Mécanique quantique I, Corrigé série 1, Printemps 2013

Mercredi 27 février 2013 (EP, Auditoire Stückelberg)

Prof. D. van der Marel (dirk.vandermarel@unige.ch)

Exercices: J. Guillod (julien.guillod@unige.ch), O. Peil (oleg.peil@unige.ch)

I. PROBABILITÉS

La loi de probabilité discrète de densité $p : \mathbb{N} \to [0, 1]$ avec

$$\sum_{x\in\mathbb{N}} p(x) = 1\,,$$

est l'application

$$P(I) = \sum_{x\in\mathbb{N}} p(x)\,,$$

définie pour tout ensemble fini $I \subset \mathbb{N}$.
La loi de probabilité continue de densité $p : \mathbb{R} \to [0, 1]$ avec

$$\int_{\mathbb{R}} p(x) = 1\,,$$

est l'application

$$P(I) = \int_I p(x)\mathrm{d}x\,,$$

définie pour tout intervalle $I \subset \mathbb{R}$. La valeur moyenne d'une fonction φ est définie respectivement pour une loi discrète et une loi continue par

$$\langle\varphi\rangle = \sum_{x\in\mathbb{N}} \varphi(x)p(x)\,, \qquad\qquad \langle\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)p(x)\mathrm{d}x\,.$$

La valeur moyenne de la loi de probabilité P est définie par $\langle x\rangle$, et la variance est donnée par

$$(\Delta x)^2 = \left\langle \big(x - \langle x\rangle\big)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x\rangle^2\ .$$

Voir l'appendice *A.* du livre *Mécanique quantique* de J.-L. Basdevant et J. Dalibard pour plus de détails.
Calculer la moyenne et la variance des lois de probabilités suivantes :

a. La distribution de Gauss est

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\,, \qquad x \in \mathbb{R}\,.$$

Avec le changement de variable $y = x - \mu$, la moyenne est donnée par

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{\mathbb{R}} xp(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} x \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}x \\ &= \frac{\mu}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}y + \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} y \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}y \,.\end{aligned}$$

Le second terme étant l'intégrale d'une fonction impaire, il est nul et ainsi

$$\langle x \rangle = \frac{\mu}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}y = \mu \int_{\mathbb{R}} p(x)\mathrm{d}x = \mu \,.$$

En effectuant le même changement de variable $y = x - \mu$, la variance est donnée par

$$(\Delta x)^2 = \left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle = \int_{\mathbb{R}} (x-\mu)^2 \, p(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} y^2 \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \,.$$

Ensuite en intégrant par parties,

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \frac{-\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} y \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} \left[\exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right)\right] \mathrm{d}y = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}y \\ &= \sigma^2 \int_{\mathbb{R}} p(x)\mathrm{d}x = \sigma^2 \,.\end{aligned}$$

b. La distribution de Poisson est

$$p(n) = \frac{\lambda^n \mathrm{e}^{-\lambda}}{n!} \,, \qquad n \in \mathbb{N} \,.$$

La moyenne est donnée par

$$\begin{aligned}\langle n \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} np(n) = \mathrm{e}^{-\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{\lambda^n}{n!} = \lambda \mathrm{e}^{-\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} \\ &= \lambda \mathrm{e}^{-\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} = \lambda \sum_{n=0}^{\infty} p(n) = \lambda \,,\end{aligned}$$

et le second moment par

$$\begin{aligned}\left\langle n^2 \right\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 p(n) = \mathrm{e}^{-\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} n^2 \frac{\lambda^n}{n!} = \mathrm{e}^{-\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{\lambda^n}{(n-1)!} \\ &= \lambda \mathrm{e}^{-\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{\lambda^n}{n!} = \lambda \mathrm{e}^{-\lambda} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{\lambda^n}{n!} \right) \\ &= \lambda \left(\sum_{n=0}^{\infty} p(n) + \sum_{n=0}^{\infty} np(n) \right) = \lambda \left(1 + \lambda\right) \,.\end{aligned}$$

Ainsi la variance de la loi de Poisson est

$$(\Delta n)^2 = \left\langle n^2 \right\rangle - \langle n \rangle^2 = \lambda \,.$$

II. TRANSFORMATION DE FOURIER

La transformation de Fourier d'une fonction $f(x)$ est la fonction

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x) \mathrm{d}x$$

et la transformation inverse est donnée par

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \hat{f}(k) \mathrm{d}k \,.$$

Voir l'appendice B. du livre *Mécanique quantique* de J.-L. Basdevant et J. Dalibard pour plus de détails.

a. La transformation de Fourier de $f'(x)$ est donnée en intégrant par parties

$$\hat{f'}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f'(x) \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x)\right]_{x=-\infty}^{+\infty} + \frac{\mathrm{i}k}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x) \mathrm{d}x = \mathrm{i}k\hat{f}(k) \,.$$

b. La transformation de Fourier de la gaussienne est

$$\begin{aligned}
\hat{f}(k) &= \frac{1}{2\pi\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2} - \mathrm{i}kx\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2\pi\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\left(x + \mathrm{i}k\sigma^2\right)^2}{2\sigma^2} - \frac{\sigma^2 k^2}{2}\right) \mathrm{d}x \\
&= \exp\left(-\frac{\sigma^2 k^2}{2}\right) \frac{1}{2\pi\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{\left(x + \mathrm{i}k\sigma^2\right)^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 k^2}{2}\right) \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right) \mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 k^2}{2}\right) \,.
\end{aligned}$$

c. Le produit scalaire sur l'espace $L^2(\mathbb{R})$ est défini par

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1^*(x) f_2(x) \mathrm{d}x \,.$$

Avec la définition de la transformation de Fourier de $f_2(x)$,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{f}_1, \hat{f}_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}_1^*(k) \hat{f}_2(k) \mathrm{d}k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}_1^*(k) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f_2(x) \mathrm{d}x\right) \mathrm{d}k \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \hat{f}_1^*(k) f_2(x) \mathrm{d}x \mathrm{d}k \,,
\end{aligned}$$

et d'autre part avec la transformation inverse de $f_1(x)$

$$\begin{aligned}
\langle f_1, f_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_1^*(x) f_2(x) \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \hat{f}_1^*(k) \mathrm{d}k\right) f_2(x) \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \hat{f}_1^*(k) f_2(x) \mathrm{d}x \mathrm{d}k \,,
\end{aligned}$$

ce qui démontre l'égalité demandée. Cette relation est appelée théorème de Parseval-Plancherel et démontre que la transformée de Fourier préserve le produit scalaire de $L^2(\mathbb{R})$.

d. Soit la densité de probabilité donnée par

$$p(x) = \left|f(x)\right|^2,$$

où $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ est une fonction telle que

$$\int_{\mathbb{R}} p(x)\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} \left|f(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 1\,.$$

Par le résultat précédent,

$$\int_{\mathbb{R}} \left|\hat{f}(k)\right|^2 \mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}} \left|f(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 1\,,$$

et donc $\left|\hat{f}(k)\right|^2$ peut être considérée comme la loi de probabilité de la variable k. Le but est de montrer que

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}\,,$$

où les variances sont définies par

$$(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \langle x\rangle)^2 \left|f(x)\right|^2 \mathrm{d}x\,, \qquad (\Delta k)^2 = \int_{\mathbb{R}} (k - \langle k\rangle)^2 \left|\hat{f}(k)\right|^2 \mathrm{d}k\,.$$

La preuve se fait en deux étapes : premièrement se ramener au cas où $\langle x\rangle = 0$ puis $\langle k\rangle = 0$ et deuxièmement prouver le résultat dans ce cas là.

(i) Avec le changement de variable $y = x - \langle x\rangle$ et en définissant $g(y) = f(y + \langle x\rangle)$, alors

$$(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \langle x\rangle)^2 \left|f(x)\right|^2 \mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} y^2 \left|g(y)\right|^2 \mathrm{d}y\,.$$

Comme

$$\begin{aligned}\hat{f}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} g(x - \langle x\rangle)\mathrm{d}x \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\langle x\rangle} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ky} g(y)\mathrm{d}y = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\langle x\rangle} \hat{g}(k)\,,\end{aligned}$$

alors

$$(\Delta k)^2 = \int_{\mathbb{R}} (k - \langle k\rangle)^2 \left|\hat{f}(k)\right|^2 \mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}} (k - \langle k\rangle)^2 \left|\hat{g}(k)\right|^2 \mathrm{d}k\,,$$

et on c'est ramené au cas où $\langle x\rangle = 0$. De manière similaire, en posant $l = k - \langle k\rangle$, et en définissant $\hat{h}(l) = \hat{g}(l + \langle k\rangle)$, alors on se ramène à $\langle k\rangle = 0$, car

$$(\Delta k)^2 = \int_{\mathbb{R}} (k - \langle k\rangle)^2 \left|\hat{g}(k)\right|^2 \mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}} l^2 \left|\hat{h}(l)\right|^2 \mathrm{d}l\,.$$

Comme

$$\begin{aligned}g(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ky} \hat{g}(k)\mathrm{d}k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ky} \hat{h}(k - \langle k\rangle)\mathrm{d}k \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}y\langle k\rangle} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ly} \hat{h}(l)\mathrm{d}l = \mathrm{e}^{\mathrm{i}y\langle k\rangle} h(y)\,,\end{aligned}$$

alors nous nous sommes bien ramené au cas où $\langle x\rangle = \langle k\rangle = 0$,

$$(\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} y^2 \left|g(y)\right|^2 \mathrm{d}y = \int_{\mathbb{R}} y^2 \left|h(y)\right|^2 \mathrm{d}y\,.$$

(ii) Par le point précédent, on suppose sans perdre de généralité que $\langle x\rangle = \langle k\rangle = 0$, et on définit pour $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$I(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} \left|xf(x) + \lambda f'(x)\right|^2 \mathrm{d}x\,.$$

En calculant le module, nous avons,

$$I(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} x^2 \left|f(x)\right|^2 \mathrm{d}x + \lambda \int_{\mathbb{R}} x\left(f(x)f'^*(x) + f^*(x)f'(x)\right)\mathrm{d}x + \lambda^2 \int_{\mathbb{R}} \left|f'(x)\right|^2 \mathrm{d}x\,.$$

Comme $\langle x\rangle = 0$, le première terme est $(\Delta x)^2$. En intégrant par partie, le deuxième terme est

$$\int_{\mathbb{R}} x\left(f(x)f'^*(x) + f^*(x)f'(x)\right)\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(f(x)f^*(x)\right)\mathrm{d}x = -\int_{\mathbb{R}} \left|f(x)\right|^2 \mathrm{d}x = -1\,.$$

Comme la transformée de Fourier de $f'(x)$ est $\mathrm{i}k\hat{f}(k)$, alors le troisième terme est

$$\int_{\mathbb{R}} \left|f'(x)\right|^2 \mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}} \left|\mathrm{i}k\hat{f}(k)\right|^2 \mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}} k^2 \left|\hat{f}(k)\right|^2 \mathrm{d}k = (\Delta k)^2\,,$$

puisque $\langle k\rangle = 0$ par hypothèse. Par conséquent en regroupant le tout, nous obtenons

$$I(\lambda) = (\Delta x)^2 - \lambda + \lambda^2 (\Delta k)^2\,.$$

Par définition, $I(\lambda) \geq 0$ pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$, et donc cela est possible uniquement si le discriminant est négatif, c'est-à-dire si

$$1 - 4(\Delta x)^2 (\Delta k)^2 \leq 0\,,$$

ce qui prouve le résultat annoncé.

A remarquer que l'inégalité est atteinte si et seulement si le discriminant est nul, c'est-à-dire si $I(\lambda) = 0$ pour un certain λ. Par définition de $I(\lambda)$ ceci est vrai si et seulement si l'intégrant est nul,

$$xf(x) + \lambda f'(x) = 0\,,$$

ou de manière équivalente,

$$f(x) = A\exp\left(\frac{-x^2}{2\lambda}\right)\,.$$

Par conséquent cela démontre que $\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$ si et seulement si $f(x)$ est une gaussienne, auquel cas $\hat{f}(k)$ est aussi une gaussienne.