Université de Tours "François Rabelais"
Faculté de Sciences et Techniques
Licence de Physique 2006–2007
Simulation, Modélisation, Outils Informatiques

Intégrales gaussiennes et calculs sur des paquets d'ondes

Soit une gaussienne, $\Phi(x)$, de moyenne m et de largeur σ,

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)} \tag{1}$$

Ces affirmations sont appuyées par les calculs suivants :

– La *moyenne* d'une fonction est définie par

$$\langle x \rangle \equiv \frac{\int x f(x) dx}{\int f(x) dx} \tag{2}$$

On y reconnaît la définition du "centre de masse", si $f(x)$ peut être interprétée comme la densité d'un milieu et les intégrales sont calculées sur le domaine rempli par ce milieu. Pour notre exemple, si l'on prend un milieu d'étendu infini on peut faire les intégrales analytiquement. On trouve, d'abord,

$$Z \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) dx = 1$$

Ce résultat fut obtenu à partir de la relation

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

Démonstration : On rappelle la démonstration de cette relation fondamentale

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \Rightarrow I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(u^2+v^2)} du dv$$

On passe à variables polaires, $u = r\cos\theta$, $v = r\sin\theta$, $dudv = rdrd\theta$. Les bornes d'intégration sont $0 \leq r < \infty$ et $0 \leq \theta \leq 2\pi$, puisque l'on intègre sur tout le plan (u, v). Ainsi l'on a

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2} = 2\pi \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2} = -\pi \int_0^{\infty} de^{-r^2}$$

puisque $-2re^{-r^2} dr = -de^{-r^2}$. Donc

$$I^2 = \pi \Rightarrow I = \sqrt{\pi}$$

Grâce à cette relation on se rend compte que

$$Z=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(x)dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}due^{-u^2/(2\sigma^2)}=1$$

Ici l'on note que la "translation" $u=x-m$ est possible car l'intégrale converge et elle est utile car les limites sont à l'infini–sinon on obtiendrait des fonctions d'erreur que l'on peut, certes, évaluer perturbativement, mais dont les valeurs sont obtenues numériquement. Posant $w=u/(\sigma\sqrt{2})$, cette dernière intégrale devient

$$\sigma\sqrt{2}\int_{-\infty}^{\infty}dwe^{-w^2}=\sigma\sqrt{2}\sqrt{\pi}=\sqrt{2\pi\sigma^2}$$

Ainsi il nous reste à calculer calculer

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,x\,e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}$$

Si l'on pose, de nouveau, $u=x-m$ on obtient, cette fois-ci

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}du\,(u+m)\,e^{-u^2/(2\sigma^2)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}du\,u\,e^{-u^2/(2\sigma^2)}+\frac{m}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}du\,e^{-u^2/(2\sigma^2)}$$

La première intégrale est égale à zéro, car l'intégrande est une fonction impaire, que l'on intègre sur un intervalle symétrique autour de l'origine ; ne reste, donc, que la deuxième intégrale, qui, d'après les résultats précédents, vaut, précisément, $\sqrt{2\pi\sigma^2}$. Ainsi,

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty}dx\,x\,e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}}{\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}}=m$$

– La *variance* (ou *largeur*) d'une fonction est définie par

$$\sigma^2\equiv\langle x^2\rangle-(\langle x\rangle)^2\equiv\frac{\int x^2f(x)dx}{\int f(x)dx}-\left(\frac{\int xf(x)dx}{\int f(x)dx}\right)^2 \tag{3}$$

Si l'on interprète, comme toute à l'heure, $f(x)$ comme la denisté d'un milieu, alors, cette quantité n'est rien d'autre que le *moment d'inertie* et nous renseigne comment est répartie la masse *autour* du centre de masse.
On peut, en outre, montrer immédiatement, que

$$\sigma^2=\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle$$

qui montre que σ est bien un nombre réel. Elle ne s'annuulle que si toute la "masse" est concentrée sur le centre de masse (une "fonction" de Dirac). Pour la gaussienne, étendue sur toute la droite réelle, on peut calculer cette quantité par les mêmes techniques qu'avant, en réduisant les intégrales à la relation fondamentale.
On vient de calculer $\langle x\rangle=m$. On veut, alors, calculer

$$\frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)^2e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}}{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)^2e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}$$

En posant $u=x-m$ on obtient

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\int_{-\infty}^{\infty}du\,u^2 e^{-u^2/(2\sigma^2)}$$

Cette intégrale n'est pas zéro, car l'intégrande est une fonction *paire*. Pour la calculer, on pose, d'abord, $w=u/(\sigma\sqrt{2})$. Ainsi l'on se débarasse du dénominateur de l'exponentiel et l'on obtient

$$\frac{2\sigma^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dw\,w^2 e^{-w^2}$$

Cette intégrale, a son tour, peut être écrite comme

$$\int_{-\infty}^{\infty}dw\,w^2 e^{-w^2}=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}w\,de^{-w^2}=-\frac{1}{2}\left[we^{-w^2}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}e^{-w^2}\,dw\right]=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

et l'on obtient, finalement, que, pour notre gaussienne,

$$\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle=\sigma^2$$

justifiant, ainsi, l'affirmation faite au début.
En mécanique quantique (et mécanique statistique) on cherche, habituellement, à calculer des "valeurs moyennes" de la forme

$$\langle\mathcal{O}\rangle\equiv\frac{\int dx\,\psi^*(x,t)\mathcal{O}\psi(x,t)}{\int dx\,\psi^*(x,t)\psi(x,t)}$$

où $\mathcal{O}$ est un opérateur quelconque. Si $\mathcal{O}=H$, alors on calcule l'énergie de l'état en question, si $\mathcal{O}=x$, on calcule la position moyenne, ainsi de suite. Si $\psi(x,t)$ est une gaussienne et l'intervalle d'intégration toute la droite réelle, alors, on peut faire ces calculs exactement. Ce qui est particulièrement intéressant est, si la fonction d'onde de l'état dépend de paramètres (par exemple, la largeur de la gaussienne), alors on obtient la dépendance de l'énergie à ces paramètres.
Si, par exemple, on cherche la valeur moyenne de la position pour un état décrit par la fonction d'onde $\Phi(x)$, alors on doit calculer

$$\langle x\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}dx\,\Phi(x)\,x\,\Phi(x)}{\int dx\,\Phi(x)\Phi(x)}$$

Cette expression est très similaire à la moyenne, que l'on a calculé précédemment–mais il y une petite différence : la fonction de ponderation n'est pas $\Phi(x)$, mais $\Phi(x)^2$. En regardant son expression on se rend compte qu $\Phi(x,t)^2$ est une gaussienne avec la même moyenne que $\Phi(x,t)$ mais avec une largeur d'un facteur $\sqrt{2}$ plus petite.
La raison, bien sûr, est que

$$\Phi^2(x)=\frac{e^{-(x-m)^2/\sigma^2}}{Z}$$

(et l'on doit calculer $Z=\int dx\,\Phi^2(x)$).
Alors, on obtient $\langle x\rangle=m$, mais $\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle=\sigma^2/2$.

Il est utile de résoudre quelques exercices, pour mieux s'habituer à ces calculs :
Exercice : Pour le cas "libre"(et dans les unités où $D = 1$), l'énergie moyenne pour un paquet d'ondes gaussien est donnée par l'expression

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi(x)(-\Phi''(x))}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi^2(x)}$$

Montrer que le résultat de ce calcul, pour $\Phi(x) = \exp(-(x-m)^2/(2\sigma^2))/Z$, est

$$E(\sigma) = \frac{1}{\sigma^2}\left(1 - \frac{\sqrt{\pi}}{2}\right)$$

Ainsi, plus le paquet d'ondes est étroit, plus son énergie est élevée. Ceci est compréhensible par le principe d'incertitude.
Exercice : Pour le cas de l'oscillateur harmonique, $V(x) = g \cdot (x-m)^2$, on doit calculer

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi(x)(-\Phi''(x) + g \cdot (x-m)^2\Phi(x))}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi^2(x)}$$

avec $\Phi(x) = \exp(-(x-m)^2/(2\sigma^2))/Z$. Montrer que

$$E(\sigma) = \frac{1}{\sigma^2}\left(1 - \frac{\sqrt{\pi}}{2}\right) + \sigma^2 g \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Tracer cette fonction et déterminer la valeur de la largeur, $\sigma = \sigma^*$, pour laquelle l'énergie est minimale ($E'(\sigma^*) = 0, E''(\sigma^*) > 0$).
Exercice : Montrer que la transformée de Fourier de $\Phi(x)$,

$$\widehat{\Phi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} e^{\mathrm{i}px}\Phi(x)$$

a également la forme d'une Gaussienne et déterminer valeur moyenne et largeur.
Exercice : Montrer que

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, (x-m)^{2k} e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-(x-m)^2/(2\sigma^2)}} \equiv I_k \Rightarrow I_k = \frac{2k-1}{2} I_{k-1}$$

avec $I_0 = \sqrt{\pi}$ (et $I_1 = \sqrt{\pi}/2$). Résoudre cette récurence et l'employer pour calculer l'intervalle de valeurs de la largeur σ pour que le paquet d'onde gaussien, $\Phi(x)$ soit "piégé" dans un puits du potentiel

$$V(x) = g \cdot (x-m)^2 + \lambda \cdot (x-m)^4$$

lorsque $g < 0$ et $\lambda > 0$. Ces calculs ont été rendus faisables par le fait que les "bords" étaient à l'infini. Une question très intéressante est quels sont les effets des bords-par exemple si l'on se limite à un intervalle $0 \leq x \leq L$, avec $m = L/2$. On peut s'imaginer que, si $\sigma << L$, alors les bords auront un effet négligeable.

Un autre exercice intéressant consiste à calculer la probabilité de transition d'un état à un autre. En mécanique quantique on apprend que cette probabilité est donnée par le module carré de l'amplitude de transition entre ces états ; et que cette amplitude, à son tour, est donnée par leur produit scalaire.
Par exemple : on se donne une condition initiale, $\Phi(x,0) = f(x)$, on calcule la solution, $\Phi(x,t)$ de l'équation de Schrödinger/diffusion et l'on s'intéresse à la quantité

$$P(t) \equiv \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Phi(x,t) f(x) \right|^2$$

On s'attend à ce que cette quantité s'annulle avec le temps, si la solution, au fil du temps, "s'éloigne" de la condition initiale. Mais l'on peut calculer la quantité correspondante entre deux états, n'importe lesquels. Un cas serait d'arranger la largeur de la gaussienne, pour que l'énergie soit celle d'un état "excité" et de calculer la probabilité d'arriver vers un état d'énergie plus faible.
Exercice : Il est facile de se rendre compte que, si la condition initiale est normalisée, alors la solution à tout temps le sera également.