beaucoup de) certitudes classiques : dans ce formalisme, une particule n'est pas assimilé à une petite bille ayant une position et une vitesse simultanément bien définies. La physique quantique arrive en effet à la conclusion qu'une particule ne possède pas ces informations de position et de vitesse de façon intrinsèque (en elle-même), et que c'est l'interaction de nos appareils de mesure avec la particule qui nous renseigne sur les valeurs possibles de ces quantités. De plus, ces quantités de position et de vitesse ne peuvent être simultanément mesurées avec une précision infinie (cf. le principe d'Heisenberg).

6. Montrer que la valeur moyenne de la position à $t = 0$ est donnée par $\langle x\rangle(t=0) = -\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle$.

**Solution:** On a

$$\langle\psi(0)|\hat{x}|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}\left(\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_1\rangle + \langle\phi_2|\hat{x}|\phi_2\rangle - \langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle - \langle\phi_2|\hat{x}|\phi_1\rangle\right),$$

or,

$$\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_1\rangle = \langle\phi_2|\hat{x}|\phi_2\rangle = 0$$

car ces coefficients sont donnés par des intégrales de fonctions impaires sur un intervalle symétrique. Et, d'autre part $\hat{x}$ est un opérateur hermitique. On a donc : $\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\hat{x}|\phi_1\rangle^*$. Les intégrales représentant ces produits scalaires sont réelles car les fonctions d'onde sont réelles, ce qui implique : $\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\hat{x}|\phi_1\rangle$. D'où le résultat final

7. En déduire que

$$\langle x\rangle(t=0) = -\frac{16a}{9\pi^2}.$$

**Solution:** Il reste à calculer l'intégrale

$$\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} x \cdot \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(2\frac{\pi}{a}x\right) dx.$$

On écrit le produit de cosinus comme une somme : $\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(2\frac{\pi}{a}x\right) = \frac{1}{2}\left[\sin\left(3\frac{\pi}{a}x\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\right]$. On a donc :$\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle = \frac{1}{a}\left(I_3 + I_1\right)$ avec $I_n = \int_{-a/2}^{a/2} x \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$. Les intégrales $I_n$ se calculent par parties.

$$I_n = \left[-\frac{a}{n\pi}x \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right]_{-a/2}^{a/2} + \frac{a}{n\pi}\int_{-a/2}^{a/2}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

La partie toute intégrée est nulle. Donc :

$$I_n = \frac{2a^2}{n^2\pi^2}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

Et, finalement :

$$\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle = \frac{2a}{9\pi^2}\sin\left(\frac{3\pi}{2}\right) + \frac{2a}{\pi^2}\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{2a}{9\pi^2} + \frac{2a}{\pi^2} = \frac{16a}{9\pi^2}$$

8. On mesure l'énergie à l'instant $t = 0$, quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

**Solution:** On peut déterminer les probabilités associées à chaque mesure de l'énergie $E_1$ et $E_2$ soit :

$$P(E_1) = |\langle\phi_1|\psi(t=0)\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$
$$P(E_2) = |\langle\phi_2|\psi(t=0)\rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Les probabilités sont donc les mêmes.

9. Calculer la valeur moyenne de l'énergie ainsi que son écart quadratique $\Delta E$ en fonction de $E_1$.

**Solution:**

$$\langle E\rangle = E_1 \cdot P(E_1) + E_2 \cdot P(E_2) = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2 = \frac{5}{2}E_1$$

L'écart type s'écrit

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}$$

avec

$$\langle E^2\rangle = \frac{1}{2}E_1^2 + \frac{1}{2}E_2^2 = \frac{17}{2}E_1^2,$$

et

$$\langle E\rangle^2 = \frac{25}{4}E_1^2$$

d'où

$$\Delta E = \frac{3}{2}E_1.$$

## Évolution temporelle - théorème d'Ehrenfest

10. Donner l'expression de $|\psi(t)\rangle$ sur la base $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$.

**Solution:** De même que dans l'exercice précédent, $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ sont des états stationnaires donc leur évolution est donnée par un simple terme de phase. Comme on connaît le développement de $|\psi(t=0)\rangle$ sur ces deux états on déduit

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_1t/\hbar}|\phi_1\rangle - e^{-iE_2t/\hbar}|\phi_2\rangle\right).$$

11. Calculer la valeur moyenne de la position à l'instant $t$, notée $\langle x\rangle(t)$. À quelle fréquence cette position moyenne oscille-t-elle de droite à gauche dans le puits ?

**Solution:**

$$\begin{aligned}
\langle\hat{x}\rangle(t) &= \frac{1}{2}\left(\langle\phi_1|e^{iE_1t/\hbar} - \langle\phi_2|e^{iE_2t/\hbar}\right)\ x\ \left(e^{-iE_1t/\hbar}|\phi_1\rangle - e^{-iE_2t/\hbar}|\phi_2\rangle\right)\\
&= \frac{1}{2}\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_1\rangle + \frac{1}{2}\langle\phi_2|\hat{x}|\phi_2\rangle - \frac{1}{2}\langle\phi_2|\hat{x}|\phi_1\rangle e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} - \frac{1}{2}\langle\phi_1|\hat{x}|\phi_2\rangle e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\\
&= -Re\left(\langle\phi_2|\hat{x}|\phi_1\rangle e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}\right)
\end{aligned}$$

soit

$$\langle\hat{x}\rangle(t) = \langle\hat{x}\rangle(0)\cos(3E_1t/\hbar)$$

12. Y a-t-il des endroits (en dehors des bords) où s'annule la densité de probabilité de présence au cours du temps ?

**Solution:** Oui. Sans résoudre explicitement l'équation

$$\begin{aligned}
0 &= |\psi(x,t)|^2\\
&= \left|\frac{1}{\sqrt{a}}\left(\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\mathrm{e}^{-iE_1t/\hbar} - \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\mathrm{e}^{-iE_2t/\hbar}\right)\right|^2\\
&= \frac{\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)}{a}\left(1 + 4\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) - 4\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left((E_2-E_1)\,t/\hbar\right)\right)
\end{aligned}$$

on observe qu'aux instants suivants

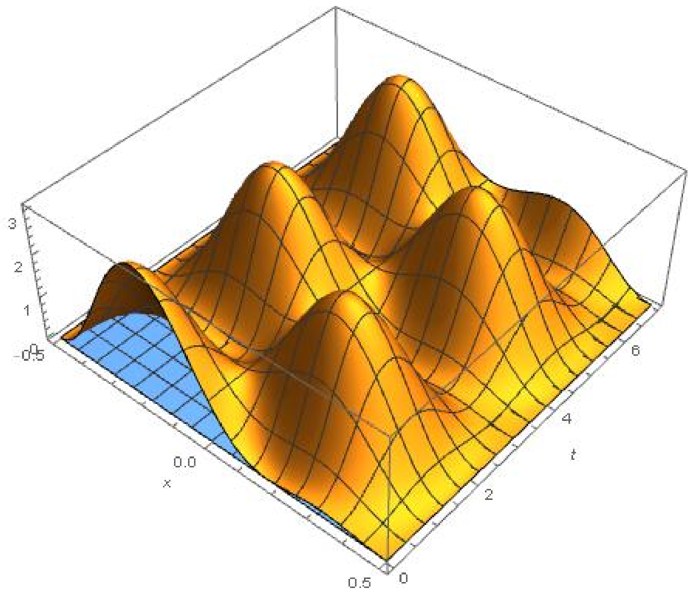
$$t_n = n\frac{h}{E_2 - E_1}$$

la densité de probabilité redevient identique à celle à l'instant $t = 0$, et donc s'annule en $x_0 = \frac{a}{6}$ comme on l'a vu précédemment.
De même, aux instants

$$t_{n'} = n'\frac{h}{2\,(E_2 - E_1)}$$

on retrouve la densité de probabilité initiale, mais symétrique par rapport à l'origine du puits : elle s'annule alors en $-x_0 = -\frac{a}{6}$.

Finalement, en traçant $|\psi(x,t)|^2$ au cours du temps, on obtient la figure suivante, qui illustre bien l'oscillation au cours du temps de la probabilité de présence d'un côté à l'autre du puits, avec les points particuliers $x_0 = \frac{a}{6}$ et $-x_0$ où la densité de probabilité de présence s'annule de façon périodique.




On peut montrer que $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$.

13. Que vaut $[\hat{x}, \hat{H}]$ ?

**Solution:**

$$[\hat{x}, \hat{H}] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}]$$

On applique la relation précédente avec la correspondance entre commutateurs

$$\hat{A} \equiv \hat{x}$$
$$\hat{B}\hat{C} \equiv \hat{p}_x \cdot \hat{p}_x / 2m.$$

On trouve alors que

$$[\hat{x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}] = [\hat{x}, \hat{p}_x]\frac{\hat{p}_x}{2m} + \hat{p}_x[\hat{x}, \frac{\hat{p}_x}{2m}] = i\hbar\frac{\hat{p}_x}{m}$$

14. À l'aide du théorème d'Ehrenfest, donner l'expression de la valeur moyenne de l'impulsion à l'instant t notée $\langle\hat{p}_x\rangle(t)$.

**Solution:** Le théorème d'Ehrenfest s'écrit

$$i\hbar\frac{d\langle\hat{x}\rangle(t)}{dt} = \langle[\hat{x}, \frac{\hat{p}_x^2}{2m}]\rangle = i\hbar\frac{\langle\hat{p}_x\rangle}{m},$$

d'où

$$m\frac{d\langle\hat{x}\rangle(t)}{dt} = \langle\hat{p}_x\rangle.$$

Finalement,

$$\langle\hat{p}_x\rangle = \frac{8\hbar}{3a}\cdot\sin(3E_1t/\hbar).$$

L'impulsion et la position moyennes de la particule oscillent à une fréquence qui correspond à la différence d'énergie des deux niveaux considérés.