28/01/2015

Rappels :

- équation de Schrödinger décrit l'évolution de la fonction d'onde dans le temps :

$$i\hbar \partial_t \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t)$$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)}_{\text{1 particule en 1D}}, \qquad \underbrace{\hat{p} = -i\hbar \partial_x}_{\text{(opérateur d'impulsion)}}$$

- plus explicitement

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{xx} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

- comme l'équation est de 1er ordre p.r. t, il suffit de donner une condition initiale : $\psi(x, t=t_0) := \varphi(x)$.
- résolution est partiellement triviale (au niveau de la dynamique)

Formellement, $\psi(x,t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \psi(x, t=t_0)$

On peut écrire $\varphi(x)$ dans la base des vecteurs/fonctions propres de $\hat{H}$

$$\varphi(x) = \sum_n \underset{\substack{\uparrow \\ \text{cste}}}{c_n} \psi_{E_n}(x)$$

et, comme $\hat{H}\psi_{E_n}(x)$ coïncide par définition avec $E_n \psi_{E_n}$

$$\psi(x,t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \sum_n c_n \psi_{E_n}(x) =$$

$$= \sum_n c_n \, e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} \psi_{E_n}(x) =$$

$$= \sum_n \underbrace{c_n \, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}}_{\text{les coefs de la superposition évoluent mais de façon simple}} \psi_{E_n}(x)$$

D'où le vrai problème :

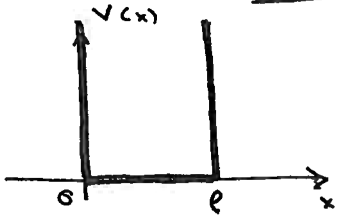
Pb| Décrire les fonctions propres de $\hat{H}$ et les valeurs propres associées :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad \leftarrow \text{états stationnaires}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

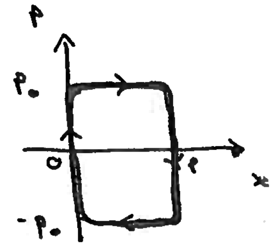
← équation de Schrödinger stationnaire

① Puits rectangulaire infini:



$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0,\ell] \\ \infty, & x \notin [0,\ell] \end{cases}$$

La trajectoire classique dans l'espace des phases :



Dans le cas quantique, on doit résoudre

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = E\,\psi(x), \quad x \in [0,\ell], \\ \psi(x=0) = \psi(x=\ell) \longleftarrow \text{conditions au bord} \\ \psi(x \notin [0,\ell]) = 0 \longleftarrow \text{la particule ne peut pas se trouver en dehors de l'intervalle } [0,\ell] \end{cases}$$

Classiquement, on ne peut pas avoir $E<0$. Dans le cas quantique

$$\psi''(x) = \underbrace{-\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=\lambda^2>0}\psi(x) \Longrightarrow \text{solution générale} : \psi(x) = A\,\mathrm{ch}\,\lambda x + B\,\mathrm{sh}\,\lambda x$$

$$\psi(x=0) = A\,\mathrm{ch}\,0 + B\,\mathrm{sh}\,0 = A = 0 \Rightarrow A=0$$

$$\psi(x=\ell) = B\,\underbrace{\mathrm{sh}\,\lambda\ell}_{>0} = 0 \Longrightarrow B=0 \quad \text{(solution triviale)}$$

↪ $E<0$ sont interdites.

Considérons maintenant le cas $E>0$:

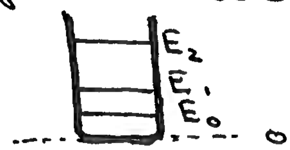
$$\psi''(x) + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{=k^2>0}\psi(x) = 0$$

- solution générale $\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx$
- $\psi(x=0) = A\cos 0 + B\sin 0 = A = 0 \Rightarrow A=0$
- $\psi(x=\ell) = B\sin k\ell = 0 \Longrightarrow k_n\ell = \pi(n+1)$, $n = 0,1,2,\dots$

Donc :

1). Le spectre des valeurs possible de l'énergie est discret:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m\ell^2}\pi^2(n+1)^2$$

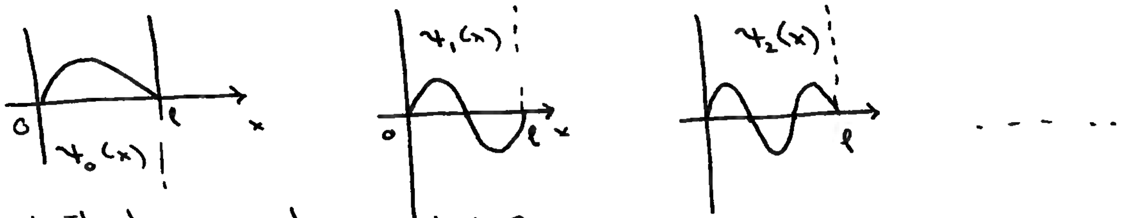


* l'état à énergie minimale s'appelle l'état fondamental

Ici l'énergie de l'état fondamental est non-nulle ! $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{\ell}\right)^2$

2). Les fonctions propres associées sont

$$\psi_n(x) = B_n \sin k_n x = B_n \sin \pi (n+1) x$$



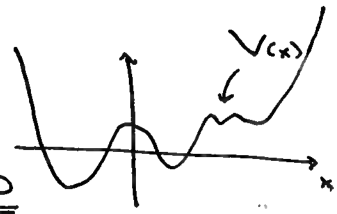
Distributions de probabilités:

(!) les densités ne sont pas uniformes, contrairement au cas classique; par exemple pour l'état fondamental il est plus probable de trouver la particule au centre du puits.

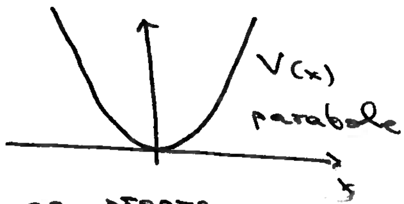
Observations:

- le numéro de l'état excité coïncide avec le nombre de noeuds de la fonction d'onde.
- le spectre est non-dégénérée

Il est possible de montrer que ces 2 propriétés restent vraies pour n'importe quel potentiel en 1D



(2) Oscillateur harmonique

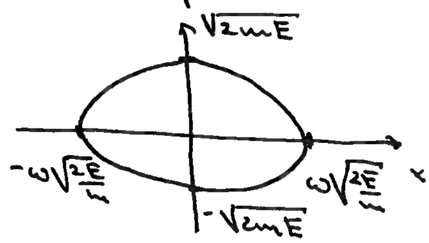


Dans le cadre classique:

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \underbrace{\frac{m\omega^2 x^2}{2}}_{V(x)}$$

ω est la fréquence propre

Trajectoire dans l'espace des phases est une ellipse



Dans le cas quantique, nous avons l'équation de Schrödinger stationnaire:

(*) $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}\psi(x) = E\,\psi(x)$$ ← on cherche le spectre de l'énergie et les fonctions propres

1). Tout d'abord on va essayer d'éliminer les quantités dimensionnées et simplifier l'équation (*). Notons que

$$[E] = [\hbar\omega]$$

Cela suggère de diviser l'équation par $\frac{\hbar\omega}{2}$ et de noter $\mathcal{E} := \frac{2E}{\hbar\omega}$ (énergie non-dimensionnée). On obtient

$$(*') \qquad -\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi = \mathcal{E}\psi$$

Notons que le coefficient $\frac{\hbar}{m\omega}$ a la dimension de longueur au carré :

$$\left[\frac{\hbar}{m\omega}\right] = \left[\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}\right] = \left[\frac{E}{m\omega^2}\right] = \left[\frac{\cancel{m}\, v^2}{\cancel{m}\,\omega^2}\right] = \left[\frac{(\omega R)^2}{\cancel{\omega^2}}\right] = [R]^2$$

On va alors introduire la notation

$$\frac{\hbar}{m\omega} = x_0^2\,, \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$ ← dimension de la longueur

échelle typique de la longueur dans notre problème

et réécrire $(*')$ comme

$$(*'') \qquad -x_0^2\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{x^2}{x_0^2}\psi = \mathcal{E}\psi$$

En passant par la suite à la coordonnée non-dimensionnée $u := \frac{x}{x_0}$, l'équation $(*'')$ devient

$$(*''') \qquad \boxed{\left(-\frac{d^2}{du^2} + u^2\right)\psi = \mathcal{E}\psi}$$

Essayons de résoudre cette équation directement.

- quel est le comportement de $\psi(u)$ à l'infini ? $(u \to \pm\infty)$

$\psi(u\to+\infty) \sim u^{-\alpha}$ avec $\alpha > 0$?

No! car $\begin{cases} \psi''(u) \sim \alpha(\alpha+1)u^{-\alpha-2} \\ u^2\psi \sim u^{-\alpha+2} \end{cases}$

$\psi(u\to+\infty) \sim e^{-\alpha u}$ avec $\alpha > 0$?

No! car $\begin{cases} \psi''(u) \sim \alpha^2 e^{-\alpha u} \\ u^2\psi \sim e^{-\alpha u}\,u^2 \end{cases}$ mais la piste exponentielle semble prometteuse

Essayons $e^{-\alpha u^2}$:

$\psi''(u) = \left(-2\alpha u\, e^{-\alpha u^2}\right)' \sim 4\alpha^2u^2e^{-\alpha u^2} +$ des termes plus petits

⇓

$-4\alpha^2u^2e^{-\alpha u^2} + u^2e^{-\alpha u^2} + \text{p.p.t.} = 0 \implies 4\alpha^2 = 1,\ \alpha = \pm\frac{1}{2}.$

- introduisons ~~la~~ $\psi(u) = e^{-u^2/2}\, h(u)$ pour "séparer" le comportement asymptotique à l'infini et essayons d'obtenir l'équation pour $h(u)$:

$$\psi'(u) = e^{-u^2/2}\,(h' - u h)$$

$$\psi''(u) = e^{-u^2/2}\left(h'' - h - u h' - u(h' - u h)\right) =$$

$$= e^{-u^2/2}\left(h'' - 2u h' - h + u^2 h\right)$$

d'où on obtient

$$-h'' + 2u h' + h - \cancel{u^2} h + \cancel{u^2} h = \varepsilon h$$

$$\Downarrow$$

(1) $$h'' - 2u h' + (\varepsilon - 1) h = 0$$

- on cherche la solution de (1) sous la forme d'une série

$$h(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k$$

$$\Downarrow$$

$$h'(u) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k u^{k-1} \Rightarrow \qquad u h' = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k u^k$$

$$\Downarrow$$

$$h''(u) = \left(\sum_{k=1}^{\infty} k a_k u^{k-1}\right)' = \sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) a_k u^{k-2} = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k u^{k-2}$$

$$= \left|\begin{matrix} n = k-2 \\ k = n+2 \end{matrix}\right| = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)\, a_{n+2}\, u^n = |n \to k| =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)(k+2)\, a_{k+2}\, u^k$$

En substituant dans l'équation, on obtient

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (k+1)(k+2) a_{k+2} - (2k - \varepsilon + 1) a_k \right\} u^k = 0$$

d'où une relation de récurrence

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+1)(k+2)}\, a_k$$

- que peut-on dire sur le comportement de la série $\sum_k a_k u^k$? Approximativement pour $k \to \infty$, on a $a_{k+2} \sim \frac{2}{k} a_k$

Hélas le même type de comportement asymptotique des coefficients est affiché par la fonction e^{u^2}, ce qui indique que la série pour $h(u)$ <u>diverges</u> à l'infini

La seule façon d'éviter la divergence est d'imposer qu'elle ne doit contenir qu'un nombre fini de termes. On obtient ainsi la condition suivante :

$$\mathcal{E} = 2k+1 \quad , \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

et la fonction propre associée est de la forme

$$\psi_k(u) = e^{-u^2/2} \underbrace{\mathrm{poly}_k(u)}_{H_k(u)} \longleftarrow \text{polynômes d'Hermite}$$

? montrer que ce polynôme est paire pour $k=2n$ et impaire pour $k = 2n+1$.

Le spectre de l'énergie de l'oscillateur harmonique est alors

$$\boxed{E_k = \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right)}$$

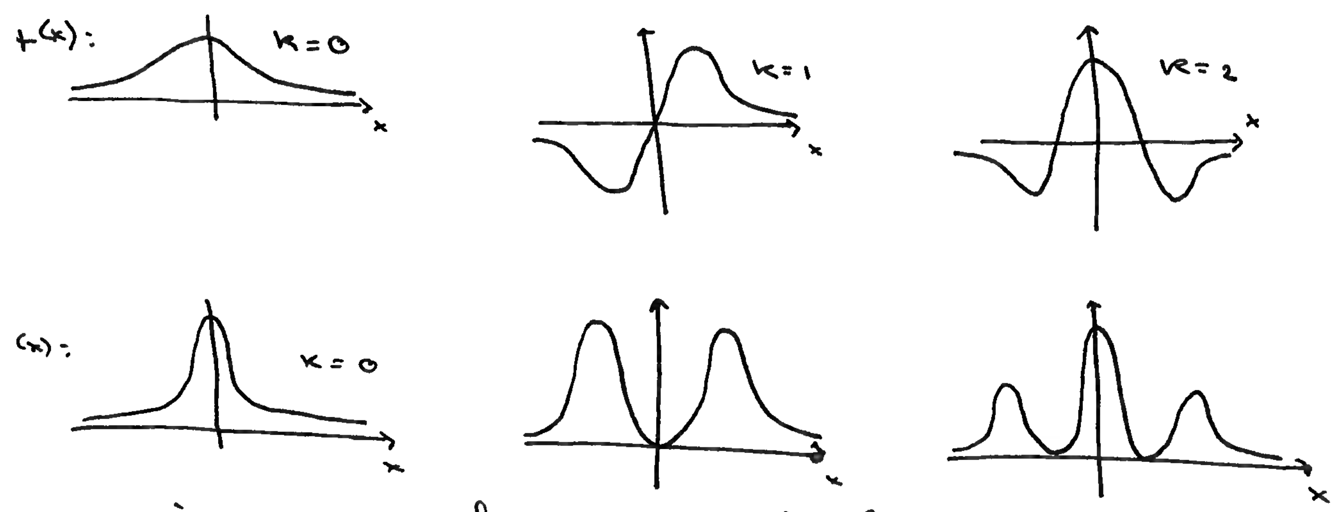
et les fonctions propres associées sont

$$\psi_k(x) = A_k \, H_k\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}}$$

A_k : cste de normalisation

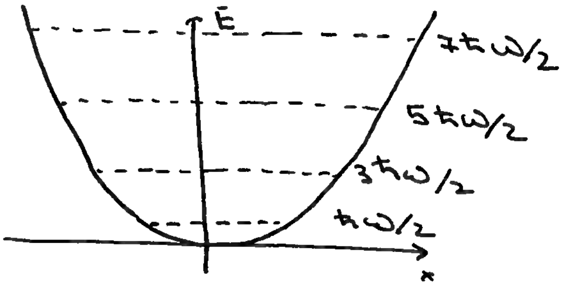
Remarques :

- l'énergie de l'état fondamental est non-nulle : $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$
- distributions de probabilités :



à nouveau le numéro de l'état excité coïncide avec le nombre des noeuds de la fonction d'onde.

③ Oscillateur harmonique II



Comme dans le cas du puits rectangulaire, le spectre est discret mais en plus les niveau de l'énergie sont équidistants.

Nous allons essayer d'expliquer ce phénomène et développer une méthode alternative de la solution de $(*''')$.

Nous avons

$$\underbrace{(\hat{p}_u^2 + u^2)}_{\hat{H}_u \text{ "hamiltonien" non-dimensionné}}\psi = \mathcal{E}\psi \,, \quad \text{avec } \hat{p}_u = -i\partial_u$$

- si u, p_u étaient des nombres complexes, on aurait pu écrire
  $$\hat{p}_u^2 + u^2 = (u - ip_u)(u + ip_u)$$
- ici ce sont des opérateurs mais nous allons tout de même essayer la factorisation ci-dessus, mais en prenant en compte que
  $$[u, p_u] = i \neq 0$$
  Nous avons en effet
  $$(\hat{u} - i\hat{p}_u)(\hat{u} + i\hat{p}_u) = \hat{u}^2 + \hat{p}_u^2 + i\hat{u}\hat{p}_u - i\hat{p}_u\hat{u} =$$
  $$= \hat{u}^2 + \hat{p}_u^2 + i\underbrace{[\hat{u}, \hat{p}_u]}_{=i} = \hat{u}^2 + \hat{p}_u^2 - 1$$
  et donc on peut écrire
  $$\hat{H}_u = \hat{p}_u^2 + \hat{u}^2 = \underbrace{(\hat{u} - i\hat{p}_u)}_{\substack{\hat{a}^+ \\ \text{opérateur} \\ \text{de création}}}\underbrace{(\hat{u} + i\hat{p}_u)}_{\substack{\hat{a} \\ \text{opérateur} \\ \text{d'annihilation}}} + 1$$

Montrons les propriétés algébriques suivantes:

1). $[\hat{a}^+, \hat{a}] = -2 \,, \qquad [\hat{a}^+, \hat{a}^+] = [\hat{a}, \hat{a}] = 0$

<u>Démonstration</u>

$$[\hat{a}^+, \hat{a}] = [\hat{u} - i\hat{p}_u, \hat{u} + i\hat{p}_u] = \underbrace{[\hat{u}, \hat{u}]}_{=0} + i\underbrace{[\hat{u}, \hat{p}_u]}_{=i} - i\underbrace{[\hat{p}_u, \hat{u}]}_{=-i} + \underbrace{[\hat{p}_u, \hat{p}_u]}_{=0} =$$
$$= -2 \,. \quad \blacktriangledown$$

2). $[\hat{a}^+\hat{a}, a^+] = 2\hat{a}^+ \,, \qquad [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}] = -2\hat{a}\,.$

<u>Démonstration</u>: Par exemple, $[\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+\hat{a}\,\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a} =$

$= \hat{a}^+[\hat{a}, \hat{a}^+] = 2\hat{a}^+ \quad \blacktriangledown$

3). Soit ψ_α une fonction propre de $\hat{H}_u$ avec la valeur propre α ($\hat{H}_u \psi_\alpha = \alpha \psi_\alpha$). Alors

- $\hat{a}^+ \psi_\alpha$ est aussi une fonction propre, mais avec la valeur propre $\alpha + 2$.
- $\hat{a}\, \psi_\alpha$ ——— " ———, mais la valeur propre associée est $\alpha - 2$.

Démonstration:

$$\hat{H}_u \hat{a}^+ \psi_\alpha = (\underbrace{\hat{H}_u \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{H}}_{[\hat{H}_u, \hat{a}^+] = 2\hat{a}^+} + \hat{a}^+ \hat{H}) \psi_\alpha =$$

$$= (2\hat{a}^+ + \hat{a}^+ \hat{H}) \psi_\alpha = 2\hat{a}^+ \psi_\alpha + \hat{a}^+ \underbrace{\hat{H} \psi_\alpha}_{= \alpha \psi_\alpha} = (\alpha + 2) \hat{a}^+ \psi_\alpha$$

De même,

$$\hat{H}_u \hat{a} \psi_\alpha = (\hat{H}_u \hat{a} - \hat{a} \hat{H} + \hat{a} \hat{H}) \psi_\alpha = ([\hat{H}_u, \hat{a}] + \hat{a} \hat{H}) \psi_\alpha =$$

$$= (-2\hat{a} + \hat{a} \hat{H}) \psi_\alpha = -2\hat{a} \psi_\alpha + \hat{a} \underbrace{\hat{H} \psi_\alpha}_{= \alpha \psi_\alpha} = (\alpha - 2) \psi_\alpha$$

Supposons qu'on a trouvé une valeur propre $\mathcal{E} = \alpha$ de $\hat{H}_u$ (+ la fonction propre associée). Alors le résultat précédent implique

$\hat{a}^+ \uparrow$ ---------- $\mathcal{E} = \alpha + 4$

$\hat{a}^+ \uparrow$ ---------- $\mathcal{E} = \alpha + 2$

—————— $\mathcal{E} = \alpha$

$\hat{a} \downarrow$ ---------- $\mathcal{E} = \alpha - 2$

$\hat{a} \downarrow$ ---------- $\mathcal{E} = \alpha - 4$

....

- naïvement le spectre est infini dans les deux directions.

Mais

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(u) \hat{H} \psi(u)\, du = \langle H \rangle_\psi = E$$

$$\| $$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^2 |\psi|^2 du + \int_{-\infty}^{\infty} |\partial_u \psi|^2 du > 0$$

Donc $E > 0$, ce qui donne une contradiction.

L'explication: il doit exister un état ψ_χ tel que

$$\hat{a} \psi_\chi = 0$$

En plus $\hat{H}_u \psi_\chi = (\hat{a}^+ \hat{a} + 1) \psi_\chi = \hat{a}^+ \underbrace{\hat{a} \psi_\chi}_{= 0} + \psi_\chi$, donc ψ_χ correspond à la valeur propre 1 de $\hat{H}_u$.

Cela reproduit le résultat précédent sur le spectre,

$$\mathcal{E}_k = 1 + 2k$$

et donne en plus l'expression suivante pour les fonctions propres : (non-normalisées)

$$\psi_k(u) = (\hat{a}^+)^k \, \psi_{\mathfrak{X}}(u) = \left(u - \frac{d}{du}\right)^k \psi_{\mathfrak{X}}(u)$$

Il nous reste à trouver $\psi_{\mathfrak{X}}$, mais cette fonction est déterminée par une équation différentielle de 1er ordre :

$$\left(u + \frac{d}{du}\right)\psi_{\mathfrak{X}}(u) = 0 \Rightarrow \psi_{\mathfrak{X}}' = -u\,\psi_{\mathfrak{X}} \Rightarrow \frac{\psi_{\mathfrak{X}}'}{\psi_{\mathfrak{X}}} = -u$$

ou alors

$$(\ln \psi_{\mathfrak{X}})' = -\frac{u^2}{2} + \text{cste} \Rightarrow \psi_{\mathfrak{X}}(u) = \text{cste.}\; e^{-u^2/2}$$

Donc, finalement, la forme des $\psi_k(u)$ est :

$$\psi_k(u) = \left(u - \frac{d}{du}\right)^k e^{-u^2/2}$$

En particulier :

$$\psi_0(u) = e^{-u^2/2}$$

$$\psi_1(u) = \left(u - \frac{d}{du}\right) e^{-u^2/2} = 2u\, e^{-u^2/2}$$

$$\psi_2(u) = \left(u - \frac{d}{du}\right)\psi_1(u) = 2\left(u - \frac{d}{du}\right) u e^{-u^2/2} =$$

$$= 2u^2 e^{-u^2/2} - 2\frac{d}{du}\left(u e^{-u^2/2}\right) =$$

$$= 2u^2 e^{-u^2/2} - 2e^{-u^2/2} + 2u^2 e^{-u^2/2} =$$

$$= (4u^2 - 2)\, e^{-u^2/2}$$

On obtient ainsi une procédure récursive de la construction des fonctions propres. Notons que nous avons construit en passant une méthode de calcul des polynômes d'Hermite.

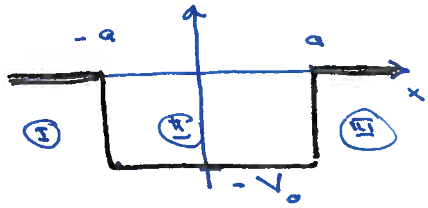
MQ - Cours du 10/02/2015

① Puits fini

Nous avons déjà décrit le spectre de l'énergie et les fonctions propres associées pour
- puits rectangulaire infini
- l'oscillateur harmonique

On va maintenant considérer le potentiel de la forme

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x \in [-a, a] \\ 0, & x \notin [-a, a] \end{cases}$$



L'équation de Schroedinger pour $\psi(x)$ (stationnaire):

domaine I : $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\,\psi(x), \qquad x < -a$$

domaine II : $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x), \quad x \in [-a, a]$$

domaine III : $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\,\psi(x), \qquad x > a$$

On sait que $E > V_{min} = -V_0$. Nous allons considérer le cas $(E < 0)$ qui correspond aux états liés (on va voir que $E \geq 0$ correspond au spectre continu).

Introduisons alors la notation suivante:

$$-\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \qquad \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = \lambda^2$$

(comme $-V_0 < E < 0$, les 2 quantités sont > 0).

Alors :

I $$\psi''(x) = k^2\psi(x)$$

II $$\psi''(x) + \lambda^2\psi(x) = 0$$

III $$\psi''(x) = k^2\psi(x).$$

D'où la solution :

(I) $\psi(x) = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx}$

(II) $\psi(x) = B_1 \cos \lambda x + B_2 \sin \lambda x$

(III) $\psi(x) = D_1 e^{kx} + D_2 e^{-kx}$

État normalisable $\Rightarrow \begin{cases} \psi(x \to +\infty) = 0 \Rightarrow D_1 = 0 \\ \psi(x \to -\infty) = 0 \Rightarrow C_2 = 0 \end{cases}$

En plus le potentiel est une fonction paire $\rightarrow$ hamiltonien $\hat{H}$ commute avec l'opérateur de parité $(\hat{\mathcal{P}}\psi)(x) = \psi(-x)$. Comme $\hat{H}$ et $\hat{\mathcal{P}}$ peuvent alors être diagonalisés simultanément, les fonctions propres de $\hat{H}$ sont soit paires (la valeur propre de $\hat{\mathcal{P}}$ vaut 1) ou impaires (respectivement, -1).

On choisit de travailler dans le secteur paire. Mais ça implique en plus :

- $D_2 = C_1$
- $B_2 = 0$.

La fonction d'onde est alors

(I) $\psi(x) = C e^{kx}$, $\quad x < -a$,

(II) $\psi(x) = B \cos \lambda x$, $\quad x \in [-a, a]$,

(III) $\psi(x) = C e^{-kx}$, $\quad x > a$.

Conditions de continuité :

$$\begin{cases} \psi(x = -a-0) = \psi(x = -a+0) \\ \psi'(x = -a-0) = \psi'(x = -a+0) \end{cases}$$

\+ les mêmes conditions en $x = a$ qui sont être automatiquement satisfaites grâce à la parité.

Continuité de la fonction d'onde:

(1) $$C e^{-ka} = B \cos \lambda a$$

— " — de la dérivée:

(2) $$k C e^{-ka} = -\lambda B \sin \lambda(-a) = \lambda B \sin \lambda a$$

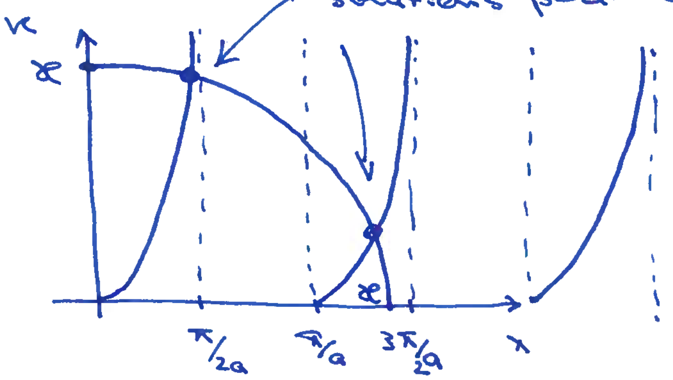
(1) et (2) impliquent (e.g. en faisant le rapport)

$$\boxed{k = \lambda \operatorname{tg} \lambda a}$$ ← la condition qui détermine le spectre (notons que λ et k ne sont pas indépendants)

Notons que

$$k^2 + \lambda^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \overset{\text{déf}}{=} \varkappa^2 \qquad \text{(indépendant de } E\text{ !)}$$

solutions pour le spectre



Remarques

1). Un nombre fini des états liés

2). Au moins un état lié (même si $\varkappa \to 0$).

3). Si $\varkappa \to 0$, les valeurs de k approximatifs sont associées à $\lambda = \frac{\pi}{2a}, \frac{3\pi}{2a}, \frac{5\pi}{2a}, \dots$ (niveaux profonds reproduisent le spectre du puits infini).

4). La limite $V_0 \to \infty$, $a \to 0$, $2Va \to g$ correspond au potentiel $V(x) = -g\,\delta(x) \Longrightarrow \lambda a \to 0$, $k \approx \lambda^2 a$

donc $k \approx \frac{2mV_0}{\hbar^2} a \approx \frac{mg}{\hbar^2}$ (un niveau)

(2) Relation d'incertitude

Soit $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C}$, $|\psi\rangle$ un vecteur d'état (normalisé : $\langle\psi|\psi\rangle = 1$)

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

$$\langle B\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$$

Introduisons

$$\tilde{A} = \hat{A} - \langle A\rangle \mathbb{1}$$

$$\tilde{B} = \hat{B} - \langle B\rangle \mathbb{1}$$

et notons que $[\tilde{A},\tilde{B}] = \hat{C}$. Notons

$$|\varphi\rangle = \tilde{A}|\psi\rangle, \qquad |\chi\rangle = \tilde{B}|\psi\rangle,$$

Alors

$$\langle\psi|[\tilde{A},\tilde{B}]|\psi\rangle = \langle\psi|(\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A})|\psi\rangle =$$

$$= \langle\varphi|\chi\rangle - \langle\chi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle - \overline{\langle\varphi|\chi\rangle} =$$

$$= 2i \, \mathrm{Im}\langle\varphi|\chi\rangle$$

et donc

$$|\langle\psi|[\tilde{A},\tilde{B}]|\psi\rangle| = 2|\mathrm{Im}\langle\varphi|\chi\rangle| \leqslant 2|\langle\varphi|\chi\rangle|$$

Cauchy-Schwarz

$$\leqslant 2\sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle\langle\chi|\chi\rangle} = 2\sqrt{\langle\psi|\tilde{A}^2|\psi\rangle\langle\psi|\tilde{B}^2|\psi\rangle} =$$

$$= 2(\Delta_\psi A)(\Delta_\psi B)$$

Conclusion :

$$(\Delta_\psi A)(\Delta_\psi B) \geqslant \frac{1}{2}|\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle|$$

Corollaire $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}$, $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C} = i\hbar\mathbb{1}$.

Ça veut dire que $\forall$ état quantique $|\psi\rangle$, on a

$$\Delta_\psi x \quad \Delta_\psi p \geqslant \frac{\hbar}{2}.$$

Démonstration de Cauchy-Schwarz:

Soit $$|\rho\rangle = |\varphi\rangle - \frac{\overline{\langle\varphi|\chi\rangle}}{\langle\chi|\chi\rangle}\,|\chi\rangle \quad , \text{ alors}$$

$$\langle\rho|\chi\rangle = \left\{\langle\varphi| - \frac{\langle\varphi|\chi\rangle}{\langle\chi|\chi\rangle}\langle\chi|\right\}|\chi\rangle = 0$$

et donc $|\rho\rangle \perp |\chi\rangle$. Comme

$$|\varphi\rangle = |\rho\rangle + \frac{\overline{\langle\varphi|\chi\rangle}}{\langle\chi|\chi\rangle}\,|\chi\rangle$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\rho|\rho\rangle + \frac{\langle\varphi|\chi\rangle\langle\chi|\varphi\rangle}{\langle\chi|\chi\rangle}$$

$$|\langle\varphi|\chi\rangle\langle\chi|\varphi\rangle|^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle\langle\chi|\chi\rangle - \underbrace{\langle\rho|\rho\rangle\langle\chi|\chi\rangle}_{\geq 0}$$

Cela veut dire que l'égalité est possible seulement si

$$|\rho\rangle = 0 \implies |\varphi\rangle \text{ est proportionnel à } |\chi\rangle.$$
$$(|\varphi\rangle = \alpha|\chi\rangle)$$

$$\langle\varphi|\chi\rangle - \overline{\langle\varphi|\chi\rangle} = (\bar{\alpha} - \alpha)\langle\chi|\chi\rangle \implies \alpha \in i\mathbb{R}$$

On obtient l'équation

$$(x - \langle x\rangle)\,\psi(x) = i \underset{\substack{\cap \\ \mathbb{R}}}{a}\,(-i\hbar\partial_x - \underbrace{\hbar k_0}_{\langle p\rangle})\,\psi(x)$$

$$i a\hbar(-i\partial_x - k_0)\psi(x) = (x - x_0)\psi(x)$$

$$x_0 = 0\,, \quad \psi(x) = e^{ik_0 x}\varphi(x)\,, \qquad a\hbar = \tilde{a}^{-1}$$

$$\partial_x\varphi(x) = \tilde{a}\,x\,\varphi(x) \implies \varphi(x) = \text{const.}\; e^{\tilde{a}\frac{x^2}{2}} \qquad \}\, a < 0$$