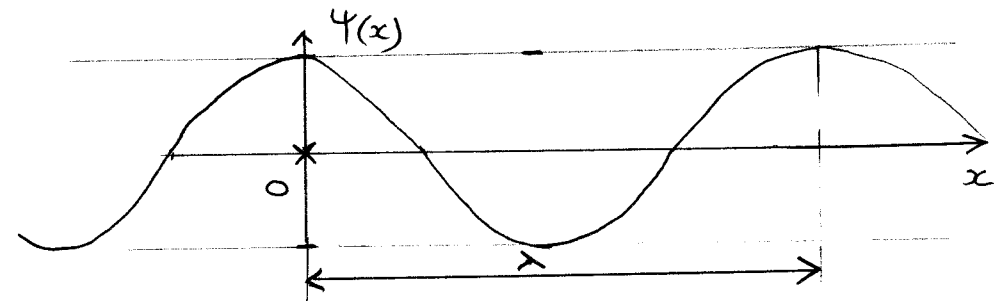


I - Notion d'onde

* onde "spatiale" (on lance un caillou dans l'eau et on prend une photo de la surface de l'eau) Supposée périodique



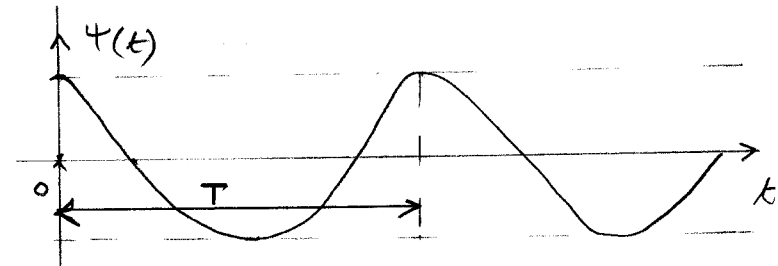
Cette onde est décrite par la fonction $\psi(x) = \psi_0 \cos(kx)$

k : nombre d'onde ($k > 0$)

λ : longueur d'onde \rightarrow période spatiale : $k\lambda = 2\pi$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

* onde "temporelle" (on lance un caillou dans l'eau, on se place à un point donné de la surface de l'eau et on regarde le mouvement de ce point) Supposée périodique



Cette onde est décrite par la fonction $\psi(t) = \psi_0 \cos(\omega t)$

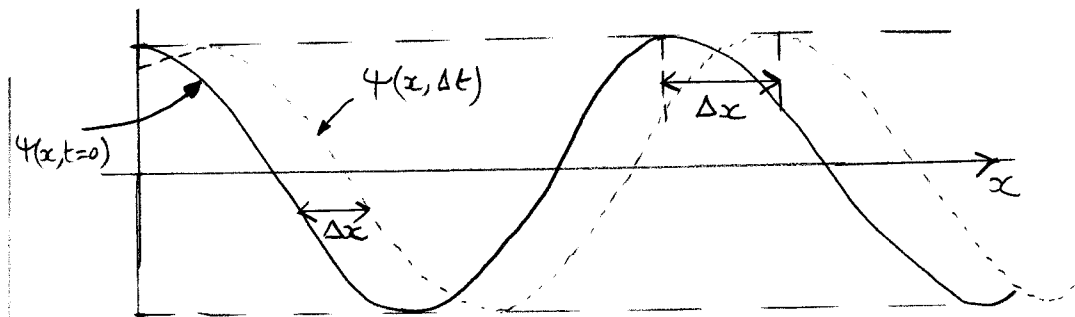
ω : pulsation

Constante

T : période temporelle $\rightarrow \omega T = 2\pi$

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

* onde spatio-temporelle $\psi(x, t) = \psi_0 \cos(kx - \omega t)$



(dessin qualitatif!)

$$\psi(x, \Delta t) = \psi_0 \cos(kx - \omega \Delta t) = \psi_0 \cos\left(k\left[x - \frac{\omega \Delta t}{k}\right]\right)$$

En posant $\Delta x = \frac{\omega \Delta t}{k} \Rightarrow \psi(x, \Delta t) = \psi_0 \cos(k(x - \Delta x)) = \psi(x - \Delta x, t=0)$

Célérité (vitesse) de l'onde: $v_\psi = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\omega}{k}$

soit $k = \frac{\omega}{v_\psi}$

* Fonction d'onde complexe:

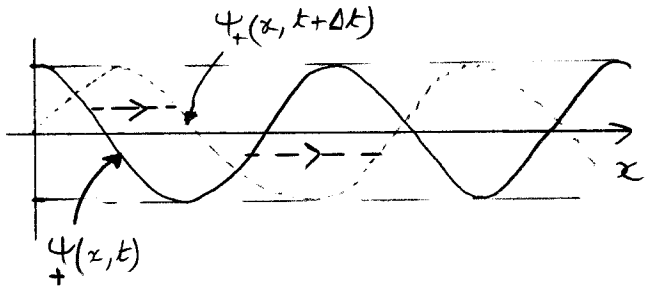
Comme nous le verrons par la suite, il est pratique d'utiliser des fonctions d'onde complexes, par exemple

$$\psi_+(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \rightarrow \text{périodique en } x \text{ et } t \text{ tout comme } \psi(x, t) = \psi_0 \cos(kx - \omega t)$$

$$\psi_+(x, t + \Delta t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t - \omega \Delta t)} = \psi_0 e^{ik\left[x - \frac{\omega \Delta t}{k}\right] - i\omega t} \quad \Delta x > 0$$

$\psi_+(x, t + \Delta t) = \psi_+(x - \Delta x, t)$ soit $\psi_+(x, t) = \psi_+(x + \Delta x, t + \Delta t)$

Représentation graphique de l'onde (partie réelle)



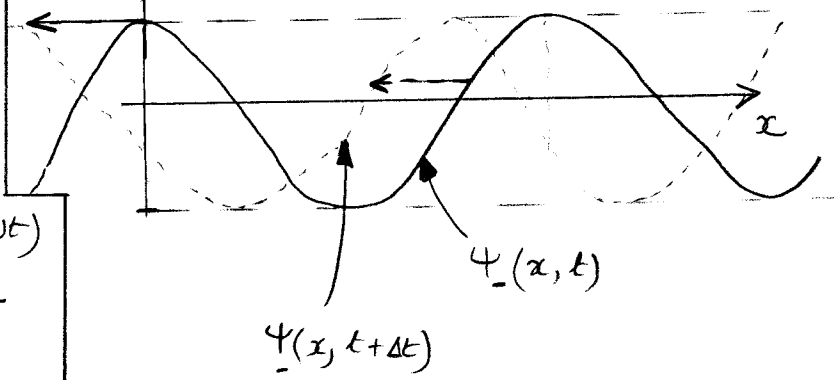
L'onde se propage dans le sens des x croissants

À l'inverse, l'onde décrite par la fonction $\psi_-(x, t) = e^{-ikx - i\omega t} \psi_0$ ($k > 0$) se propage en sens inverse. En effet,

$$\psi_-(x, t + \Delta t) = e^{-ikx - i\omega t - i\omega \Delta t} \psi_0 = \psi_0 e^{-ik\left[x + \frac{\omega \Delta t}{k}\right] - i\omega t} \quad \Delta x > 0$$

$\psi_-(x, t + \Delta t) = \psi_-(x + \Delta x, t)$ soit $\psi_-(x, t) = \psi_-(x - \Delta x, t + \Delta t)$

Représentation graphique de l'onde:



* Généralisation à 3 dimensions:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t} \leftarrow \text{onde plane}$$

$$= \psi_0 e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

$$\vec{k} = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z \leftarrow \text{vecteur d'onde}$$

k_x, k_y, k_z sont des nombres réels (positifs ou négatifs)

$$\psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \psi_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega\Delta t - i\omega t} = \psi_0 e^{i\vec{k} \cdot [\vec{r} - \frac{\omega\Delta t \vec{k}}{k^2}] - i\omega t}$$

$$= \psi(\vec{r} - \frac{\omega\Delta t \vec{k}}{k^2}, t)$$

soit $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r} + \frac{\omega\Delta t \vec{k}}{k^2}, t + \Delta t)$

Le vecteur vitesse de l'onde s'écrit donc

$$\vec{v}_\psi = \frac{1}{\Delta t} [\vec{r} + \frac{\omega\Delta t \vec{k}}{k^2} - \vec{r}] = \frac{\omega \vec{k}}{k^2} = \vec{v}_\psi$$

et $v_\psi = \frac{\omega}{k}$ soit $k = \frac{\omega}{v_\psi} = \|\vec{k}\|$

II - Dualité onde - corpuscule

II-1 - Cas de la lumière :

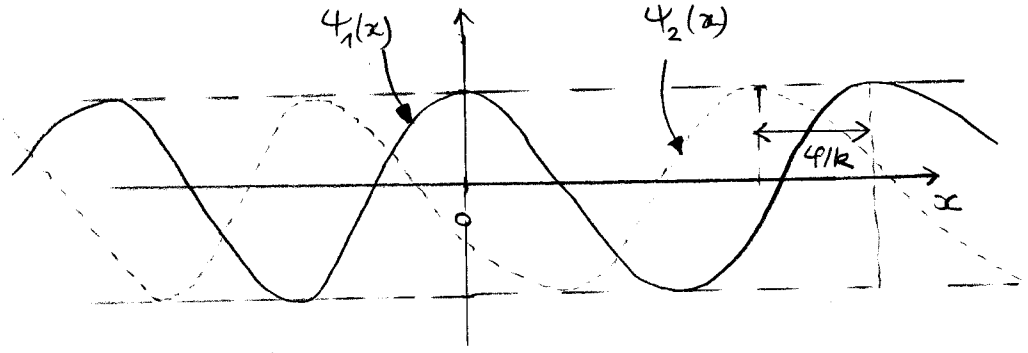
* le caractère ondulatoire de la lumière se manifeste lorsque l'on réalise, par exemple, une interférence à l'aide de deux fentes dites de Young.

* Exemple simple d'interférence de deux ondes spatiales $\psi_1(x) = \psi_0 e^{ikx}$ et $\psi_2(x) = \psi_0 e^{ikx + i\varphi}$ avec $\varphi > 0$ et $k > 0$

$$\psi_2(x) = \psi_0 e^{ik[x + \frac{\varphi}{k}]} = \psi_1(x + \frac{\varphi}{k})$$

soit $\psi_1(x) = \psi_2(x - \frac{\varphi}{k})$ ← φ décrit le déphasage entre ψ_1 et ψ_2

Représentation graphique des ondes ψ_1 et ψ_2 (parties réelles)



L'onde totale s'écrit $\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$.

Pour évaluer l'intensité lumineuse à la position x on calcule

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x) \psi(x) = \underbrace{|\psi_1(x)|^2}_{\text{Intensité liée à } \psi_1} + \underbrace{|\psi_2(x)|^2}_{\text{Intensité liée à } \psi_2} + \underbrace{\psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\psi_2^*(x)}_{\text{termes d'interférences}}$$

termes "classiques" qui ne peuvent être décrits que dans une théorie ondulatoire de la lumière

soit $|\psi(x)|^2 = |\psi_0|^2 |1 + e^{i\varphi}|^2 = |\psi_0|^2 \times 2(1 + \cos\varphi)$

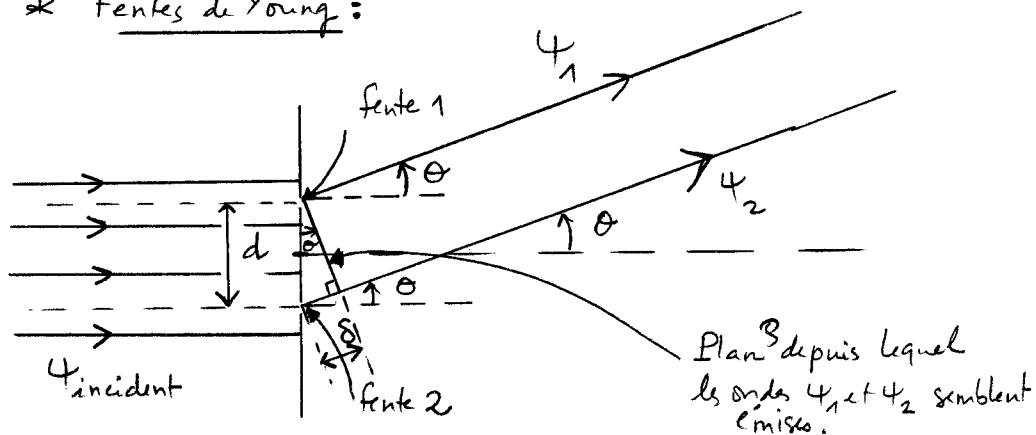
$$|\psi(x)|^2 = 4|\psi_0|^2 \cos^2(\varphi/2)$$

* si $\varphi = 0$ ← les deux ondes sont en phase
 $|\psi(x)|^2 = 4|\psi_0|^2$ ← interférence constructive

* si $\varphi = \frac{\pi}{2}$ → $|\psi(x)|^2 = 2|\psi_0|^2 = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2$ ← pas d'interférences

* si $\varphi = \pi$ ← les deux ondes sont en opposition de phase
 $|\psi(x)|^2 = 0$ ← interférence destructive

* Fentes de Young :



On suppose que l'écran est à une distance infinie (grande donc!) des fentes et l'on regarde quelle intensité lumineuse est reçue dans la direction θ . $\theta = 0$ correspond au centre de l'écran (le dernier est parallèle aux fentes).

d : distance entre les fentes

• L'onde arrivant sur chaque fente est la même et vaut $\phi_{\text{incident}}(t) = A_0 e^{-i\omega t}$

• Les ondes émises depuis le plan \mathcal{B} , ϕ_1 et ϕ_2 respectivement, sont déphasées. En effet $\phi_1(t) = A_0 e^{-i\omega t}$ mais $\phi_2(t) \neq A_0 e^{-i\omega t}$

Il faut tenir compte du fait que, pour arriver au plan \mathcal{B} , l'onde émise depuis la fente 2 a dû parcourir la distance $\delta = d \sin \theta$. Le temps écoulé pendant que la lumière parcourt cette distance est $\delta t = \frac{\delta}{c} = \frac{d \sin \theta}{c}$

• En d'autres termes, l'onde ϕ_2 partant de \mathcal{B} à l'instant t est elle partant de la fente 2 à l'instant $t - \delta t$ soit $A_0 e^{-i\omega(t - \delta t)} = \phi_2(t)$

• L'onde totale émise dans la direction θ vaut donc

$$\begin{aligned} \phi(\theta, t) &= \phi_1(t) + \phi_2(t) \\ &= A_0 e^{-i\omega t} [1 + e^{+i\omega \delta t}] \end{aligned}$$

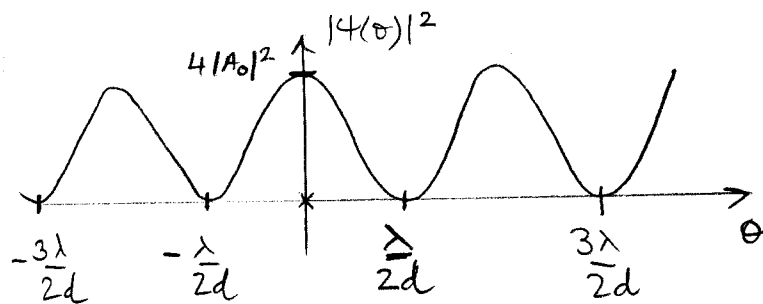
et l'intensité lumineuse associée est égale à

$$|\phi(\theta, t)|^2 = |\phi(\theta)|^2 = |A_0|^2 \times 4 \cos^2\left(\frac{\omega \delta t}{2}\right)$$

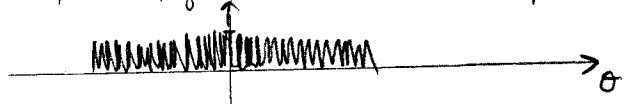
$$\text{où } \frac{\omega \delta t}{2} = \frac{\omega}{2} \cdot \frac{d \sin \theta}{c}$$

En considérant des petites valeurs de $\theta \rightarrow \sin \theta \approx \theta$
et comme $\lambda = \frac{2\pi}{(\omega/c)}$ ← longueur d'onde

$$\begin{aligned} |\phi(\theta)|^2 &\approx 4 |A_0|^2 \cos^2\left(\frac{\pi d \theta}{\lambda}\right) \\ &= 2 |A_0|^2 \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi d \theta}{\lambda}\right) \right] \end{aligned}$$



- Lorsque $d \rightarrow +\infty$ les pics de luminosité et d'obscurité se "regroupent" ($\frac{\Delta}{d} \rightarrow 0$) de sorte que la figure d'interférence disparaît. On obtient un continuum.



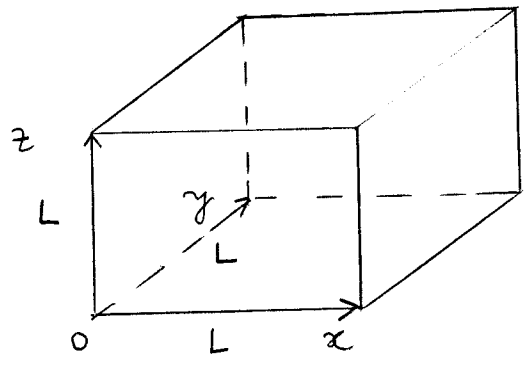
- Lorsque $d \rightarrow 0$, le pic à $\theta = 0$ s'élargit \rightarrow la figure d'interférence disparaît également ($\delta \rightarrow 0$)

Définition du corps noir: c'est un système macroscopique interprété comme un gaz de photons (dont le nombre est énorme). Son rayonnement n'est compris qu'en introduisant la notion de corpuscule de lumière: le photon.

Conclusion importante: Afin d'observer des interférences (et donc mettre en évidence le caractère ondulatoire de la lumière) il faut que d soit du même ordre de grandeur que λ

- On considère un gaz de photons (ou volume de lumière) de volume $V = L^3$

* Description corpusculaire de la lumière:



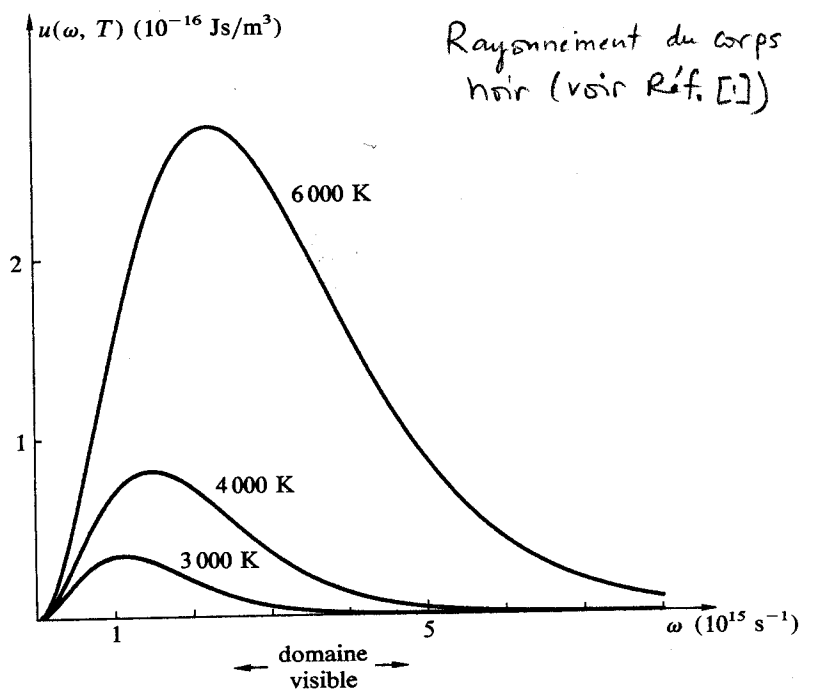
La lumière évoluant dans la boîte peut être décrite par une onde plane

$$\psi_{k_x, k_y, k_z}(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i\omega t} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$$

L'onde étant piégée, elle est considérée nulle sur les bords de la boîte (puisque nulle en dehors) \Rightarrow

$$\begin{aligned} k_x L &= n_x \pi & n_x &\in \mathbb{N}^* \\ k_y L &= n_y \pi & n_y &\in \mathbb{N}^* \\ k_z L &= n_z \pi & n_z &\in \mathbb{N}^* \end{aligned}$$

$$\text{et } k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 [n_x^2 + n_y^2 + n_z^2]$$



Densité spectrale d'énergie (par unité de volume) dans le corps noir, pour trois températures différentes.

• Des valeurs données de n_x, n_y et n_z définissent un mode dit "propre" de la lumière

• On peut montrer [1] que, pour des grandes valeurs de k , le nombre de modes $dn(k)$ que l'on trouve en faisant varier la norme du vecteur d'onde de k à $k+dk$ vaut (polarisation incluse [1])

$$dn(k) = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 dk \quad \text{Eq. (1)}$$

• On souhaite désormais étudier le comportement du volume de lumière en fonction de la température T .

idée de Planck: introduire la notion de quantum d'énergie $\epsilon(\omega) = \hbar\omega = \frac{h}{2\pi} \omega$ où ω est la pulsation de l'onde lumineuse.

Le volume de lumière est alors assimilé à un gaz de particules (les photons) qui vérifient la statistique de Bose-Einstein (ensemble grand canonique en physique statistique) avec un potentiel chimique nul (le nombre moyen de photons n'est pas fixé). Si on désigne par i un état photonique d'énergie ϵ_i , le nombre moyen de photons dans cet état à une température donnée T est

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_i} - 1} \quad \text{ou} \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad \text{température}$$

↑
Statistique quantique.
Constante de Boltzmann (k)

• Comme $k = \frac{\omega}{c}$, d'après l'Eq. (1)

$$dn(k) \rightarrow dn(\omega) = \frac{L^3}{\pi^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{d\omega}{c}$$

$$dn(\omega) = \frac{V \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$$

• Les états photoniques i sont en fait caractérisés par les modes propres et l'énergie ϵ_i correspond à $\hbar\omega = \hbar kc$.
Le nombre de photons de pulsation ω est donc, à une température donnée T ,

$$dN(\omega, T) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \times dn(\omega)$$

et l'énergie associée vaut

$$dE(\omega, T) = \hbar\omega dN(\omega, T) = \frac{\hbar\omega V \omega^2 d\omega}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1) \pi^2 c^3} = \mu(\omega, T) V d\omega$$

$$\text{ou} \quad \mu(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\beta\hbar\omega} - 1)} \quad \leftarrow \text{loi de Planck.}$$

• Autre manifestation du caractère corpusculaire de la lumière: l'effet photoélectrique (Einstein)

II - 2 - Cas de la matière :

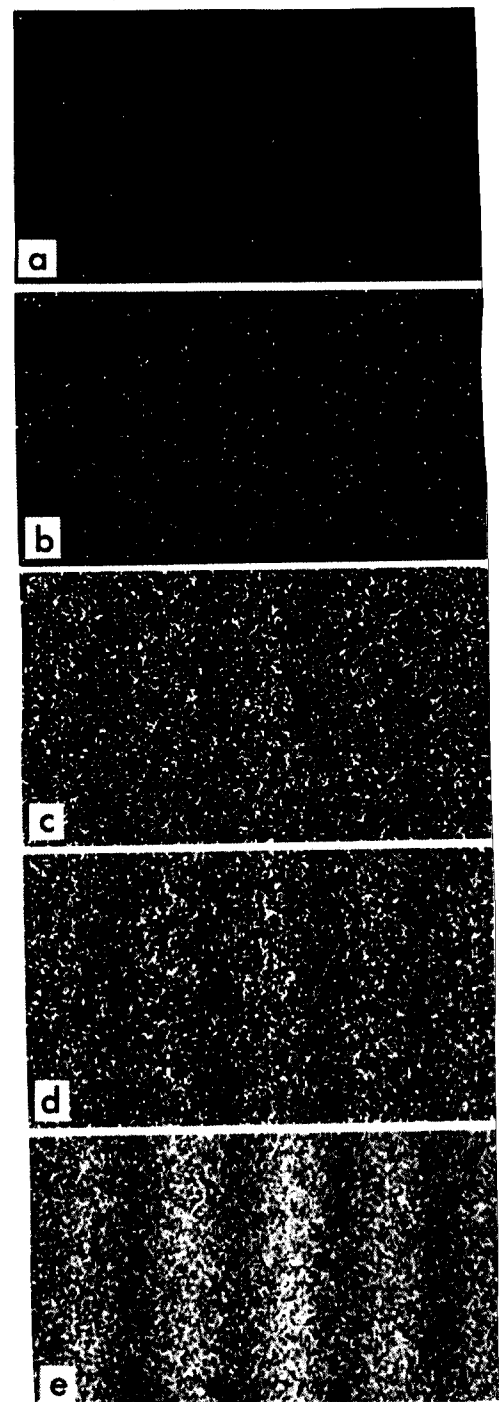
- En mécanique classique, l'électron est décrit comme un corpuscule de masse m .
- Problème : on peut obtenir une figure d'interférence avec des électrons ! Pour ce faire il suffit de reprendre les fentes de Young et d'utiliser un faisceau d'électrons.
- Comment associer une fonction d'onde à une particule ?
- Relations de Louis de Broglie

$\omega = \frac{E}{\hbar}$ ← énergie de la particule
 ↗ pulsation de l'onde associée

$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ ← impulsion de la particule
 ↗ vecteur d'onde associé à la particule

pour une particule soumise à des forces associées à une énergie potentielle d'interaction $V(\vec{r})$, l'impulsion correspond à la quantité de mouvement $m\vec{v}$.
 Ce n'est plus le cas en présence d'un champ magnétique par exemple.

$$k = \|\vec{k}\| = \frac{\|\vec{p}\|}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi \times \hbar}{p} = \boxed{\frac{h}{p} = \lambda}$$



- Le comportement ondulatoire se manifeste lorsque la distance d est de l'ordre de λ soit h/p

Peut-on observer un comportement ondulatoire pour une mouche ?

$$\left. \begin{aligned} m &\approx 10 \text{ mg} = 10 \cdot 10^{-3} \text{ g} = 10^{-5} \text{ kg} \\ v &\approx 10 \text{ km/h} = \frac{10^4}{3600} \text{ m s}^{-1} \end{aligned} \right\} p \approx \frac{1}{36000} \approx 2,8 \cdot 10^{-5} \text{ kg m s}^{-1}$$

$$\Rightarrow h/p \approx 6,6 \cdot 10^{-34} \times 36000 = 2,4 \cdot 10^{-29} \text{ m} = \underbrace{2,4 \cdot 10^{-27} \text{ cm}}$$

abs qu'une mouche mesure environ 1 cm (!)

Conclusion: Les phénomènes ondulatoires (nous dirons quantiques par la suite) ne se manifestent pas directement à notre échelle. Ils sont en revanche fondamentaux à l'échelle atomique.

Autre conclusion importante: l'expérience des fentes de Young pour les électrons témoigne d'une vraie dualité onde - corpuscule. Le comportement de l'électron est ondulatoire mais c'est bien un corpuscule qui est récupéré sur l'écran.

III - Equation de Schrödinger

- Cas d'une particule libre: d'après les relations de de Broglie, une particule libre peut être décrite par la fonction d'onde

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar} t)} \leftarrow \text{onde plane}$$

avec $E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$

En notant que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \psi_0 (i\hbar) \times \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) e^{i(\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar} t)} = E \psi$$

et $\nabla^2 \psi = \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi$

Laplacien $= \left[-\frac{p_x^2}{\hbar^2} - \frac{p_y^2}{\hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2} \right] \psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{-\hbar^2 \nabla^2 \psi}{2m} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}$$

Equation de Schrödinger dépendante du temps pour la particule libre

- Généralisation à une particule avec une énergie potentielle d'interaction $V(\vec{r})$ (postulat)

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r}) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

← Equation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT)

- Equation de Schrödinger indépendante du temps:

en posant $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ ← séparation des variables d'espace et du temps (Solution dite Stationnaire)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) \varphi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = E \varphi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\stackrel{\uparrow}{=} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi\right) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} + (V(\vec{r}) \times \varphi(\vec{r})) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

d'après l'ESDT

on obtient alors l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$$

Il faut bien noter que dans cette équation il y a deux inconnues: l'énergie E et la fonction d'onde spatiale $\varphi(\vec{r})$.

Exemples:

9/10

- (1) l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \varphi = E \varphi$$

on montrera que les solutions sont

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n \in \mathbb{N}$$

- (2) l'atome d'hydrogène

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{(-e^2)}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} \varphi = E \varphi$$

on montrera que les solutions sont

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2} \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (E_I = \frac{1}{2} m c^2 \alpha^2)$$

IV - Interprétation probabiliste de la fonction d'onde

$d\vec{r} = dx dy dz$ ← élément de volume infinitésimal

$d\mathcal{P}(\vec{r}) = |\varphi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$ ← interprété comme la probabilité que la particule soit à la position \vec{r}

↓ densité de probabilité de présence

$$\int_{\mathbb{R}^3} d\mathcal{P}(\vec{r}) = 1 = \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad \leftarrow \text{condition de normalisation}$$

position moyenne de la particule:

$$\langle x \rangle \stackrel{\text{d\u00e9finition}}{=} \int_{\mathbb{R}^3} x dS(\vec{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} x |\varphi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$$

$$\langle y \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} y |\varphi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$$

$$\langle z \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} z |\varphi(\vec{r})|^2 d\vec{r}$$

quantit\u00e9 de mouvement moyenne de la particule:

$$\langle p_x \rangle \stackrel{\text{d\u00e9finition}}{=} -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$\langle p_y \rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial y} \varphi(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$\langle p_z \rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial z} \varphi(\vec{r}) d\vec{r}$$

On remarque que pour la particule libre

$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_0 e^{i(\frac{p_x}{\hbar}x + \frac{p_y}{\hbar}y + \frac{p_z}{\hbar}z)}$$

o\u00f9 p_x, p_y, p_z sont les composantes donn\u00e9es de la quantit\u00e9 de mouvement de la particule,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi = -i\hbar \left(\frac{ip_x}{\hbar} \right) \varphi = p_x \varphi$$

d'o\u00f9 le lien entre quantit\u00e9 de mouvement et $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$,

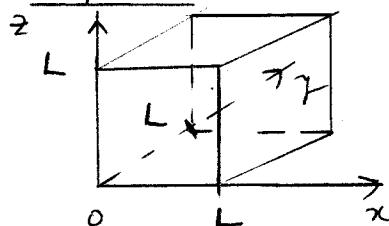
$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \text{ et } -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

R\u00e9f\u00e9rences:

[1] "Physique Statistique", B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, et B. Roulet, Hermann (1989), p. 825

[2] "M\u00e9canique quantique", C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, et F. Lal\u00f4e, Hermann (1973), p. 9

Compl\u00e9ment: Particule libre dans une bo\u00eete de volume L^3



$$\varphi(\vec{r}) = \varphi_0 e^{i(\frac{p_x}{\hbar}x + \frac{p_y}{\hbar}y + \frac{p_z}{\hbar}z)}$$

• Normalisation: $\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz |\varphi_0|^2 = 1$

en prenant φ_0 r\u00e9el, on obtient $L^3 \varphi_0^2 = 1 \Rightarrow \varphi_0 = \frac{1}{L^{3/2}}$

et donc $\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i(\frac{p_x}{\hbar}x + \frac{p_y}{\hbar}y + \frac{p_z}{\hbar}z)}$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= -i\hbar \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz \varphi^*(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}) \\ &= -i\hbar \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz \frac{1}{L^{3/2}} e^{-i(\frac{p_x}{\hbar}x + \frac{p_y}{\hbar}y + \frac{p_z}{\hbar}z)} \\ &\quad \times \frac{1}{L^{3/2}} \left(\frac{ip_x}{\hbar} \right) e^{i(\frac{p_x}{\hbar}x + \frac{p_y}{\hbar}y + \frac{p_z}{\hbar}z)} \end{aligned}$$

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \frac{L^3}{L^3} \times \left(\frac{ip_x}{\hbar} \right) = p_x$$

Complement: phase and group velocities

We have already introduced the phase velocity v_{ϕ} for a plane wave $\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$,

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k}$$

De Broglie relations: $E = \hbar\omega$ and $p_x = \hbar k_x$

For a one-dimensional free particle problem $\vec{p} = p_x \vec{e}_x$, $\vec{k} = k_x \vec{e}_x$

thus $p = p_x$ and $k = k_x$.

Moreover we know from classical mechanics that

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \leftarrow \text{free particle! (Eq. 1)}$$

The associated phase velocity is therefore equal to

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2} v \quad (!)$$

Concept of group velocity:

According to (Eq. 1), for the wavefunction associated with a free particle,

the angular frequency is a function of the wave number k :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} = \omega(k) \quad (\text{Eq. 2})$$

Let us consider the wavefunction

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \psi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

that contains plane waves with wave number k in the vicinity of k_0 ($\frac{\Delta k}{k_0} \ll 1$).

From the Taylor expansion through first order in $(k - k_0)$,

$$\omega(k) \approx \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + \underbrace{\left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}}_{v_g} (k - k_0)$$

defined as the "group velocity"

we obtain

$$\psi(x, t) \approx e^{i(-\omega_0 + k_0 v_g)t} \underbrace{\int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \psi(k) e^{i(kx - k v_g t)} dk}_{\bar{\psi}(x, t)}$$

$$\Rightarrow |\psi(x, t)|^2 \approx |\bar{\psi}(x, t)|^2$$

• Since $\bar{\Psi}(x, t+dt) = \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} \psi(k) e^{i[k(x - v_g dt) - k v_g t]} dk$

$$= \bar{\Psi}(x - v_g dt, t)$$

it comes $\boxed{\bar{\Psi}(x + v_g dt, t+dt) = \bar{\Psi}(x, t)}$

Therefore the phase velocity of $\bar{\Psi}$ equals $\frac{x + v_g dt - x}{dt} = v_g$

Conclusion: The density of probability $|\psi(x, t)|^2$ (or the intensity if we refer to light) "moves" with the group velocity v_g .

• Returning to the free particle: according to (Eq. 2)

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{2\hbar k}{2m} = \frac{p}{m} = v \leftarrow \text{velocity of a particle in classical mechanics!}$$

Everything is now consistent :-)