La vitesse d'une particule quantique
et
la transformation de Fourier

Chapitre 2

La particule libre en mécanique quantique

En mécanique quantique, l'état d'une particule ponctuelle est décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$

Description probabiliste :

Une mesure de position donnera le résultat $\vec{r}$ à d^3r près avec la probabilité

$$d^3P = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, d^3r$$

Evolution dans le temps :

Si la particule n'est soumise à aucune force, l'évolution de $\psi(\vec{r}, t)$ est donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$$

Questions centrales du cours d'aujourd'hui

A. Que trouve-t-on quand on mesure la vitesse $\vec{v}$ ou l'impulsion $\vec{p} = m\vec{v}$ d'une particule quantique ?

➡ Il s'agit d'un résultat probabiliste

➡ La densité de probabilité $\mathcal{P}(\vec{p})$ pour l'impulsion est donnée par

$$\mathcal{P}(\vec{p}) = |\varphi(\vec{p})|^2$$

où $\varphi(\vec{p})$ est la transformée de Fourier de $\psi(\vec{r})$

B. La transformée de Fourier à l'œuvre : l'exemple de l'optique cohérente

➡ Transformée de Fourier, interférences et diffraction

➡ Les relations d'incertitude de Heisenberg.

1.

La transformation de Fourier

Joseph Fourier, 1768-1830

propagation de la chaleur

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

http://www.academie-sciences.fr/Membres/in_memoriam/Generalites/Fourier_Kahane.pdf

La transformation de Fourier, du cours de maths au cours de physique

Maths : la TF est définie dans L_1 (fonctions sommables)

$$\hat{f}(x) = \int_{\mathbf{R}^m} e^{-2i\pi x \cdot t}\, f(t)\, dt$$

Physique : la TF est défini dans L_2 (fonctions de carré sommable)

1D : $$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixp/\hbar}\, \psi(x)\, dx$$

3 D : $$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-i\vec{r}\cdot\vec{p}/\hbar}\, \psi(\vec{r})\, d^3r$$

On utilise aussi l'espace S de Schwartz :
fonctions C_∞ décroissant plus vite que toute puissance de x à l'infini

Les propriétés essentielles de la TF pour la physique (I)

Connaissant $\psi(x)$, on calcule $\varphi(p)$ en utilisant

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ixp/\hbar}\, \psi(x)\, dx$$

Inversement, peut-on reconstruire $\psi(x)$ si on connaît sa TF $\varphi(p)$?

OUI ! $$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ixp/\hbar}\, \varphi(p)\, dp$$

On dit pour simplifier que $\psi(x)$ et $\varphi(p)$ sont TF l'une de l'autre,
même s'il faut se souvenir de la valeur du signe dans $e^{\pm ixp/\hbar}$

$$\psi(x) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \varphi(p)$$

Les propriétés essentielles de la TF pour la physique (II)

La TF est une isométrie pour l'espace L_2

$$\psi_1(x) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \varphi_1(p) \qquad\qquad \psi_2(x) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \varphi_2(p)$$

$$\int \psi_1^*(x)\, \psi_2(x)\, dx = \int \varphi_1^*(p)\, \varphi_2(p)\, dp$$

Si $\psi(x)$ est normée, alors $\varphi(p)$ l'est également :

$$1 = \int |\psi(x)|^2\, dx = \int |\varphi(p)|^2\, dp$$

Les propriétés essentielles de la TF pour la physique (III)

Dérivation et transformée de Fourier $\quad \psi(x) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \varphi(p)$

On part de $$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ixp/\hbar}\, \varphi(p)\, dp$$

et on suppose qu'on peut dériver sous le signe intégral (OK dans l'espace S)

On en déduit la TF des dérivées successives de $\psi(x)$ par rapport à x :

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ixp/\hbar}\, \frac{ip}{\hbar}\varphi(p)\, dp \qquad \frac{d\psi(x)}{dx} \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \frac{ip}{\hbar}\varphi(p)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ixp/\hbar} \left[-\frac{p^2}{\hbar^2}\varphi(p)\right] dp \qquad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} -\frac{p^2}{\hbar^2}\varphi(p)$$

Dérivation dans l'espace des x = multiplication dans l'espace des p

2. Transformée de Fourier et distribution en impulsion

La densité de probabilité pour l'impulsion

Proposition : si une particule est dans l'état $\psi(x)$, alors la distribution de probabilité pour son impulsion est :

$$\mathcal{P}(p) = |\varphi(p)|^2 \qquad\qquad \psi(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi(p)$$

Est-ce mathématiquement possible ?

On a vu que $\varphi(p)$ est normée si $\psi(x)$ est normée, donc $\int \mathcal{P}(p)\; dp = 1$

$\mathcal{P}(p)$ peut donc bien être une densité de probabilité

Est-ce physiquement réaliste?

Classiquement, on détermine la vitesse ou l'impulsion d'une particule en mesurant sa position à l'instant 0 et à l'instant *t* :

$$v = \frac{x(t) - x(0)}{t} \qquad\qquad p = m\frac{x(t) - x(0)}{t}$$

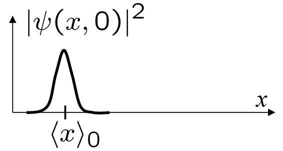
Comment transposer ce résultat quantiquement ?

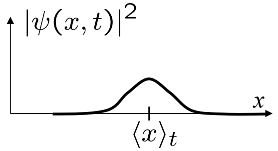
Impulsion moyenne d'une particule libre quantique

Si $\mathcal{P}(p)$ représente la densité de probabilité pour l'impulsion, alors l'impulsion moyenne est définie par :

$$\langle p \rangle = \int p\; \mathcal{P}(p)\; dp$$

Calcul du déplacement moyen d'une particule entre les instants 0 et *t* :





$$\langle x \rangle_0 = \int x\; |\psi(x,0)|^2\; dx \qquad\qquad \langle x \rangle_t = \int x\; |\psi(x,t)|^2\; dx$$

Exercice : vérifier qu'on a bien $\langle p \rangle = m\dfrac{\langle x \rangle_t - \langle x \rangle_0}{t}$

Note: La démonstration rigoureuse de $\mathcal{P}(p) = |\varphi(p)|^2$ par analyse d'une expérience de « temps de vol » est faite au chapitre 2, §6, et est hors programme.

Interprétation « physique » de la TF

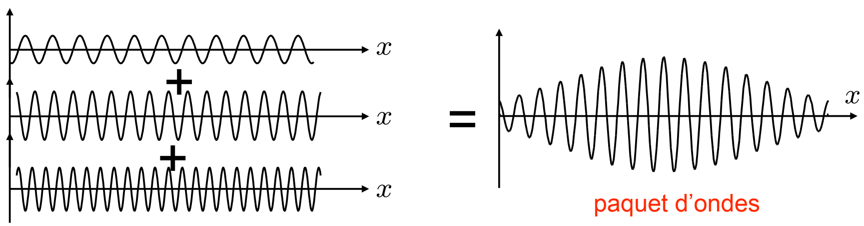
Premier amphi : on a vu l'onde de de Broglie $\psi(x) = e^{ixp_0/\hbar}$ associée à une particule d'impulsion p_0, mais cette onde n'est pas normalisée

Aujourd'hui : toute fonction d'onde normalisée peut s'écrire

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ixp/\hbar}\; \varphi(p)\; dp$$

$\psi(x)$ est une superposition d'ondes de de Broglie $e^{ixp/\hbar}$

$\varphi(p)$ représente l'amplitude de l'onde $e^{ixp/\hbar}$ dans ce développement



paquet d'ondes

La TF est similaire au développement sur une base

Développement d'un vecteur $\vec{A}$ sur une base orthonormée $\{\vec{u}_n\}$

$$\vec{A} = \sum_n \varphi_n \, \vec{u}_n \qquad \text{à relier à} \qquad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) \, e^{ixp/\hbar} \, dp$$

Élément à développer	vecteur $\vec{A}$	fonction $\psi(x)$
Type de somme	somme discrète	intégrale
Vecteurs de base	$\vec{u}_n$	$u_p(x) = e^{ixp/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$
normalisation	$\sum_n \lvert\varphi_n\rvert^2 = 1$	$\int \lvert\varphi(p)\rvert^2 \, dp = 1$
« poids » d'un vecteur de base	$\lvert\varphi_n\rvert^2$	$\lvert\varphi(p)\rvert^2$

On peut formaliser cette analogie en introduisant la notion de base continue.
Hors programme pour ce cours (bases hilbertiennes dans l'amphi 5)

Résolution de l'équation de Schrödinger (particule libre)

Condition initiale (instant t=0) : $\psi(x,0)$

On cherche la solution $\psi(x,t)$ de : $i\hbar \dfrac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m} \dfrac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}$

On utilise la transformation de Fourier

$$\psi(x,t) \longleftrightarrow \varphi(p,t) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \longleftrightarrow -\frac{p^2}{\hbar^2} \varphi(p,t)$$

La TF de l'équation de Schrödinger est donc : $i\hbar \dfrac{\partial \varphi(p,t)}{\partial t} = \dfrac{p^2}{2m} \varphi(p,t)$

qui s'intègre facilement : $\varphi(p,t) = \varphi(p,0) \, e^{-ip^2 t/(2m\hbar)}$

Remarque : $\lvert\varphi(p,t)\rvert^2 = \lvert\varphi(p,0)\rvert^2$

La densité de probabilité pour l'impulsion
d'une particule libre n'évolue pas dans le temps

Résolution de l'éq. de Schrödinger (particule libre) - suite

Une fois connue la transformée de Fourier $\varphi(p,t)$ à tout instant t

$$\varphi(p,t) = \varphi(p,0) \, e^{-ip^2 t/(2m\hbar)}$$

on peut en déduire $\psi(x,t)$ à tout t par transformation de Fourier :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p,t) \, e^{ipx/\hbar} \, dp$$

c'est-à-dire :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p,0) \, e^{-ip^2 t/(2m\hbar)} \, e^{ipx/\hbar} \, dp$$

Méthode générale de résolution de l'éq. de Schrödinger libre,
utilisable pour un paquet d'ondes quelconque