

MEQ3 - Particule quantique libre

- Une particule libre vérifie l'équation de Schrödinger avec $V(x) = 0$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.$$

- Les solutions stationnaires sont des **ondes planes progressives monochromatiques**.
- Une onde plane isolée n'est pas normalisable : pour décrire une particule unique, on construit un **paquet d'ondes**.
- Le paquet se propage à la **vitesse de groupe**, qui s'identifie à la vitesse de la particule.

États stationnaires d'une particule libre

On cherche

$$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \varphi(x).$$

Alors φ vérifie

$$\varphi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0.$$

- $E < 0$: solutions exponentielles divergentes $\Rightarrow$ pas de solution physique.
- $E = 0$: $\varphi(x) = Ax + B$, non normalisable $\Rightarrow$ pas de solution physique non triviale.
- $E > 0$:

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

$$\boxed{\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{i(-kx - \omega t)}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}.}$$

Ondes de De Broglie

Une onde de De Broglie progressive vers les x croissants s'écrit

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}.$$

En l'injectant dans l'équation de Schrödinger, on obtient la relation de dispersion :

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Conséquences :

- propagation **dispersive** ;
- vitesse de phase

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}.$$

Relations de Planck-Einstein et de De Broglie

Pour une particule libre,

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k.$$

La longueur d'onde de De Broglie vaut

$$\lambda_{\text{DB}} = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}.$$

Une onde plane de De Broglie vérifie

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2,$$

indépendant de x : la probabilité de présence est uniforme !!

Sens physique essentiel

Une onde de De Broglie fixe la quantité de mouvement p et l'énergie E , mais elle est délocalisée sur tout l'espace : elle ne représente pas une particule unique localisée (cohérent avec Heisenberg).

Pourquoi former un paquet d'ondes ?

- Une onde de De Broglie seule n'est pas normalisable ;
- C'est un **outil élémentaire de décomposition** ;
- car une particule libre réaliste est décrite par une **superposition** d'ondes de De Broglie, c'est-à-dire par un **paquet d'ondes**.
- Ce paquet d'ondes est en revanche, lui, normalisable, c'est pour cela qu'on considère les ondes de De Broglie, bien que non normalisables.

Idée : concentrer le spectre autour d'un nombre d'onde moyen k_0 avec une petite largeur $\Delta k \ll k_0$.

Exemple de paquet d'ondes quasi monochromatique

On considère (spectre rectangulaire)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\Delta k} \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} A e^{i(kx - \omega(k)t)} dk, \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

En linéarisant $\omega(k)$ au voisinage de k_0 :

$$\omega(k) \simeq \omega_0 + v_g(k - k_0),$$

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}.$$

On obtient alors

$$\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \frac{\sin((x - v_g t)\Delta k/2)}{(x - v_g t)\Delta k/2}.$$

On retrouve la fonction sinc : $\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \text{sinc}((x - v_g t)\Delta k/2)$

Normalisation et largeur spatiale

Après normalisation,

$$\rho_P(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{\Delta k}{2\pi} \left[\frac{\sin((x - v_g t)\Delta k/2)}{(x - v_g t)\Delta k/2} \right]^2 = \frac{\Delta k}{2\pi} \text{sinc}^2((x - v_g t)\Delta k/2).$$

La densité de probabilité se translate donc à la vitesse v_g .

Propriétés essentielles :

- le pic principal est centré en $x_0(t) = v_g t$;
- sa largeur caractéristique vaut

$$\Delta x \simeq \frac{4\pi}{\Delta k};$$

- donc

$$\Delta x \Delta k \sim 1$$

(au facteur numérique près selon la définition de largeur).

Plus le spectre est étroit, plus la particule est délocalisée.

Correspondance onde-particule

On généralise.

Pour un paquet d'onde quasi-monochromatique, de spectre centré sur k_0 on pose par analogie avec les relations de De Broglie, et de Planck-Einstein :

$$\boxed{p = \hbar k_0}, \quad \boxed{E_c = \hbar \omega(k_0)}.$$

Ainsi la vitesse de groupe est telle que

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p}{m}.$$

Et par la relation de dispersion :

$$E_c = \hbar \omega(k_0) = \frac{(\hbar k_0)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}.$$

Ainsi le paquet d'ondes décrit bien une particule libre de :

$$\boxed{\text{quantité de mouvement } p \text{ et énergie cinétique } E_c = \frac{p^2}{2m}.$$

Lien avec Heisenberg

La relation spectrale du paquet d'ondes (qui vient des aspects transformée de Fourier) donne

$$\Delta x \Delta k \sim 1.$$

Avec la relation de De Broglie $p = \hbar k$, on en déduit l'ordre de grandeur

$$\Delta p \sim \hbar \Delta k.$$

Donc

$$\boxed{\Delta x \Delta p \sim \hbar.}$$

Interprétation

Pour localiser davantage la particule, il faut élargir le spectre en nombres d'onde, donc accroître l'incertitude sur la quantité de mouvement.

Courant de probabilité (MP*)

Dans le cadre unidimensionnel, le vecteur densité de courant de probabilité est défini par le transfert de probabilité à travers une abscisse x . Pour un paquet quasi monochromatique (spectre centré sur k_0) :

$$\vec{J}(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{k}_0 \text{ analogue à } \rho \vec{v}$$

Pour une onde de De Broglie $\psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$:

$$\vec{J}(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{k} = |A|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{k}.$$

Une onde de De Broglie sert également à modéliser un faisceau de particules indépendantes identiques, la constante A étant liée au nombre de particules par unité de longueur. Dans ce cas, $\vec{J}$ s'interprète comme un **vecteur densité de courant de particules** (cf. vecteur densité de courant électrique, et plus tard vecteur densité de courant thermique) : son flux à travers une surface est égal au nombre de particules qui traversent cette surface par unité de temps.

À retenir

- ① Une particule libre admet comme solutions élémentaires des ondes de De Broglie.
- ② La dispersion libre est

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

- ③ Les relations fondamentales sont

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k, \quad \lambda_{\text{DB}} = \frac{h}{p}.$$

- ④ Une particule unique est décrite par un paquet d'ondes se propageant à

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} = v.$$

- ⑤ La localisation spatiale obéit à

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar.$$