Université Moulay Ismaïl

F.S.T.E.

Département de physique

Année Universitaire 2015/2016

Parcours : MIP S4 (Section 1)

Module P147

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 3

I- Transformation de Fourier

On rappelle qu'en terme d'impulsion, la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\psi(x)$ au point p sera définie par:

$$\overline{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

On peut déduire $\psi(x)$ à partir de $\overline{\psi}(p)$ à l'aide de la transformation inverse de Fourier:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}(p) e^{+ipx/\hbar} dp$$

Exercices:

1/- Calculer les transformées de Fourier $g(k) = F[\psi(x)](k)$ et $\overline{\psi}(p)$ des fonctions suivantes:

a- $\psi(x) = \begin{cases} 1/a & -a/2 \le x \le a/2 \\ 0 & |x| \rangle a/2 \end{cases}$

b- $\psi(x) = e^{\frac{-|x|}{a}} \quad , a > 0$

c- $\psi(x) = e^{\frac{-x^2}{a^2}}$

On admettra que l'on a: $\displaystyle\int_{-\infty+i\alpha}^{+\infty+i\alpha} e^{-\beta z^2} dz = \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{1/2} \qquad \forall \alpha \in \Re$

2/- Evaluer les relations de récurrence suivantes:

$$F[\psi^{(n)}(x)](k) = (ik)^n F[\psi(x)](k)$$

et $$\overline{\psi^{(n)}}(p) = \left(i\frac{p}{\hbar}\right)^n \overline{\psi}(p)$$

où $\psi^{(n)}(x)$ désigne la dérivée $n^{ième}$ de $\psi(x)$ dont les limites sont supposées nulles lorsque x tend vers $\pm\infty$.

3/- On appellera produit de convolution de deux fonctions $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$, l'intégrale (si elle existe) :

$$(\psi_1 * \psi_2)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\psi_2(x-y)dy$$

Montrer que l'on a bien : $F[(\psi_1 * \psi_2)(x)](k) = (2\pi)^{1/2} F[\psi_1(x)](k) \times F[\psi_2(x)](k)$, et $\overline{(\psi_1 * \psi_2)}(p) = (2\pi\hbar)^{1/2}\, \overline{\psi_1}(p)\overline{\psi_2}(p)$

4/- Démontrer l'égalité : $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi_1}^*(p)\overline{\psi_2}(p)dp$, en déduire l'identité de Parseval-Plancherel : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\overline{\psi}(p)|^2 dp$.

II- Fonction delta de Dirac

On introduit la fonction $\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o)$ qui ne prend de valeur appréciable que dans un intevalle de longueur ε autour de x_o, et telle que : $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_o)dx = 1$ (5)

on appellera fonction δ de Dirac centrée au point x_o, la limite d'une telle fonction $\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o)$ lorsque ε tend vers zéro: $\delta(x - x_o) = \lim_{\varepsilon \to 0} \left[\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o)\right]$

Exercices:

1/- Montrer que les fonctions suivantes satisfont la condition (5):

a- $\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o) = \begin{cases} 1/\varepsilon & -\varepsilon/2 \le x - x_o \le \varepsilon/2 \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$

b- $\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o) = \frac{1}{2\varepsilon} \exp\left(-\frac{|x - x_o|}{\varepsilon}\right)$

c- $\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o) = \frac{1}{\varepsilon\pi^{1/2}} \exp\left[-\frac{(x - x_o)^2}{\varepsilon^2}\right]$

d- $\delta^{(\varepsilon)}(x - x_o) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{(x - x_o)^2 + \varepsilon^2}$

2/- Démontrer la propriété fondamentale de la fonction de Dirac

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_o) f(x)dx = f(x_o)$$

Pour cela on remarquera que dans l'intervalle effectif d'intégration $\left[x_o - \frac{\varepsilon}{2}, x_o + \frac{\varepsilon}{2}\right]$, l'on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_o) f(x)dx \cong f(x_o)$$

3/- Calculer les transformées de Fourier $F[\delta(x - x_o)](k)$ et $\overline{\delta}(p)$ de $\delta(x - x_o)$. En déduire que $\delta(x - x_o)$ s'écrit explicitement :

$$\delta(x - x_o) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ik(x - x_o)} dk = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ip(x - x_o)/\hbar} dp \qquad (6)$$

4/- Montrer que $\delta(cx) = \frac{1}{|c|}\delta(x)$, en déduire que $\delta(x)$ est paire.

5/- En utilisant l'équation (6), montrer que l'intégrale $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}(p) e^{+ipx/\hbar} dp$ est bien égale à $\psi(x)$; redémontrer alors l'identité de Parseval-Plancherel.

Série n° 3 (1)

I. Transformation de Fourier

1.) Calculons les transformées de Fourier $g(k) = F[\psi(x)](k)$ et $\overline{\psi}(p)$ des fonctions suivantes :

a. $\psi(x) = \begin{cases} 1/a & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & |x| > a/2 \end{cases}$

$$g(k) = F[\psi(x)](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{-a/2} \psi(x) e^{-ikx} dx + \int_{-a/2}^{a/2} \psi(x) e^{-ikx} dx + \int_{a/2}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{a} e^{-ikx} dx = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} \left(\frac{-1}{ik}\right) \Big[e^{-ikx} \Big]_{-a/2}^{a/2}$$

$$= \frac{+i}{ak\sqrt{2\pi}} \left[e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{+ik a/2} \right] = \frac{2}{ak\sqrt{2\pi}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Soit $\boxed{g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{\left(\frac{ka}{2}\right)}}$ $\Rightarrow \overline{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} g\left(\frac{p}{\hbar}\right)$

donc $$\overline{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sin\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}$$

b. $\psi(x) = e^{-|x|/a}$ $a > 0$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{0} e^{+\frac{x}{a}} e^{-ikx} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{x}{a}} e^{-ikx} dx \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_{-\infty}^{0} e^{\left(\frac{1}{a} - ik\right)x} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{\left(-\frac{1}{a} - ik\right)x} dx \right]$$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{\left(\frac{1}{a}-ik\right)} e^{\left(\frac{1}{a}-ik\right)x}\Big]_{-\infty}^{0} + \frac{1}{-\frac{1}{a}-ik} e^{\left(-\frac{1}{a}-ik\right)x}\Big]_{0}^{+\infty}\right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{1}{\frac{1}{a}-ik} - \frac{1}{-\frac{1}{a}-ik}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left[\frac{2/a}{(1/a)^2+k^2}\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{\bar{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2/a}{(1/a)^2+\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2}}$$

c- $\psi(x) = e^{-x^2/a^2}$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{a^2}x^2} e^{-ikx} dx\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x^2}{a^2}+ikx\right)} dx$$

or $\frac{x^2}{a^2} + ikx = \left(\frac{x}{a} + i\frac{ka}{2}\right)^2 + \frac{k^2a^2}{4}$

d'où $g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{a}+i\frac{ka}{2}\right)^2} dx$

on pose $u = \frac{x}{a} + i\frac{ka}{2} \Rightarrow du = \frac{dx}{a}$ $\begin{cases} x \to -\infty : u \to -\infty + i\frac{ka}{2} \\ x \to +\infty : u \to +\infty + i\frac{ka}{2} \end{cases}$

donc : $g(k) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \int_{-\infty+i\frac{ka}{2}}^{+\infty+i\frac{ka}{2}} e^{-u^2} du$

Sachant que $\int_{-\infty+i\alpha}^{+\infty+i\alpha} e^{-\beta z^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$ $\forall \alpha \in \mathbb{R}$

nous avons :
$$g(k) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}} \times \sqrt{\pi}$$

Soit $\boxed{g(k) = \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-\frac{k^2a^2}{4}}}$

d'où : $\bar{\Psi}(p) = \frac{a}{\sqrt{2\hbar}} e^{-\left(p^2a^2/4\hbar^2\right)}$

2) évaluons les relations de récurrence :

$$F\left[\psi^{(n)}(x)\right](k) = (ik)^n F\left[\psi(x)\right](k) \quad (*)$$

* pour $n=1$

$$F\left[\psi'(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi'(x) e^{-ikx} dx$$

on pose $\begin{cases} \psi'(x) = f'(x) \\ e^{-ikx} = g(x) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f(x) = \psi(x) \\ g'(x) = -ik e^{-ikx} \end{cases}$

$$F\left[\psi'(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \cancel{\left[\psi(x) e^{-ikx}\right]_{-\infty}^{+\infty}} \to 0 - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \times (-ik) \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (ik) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} = ik \; F\left[\psi(x)\right](k)$$

* Supposons l'égalité (*) vraie pour l'ordre n et montrons qu'elle l'est pour l'ordre $n+1$:

$$F\left[\psi^{(n+1)}(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{(n+1)}(x) e^{-ikx} dx$$

on pose $\begin{cases} \psi^{(n+1)}(x) = f'(x) \\ e^{-ikx} = g(x) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f(x) = \psi^{(n)}(x) \\ g'(x) = (-ik) e^{-ikx} \end{cases}$

$$\Rightarrow F\left[\psi^{(n+1)}(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \cancel{\left[\psi^{(n)}(x) e^{-ikx}\right]_{-\infty}^{+\infty}} \to 0 + ik \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{(n)}(x) e^{-ikx} dx \right\}$$

$$= (ik) F\left[\psi^{(n)}(x)\right](k) = ik \times (ik)^n F\left[\psi(x)\right](k)$$

donc : $F\left[\psi^{(n+1)}(x)\right](k) = (ik)^{n+1} F\left[\psi(x)\right](k)$

Il s'en suit que : $\overline{\psi^{(n)}(p)} = \left(i\frac{p}{\hbar}\right)^n \overline{\psi}(p)$

3°) Sachant que le produit de convolution est donné par :

$$(\psi_1 * \psi_2)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, \psi_2(x-y)\, dy$$

montrons que : $F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \sqrt{2\pi}\, F\left[\psi_1(x)\right](k)\, F\left[\psi_2(x)\right](k)$

$$F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\psi_1 * \psi_2)(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, \psi_2(x-y)\, dy \right) e^{-ikx}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2(x-y)\, e^{-ikx}\, dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, e^{-iky}\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2(x-y)\, e^{-ik(x-y)}\, dx$$

on pose $u = x - y \Rightarrow du = dx$

$$\Rightarrow F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(y)\, e^{-iky}\, dy \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2(u)\, e^{-iku}\, du$$

$$\Rightarrow F\left[(\psi_1 * \psi_2)(x)\right](k) = \sqrt{2\pi}\, F\left[\psi_1(x)\right](k)\, F\left[\psi_2(x)\right](k)$$

(x, y ou u sont des variables muettes)

Il s'en suit que :

$$\boxed{\overline{\psi_1 * \psi_2}(p) = \sqrt{2\pi\hbar}\; \overline{\psi_1}(p)\, \overline{\psi_2}(p)}$$

4) $$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx \overset{?}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_1^*(p)\,\overline{\psi}_2(p)\,dp$$

par définition :
$$\overline{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, e^{-ikx}\, dx \qquad k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}(p)\, e^{+ikx}\, dp \qquad kx = px/\hbar$$

donc :
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_2(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp \right) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi}_2(p)\, dp \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\, e^{ipx/\hbar}\, dx}_{\overline{\psi}_1^*(p) * \sqrt{2\hbar\pi}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx = \int \overline{\psi}_1^*(p)\,\overline{\psi}_2(p)\,dp}$$

dans le cas où $\psi_1 = \psi_2$ nous aurons :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\overline{\psi}(p)|^2\, dp.}$$ identité de Parseval - Plancherel

II - Fonction delta de Dirac :

$$\delta(x - x_0) = \lim_{\varepsilon \to 0} \left[\delta^{(\varepsilon)}(x - x_0) \right]$$

avec $$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\, dx = 1$$

1) a) $$\delta^{(\varepsilon)}(x - x_0) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} & -\frac{\varepsilon}{2} \leq x - x_0 \leq \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

satisfait-elle la relation précédente ?

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx = \cancelto{0}{\int_{-\infty}^{-\varepsilon/2} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx} + \int_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx$$

$$+ \cancelto{0}{\int_{\varepsilon/2}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon}\Big[x \Big]_{-\varepsilon/2}^{\varepsilon/2} = 1$$

b) $$\delta^{(\varepsilon)}(x - x_0) = \frac{1}{2\varepsilon} \exp\left(-\frac{|x - x_0|}{\varepsilon}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx = \frac{1}{2\varepsilon}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{|x - x_0|}{\varepsilon}\right) dx$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon}\left[\int_{-\infty}^{x_0} \exp +\left(\frac{x - x_0}{\varepsilon}\right) dx + \int_{x_0}^{+\infty} \exp -\left(\frac{x - x_0}{\varepsilon}\right) dx\right.$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon}\left[\varepsilon \exp \frac{x - x_0}{\varepsilon}\Big]_{-\infty}^{x_0} + \varepsilon \exp \frac{-x + x_0}{\varepsilon}\Big]_{x_0}^{+\infty} \right]$$

$$= \frac{1}{2\varepsilon}\Big[\varepsilon(\cancel{1}) + \varepsilon\Big] = 1.$$

c) $$\delta^{(\varepsilon)}(x - x_0) = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{\varepsilon^2}\right]$$ on pose $x - x_0 = z$, $\beta = \frac{1}{\varepsilon^2}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x - x_0)\,dx = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp -\beta z^2\,dz = \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} * \varepsilon\sqrt{\pi} = 1.$$