Evolutions comparées d'un paquet d'onde

Dans cette feuille d'exercices on va étudier précisément l'évolution de plusieurs "paquets d'onde", par les équations de la chaleur et de Schrödinger sur l'espace euclidien $\mathbb{R}^d$, surtout en dimension 1. Elle est donc assez calculatoire (essentiellement des intégrales gaussiennes), mais permet de mettre en évidence les propriétés différentes de propagation de ces équations.

Exercice 9.1 Evolution par l'équation de la chaleur

On considère l'équation de la chaleur sur $\mathbb{R}$,

$$\partial_t u = \Delta u. \tag{1}$$

On va calculer les évolutions en $t > 0$ de diverses densités initiales. On se servira de la transformée de Fourier, en utilisant au maximum les propriétés algébriques de celle-ci (covariance p/r aux translations, etc).

1. **Paquet gaussien** On se donne un paramètre $\alpha > 0$, et une densité gaussienne centrée en l'origine, $u_\alpha(x) = C_\alpha e^{-|x|^2/2\alpha}$. Elle représente une densité initiale de particules.
   (a) Calculer alors le préfacteur C_α, de manière à ce que la masse totale de particules soit 1. Calculer la largeur[1] de la distribution u_α.
   (b) Calculer l'évolution $u_\alpha(t)$ de la densité initiale u_α par l'équation de la chaleur. Calculer la masse totale de la distribution $u_\alpha(t)$. Quel est son centre? Comment varie sa largeur en fonction du temps?
   (c) Pour un certain $x_0 \in \mathbb{R}$, on considère la distribution gaussienne translatée $u_{\alpha,x_0}(x) = C_\alpha e^{-|x-x_0|^2/2\alpha}$. Calculer son évolution $u_{\alpha,x_0}(t)$. Quel sont le centre et la largeur de cette distribution?
2. **Densité sinusoïdale**

   On considère à présent une densité initiale donnée par une sinusoïde $v_k(x) = \cos(kx)^2$.

   Calculer l'évolution $v_k(t)$ de cette densité par l'équation de la chaleur. On pourra procéder en décomposant $v_k(x)$ en modes de Fourier, et calculer l'évolution de ces derniers séparément.
   Commenter la périodicité de $v_k(t)$, ainsi que ses valeurs maximale et minimale.
3. **Densité gaussienne à modulation sinusoïdale**

   On considère à présent une densité initiale de la forme $w_{\alpha,k}(x) = C_{\alpha,k} e^{-|x|^2/2\alpha} \cos(kx)^2$.
   (a) Calculer la constante $C_{\alpha,k}$ pour que cette densité soit de masse totale 1.
   (b) En décomposant $\cos(kx)^2$ en modes de Fourier, calculer l'évolution de cette densité, $w_{\alpha,k}(t,x)$.

[1] Une densité de probabilité $\rho(x)$ admet un "centre" (position moyenne) $\bar{x} = \int x\rho(x)dx$, et une "largeur" donnée par l'écart-type $\Delta\mathrm{x} = \left(\int (x-\bar{x})^2 \rho(x)dx\right)^{1/2}$.

(c) Ecrire celle-ci comme le produit d'une gaussienne et d'une modulation trigonométrique. Indiquer la période, et les valeurs maximale et minimale, de la modulation trigonométrique.

(d) Vérifier la cohérence des calculs avec les questions précédentes en prenant les limites $k \to 0$ ou $\alpha \to \infty$. Que se passe-t-il dans la limite de modulation rapide $k \to \infty$?

Exercice 9.2 Evolution par l'équation de Schrödinger

On va considérer des données initiales similaires à celles de l'exercice précédent (paquets d'onde gaussiens modulés sinusoïdalement), mais les faire évoluer par l'équation de Schrödinger sur $\mathbb{R}$,

$$i\partial_t u = -\Delta u. \tag{2}$$

1. **Paquet d'onde gaussien - état cohérent**

   En mécanique quantique, on appelle état cohérent de position x_0, et d'impulsion ξ_0, une fonction d'onde de la forme

   $$u_{x_0,\xi_0}(x) = \tilde{C}_\alpha \, e^{-\frac{x^2}{2\alpha} + i\xi_0 x},$$

   où $\alpha > 0$ est un paramètre donné.

   (a) On rappelle que $|u(x)|^2$ représente la densité de probabilité de présence de la particule au point x. Calculer le préfacteur $\tilde{C}_\alpha > 0$ pour que la probabilité totale soit égale à 1. Quelle est la largeur de cette distribution de probabilité?

   (b) Calculer la transformée de Fourier $\hat{u}_{x_0,\xi_0}(\xi)$, en la normalisant pour que $|\hat{u}_{x_0,\xi_0}(\xi)|^2$ représente une densité de probabilité (en mécanique quantique, c'est la densité de probabilité que la particule ait l'impulsion ξ). Quel est le centre de cette distribution de probabilité? Quelle est sa largeur? Calculer le produit des deux largeurs.

2. **Evolution de l'état cohérent**

   (a) Calculer l'évolution de l'état cohérent $u_{x_0,\xi_0}(t,x)$ par l'équation de Schrödinger. On pourra pour cela se servir des expressions de la partie 3 dans l'exercice précédent, en montrant que ces expressions (pour $t > 0$) peuvent être prolongées holomorphiquement dans une certaine région de $\mathbb{C}$.

   (b) Montrer que la densité de probabilité $|u_{x_0,\xi_0}(t,x)|^2$ est une Gaussienne, dont on déterminera le centre et la largeur.

   (c) Même question pour la densité de probabilité $|\hat{u}_{x_0,\xi_0}(t,\xi)|^2$.

   (d) Calculer le produit des deux largeurs.

   (e) Expliquer en quelle mesure l'état cohérent évolué $u_{x_0,\xi_0}(x)$ représente une "version quantique" d'une particule classique ponctuelle se déplaçant en ligne droite (on rappelle qu'en mécanique classique l'impulsion est proportionnelle à la vitesse).

   L'augmentation de la largeur $\Delta x(t)$ en fonction du temps est typique du phénomène de *dispersion*, un phénomène commun à l'équation de la chaleur et de Schrödinger, mais absent de l'équation des ondes. On dit que les deux premières équations sont *dispersives*.

3. **Combinaison linéaire d'états cohérents**

(a) On considère un état initial défini par $v(x) = C\left(u_{x_0,\xi_0}(x) + e^{i\theta}u_{x_0,-\xi_0}(x)\right)$, avec $\theta \in [0, 2\pi)$ une phase arbitraire et $C > 0$ une constante de normalisation. Montrer qu'on peut supposer $x_0 = 0$ pour faire les calculs, et calculer C pour que la probabilité soit normalisée (on pourra se servir de la question 3 de l'exercice précédent).

(b) Calculer l'évolution $v(t, x)$, ainsi que la probabilité de présence $|v(x)|^2$ associée. Les oscillations de cette densité sont caractéristiques du phénomène d'*interférence* entre les deux paquets d'onde. Vérifier que ces oscillations s'atténuent lorsque les deux paquets d'onde s'éloignent l'un de l'autre.