
CHAPITRE 3

LA FONCTION D'ONDE ET LES INÉGALITÉS DE HEISENBERG



Werner Heisenberg

3.1 Introduction

Nous pouvons résumer la dualité entre les aspects corpusculaire et ondulatoire par le tableau suivant :

<u>Aspect corpusculaire</u>		<u>Aspect ondulatoire</u>	
Quantité de mouvement $\vec{p}$		Vecteur d'onde $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$	
Energie	E	Pulsation	$\omega = E/\hbar$

Ainsi à une particule matérielle de quantité de mouvement $\vec{p}$ et d'énergie E , toutes deux déterminées, on peut associer une onde matérielle de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de pulsation ω . Nous avons vu au chapitre précédent que le système formé par la particule est décrit par une fonction d'onde. Quelle est la nature de cette fonction d'onde ? Ou en d'autres termes quelle est son expression mathématique ?

Ce chapitre étudie la forme de la fonction d'onde associée à une particule donnée (ou plus généralement à un système donné) et analyse ses propriétés. Nous commencerons par étudier le cas d'une particule matérielle libre. On pourrait associer à une telle particule, une onde monochromatique plane d'expression complexe :

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right]. \quad (3.1)$$

Cependant, cela conduit à des contradictions à la fois d'ordre mathématique et physique. Nous montrerons la nécessité de substituer à cette onde "unique" une superposition d'ondes planes appelée **paquet d'ondes**. L'analyse des propriétés de ce paquet d'onde nous conduira aux inégalités de Heisenberg.

3.2 Représentation par une onde plane monochromatique : les difficultés

Considérons une particule libre¹ de masse m , se déplaçant sur l'axe des x avec une impulsion $\vec{p} = p_x \vec{x}$ et une énergie E toutes deux bien définies. Selon de Broglie, on doit associer à cette particule une onde se déplaçant dans la même direction avec un vecteur d'onde $\vec{k} = k_x \vec{x}$ et une pulsation ω telle que :

$$p_x = \hbar k_x \quad \text{et} \quad E = \hbar \omega. \quad (3.2)$$

On peut supposer que cette onde est une onde plane² :

$$\Psi(x, t) = A \exp[i(k_x x - \omega t)]. \quad (3.3)$$

Comme $k_x = p_x/\hbar$ et $\omega = E/\hbar$ (3.2) la fonction d'onde (3.3) peut se réécrire comme suit :

$$\Psi(x, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)\right]. \quad (3.4)$$

La représentation d'une particule matérielle libre par une onde plane donne lieu cependant à des difficultés d'ordre physique et mathématique :

Difficulté I (Physique) : *L'onde monochromatique plane (3.3) présente une extension temporelle et spatiale incompatible avec la localisation de la particule dans le temps et dans l'espace.*

Difficulté II (Physique) : *La vitesse de phase de l'onde est différente de celle de la particule ! En effet, la "vitesse de phase" de l'onde associée est définie par*

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}. \quad (3.5)$$

1. c'est-à-dire une particule sur laquelle n'agit aucune force

2. On montre en fait que l'onde plane est solution de l'équation d'évolution de la fonction d'onde d'une particule matérielle libre

La particule étant libre, son énergie est réduite à la seule énergie cinétique

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} .$$

La vitesse de phase est donc

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2} . \quad (3.6)$$

La vitesse de l'onde plane associée à la particule ne correspond pas à sa vitesse réelle !

Difficulté III (mathématique) : La représentation par une onde plane donne lieu à un autre problème. L'intégrale de probabilité, traduisant que la particule est quelque part dans l'espace diverge :

$$\iiint_{\text{espace}} \Psi(\vec{r}, t) \bar{\Psi}(\vec{r}, t) dv = \iiint_{\text{espace}} A^2 dv \longrightarrow \infty .$$

L'onde plane n'est pas de carré sommable !

Compte tenu de toutes ces difficultés, on ne peut pas représenter une particule matérielle libre par une onde plane. Cependant, nous allons le voir dans la suite, tous ces problèmes ne doivent pas pousser à renoncer à l'onde plane. En effet, elle joue, mathématiquement un rôle très important.

Représentons notre particule matérielle libre par la superposition de deux ondes planes de pulsations très proches :

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) , \quad \text{avec} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \Psi_1(x, t) &= A \exp \left[i \left(k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right) x - \left(\omega_0 + \frac{\Delta \omega}{2} \right) t \right] , \\ \Psi_2(x, t) &= A \exp \left[i \left(k_0 - \frac{\Delta k}{2} \right) x - \left(\omega_0 - \frac{\Delta \omega}{2} \right) t \right] , \end{aligned} \quad (3.8)$$

où $\Delta k \ll k_0$. L'onde résultante est donnée par :

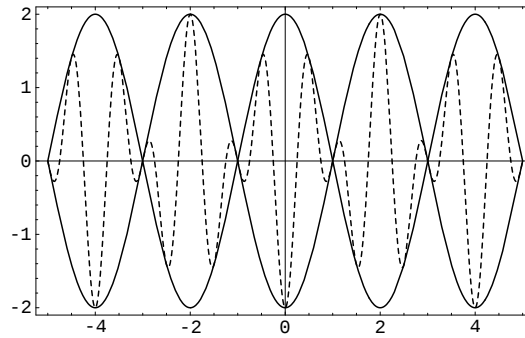
$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= A \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \left\{ \exp \left[\frac{i}{2}(\Delta k x - \Delta \omega t) \right] + \exp \left[\frac{-i}{2}(\Delta k x - \Delta \omega t) \right] \right\} \\ &= 2A \exp[i(k_0 x - \omega_0 t)] \cos \left(\frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta \omega}{2} t \right) . \end{aligned} \quad (3.9)$$

La partie réelle de l'onde

$$\mathcal{Re}[\Psi(x, t)] = 2A \cos(k_0 x - \omega_0 t) \cos \left(\frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta \omega}{2} t \right) \quad (3.10)$$

est représentée sur la figure 3.2 (avec $A = 1$, $k_0 = 2\pi$, $\Delta k = \omega/2$). Elle est constituée d'une oscillation rapide (longueur d'onde $\lambda_0 = 2\pi/k_0$), modulée par une enveloppe variant lentement avec la longueur d'onde

$$\lambda_{\text{enveloppe}} = \frac{2\pi}{\Delta k/2} = \frac{4\pi}{\Delta k} \gg \lambda_0 . \quad (3.11)$$

FIGURE 3.1 – *Superposition de deux ondes planes*

L'oscillation rapide se propage à la vitesse de phase $v_\phi = \omega_0/k_0$. Les noeuds de l'enveloppe, eux, sont aux positions x qui satisfont à l'équation :

$$\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta \omega}{2}t = (2n+1)\frac{\pi}{2} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

La modulation (l'enveloppe) se déplace donc à la vitesse v_g donnée par :

$$v_g = \frac{dx}{dt} = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} . \quad (3.12)$$

A la limite $\Delta \omega \rightarrow 0$, $\Delta k \rightarrow 0$, on obtient :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} . \quad (3.13)$$

Pour notre particule matérielle libre, $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ et

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v . \quad (3.14)$$

Nous voyons que c'est la vitesse v_g de l'enveloppe et non la vitesse de phase qui correspond à la vitesse de la particule matérielle.

3.3 Représentation par un paquet d'ondes

Définition du paquet d'ondes

Nous avons vu au paragraphe précédent qu'une onde plane ne peut valablement représenter une particule matérielle libre ayant une impulsion bien définie, l'onde étant complètement délocalisée dans l'espace. Un état physique acceptable, pour une particule libre, est un *paquet d'ondes*, c'est-à-dire une superposition linéaire à coefficients complexes d'ondes planes monochromatiques.

Commençons par considérer une particule matérielle libre confinée à une portion de l'axe des x . Nous considérons la superposition - la plus générale possible - d'ondes planes donnée par

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p_x) e^{i[p_x x - E(p_x)t]/\hbar} dp_x . \quad (3.15)$$

où la constante $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ est introduite pour des raisons de normalisation. La fonction $\Phi(p_x)$ joue le rôle de coefficient de l'onde plane $e^{i[p_x \cdot x - E(p_x)t]/\hbar}$ dans la superposition linéaire. Elle donne l'importance relative de chacune des ondes monochromatiques planes qui forment le paquet d'ondes. En général $\Phi(p_x)$ est une fonction complexe. Mais pour des raisons de simplicité, dans la suite de ce cours, nous la prenons réelle. *L'expression (3.15) définit le paquet d'ondes.*

Notion de vitesse de groupe

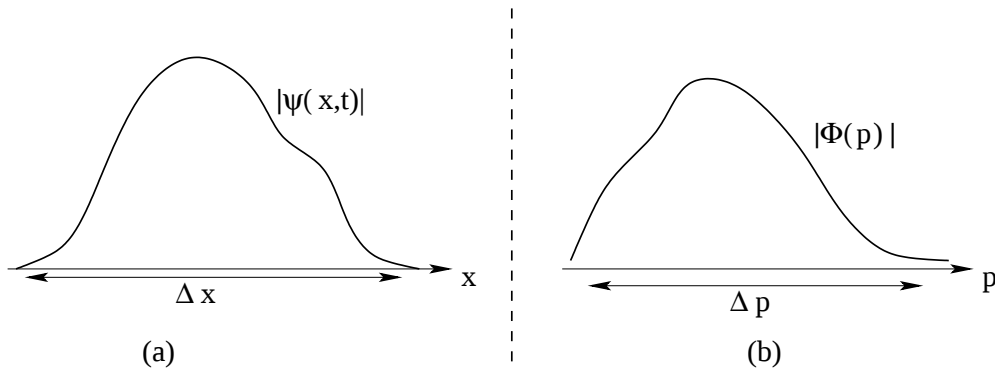


FIGURE 3.2 – Paquets d'ondes à support bornés dans les espaces position et impulsion

Un paquet d'ondes peut avoir une forme quelconque. Il en existe dont le profil est une fonction à une seule “bosse”. Ces types de paquets vont reproduire des effets localisés rendant compatible les notions d'onde et de corpuscule. Dans la suite nous supposons que le paquet $|\Psi(x, t)|$ est localisé et s'étend donc sur un intervalle donné Δx (voir figure (3.3 - a)). Il en résulte que la fonction $|\Phi(p_x)|$ est également localisée avec une extension Δ_{p_x} .

Supposons que $|\Phi(p_x)|$ est une fonction qui est localisée autour du point $p_x = p_0$, c'est-à-dire qu'elle est négligeable presque partout (ou tend rapidement vers zéro) sauf dans l'intervalle $[p_0 - \Delta p_x, p_0 + \Delta p_x]$ autour de p_0 (voir figure (3.3 - b)). En écrivant (3.15) sous la forme

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p_x) e^{i\beta(p_x)/\hbar} dp_x . \quad (3.16)$$

avec

$$\beta(p_x) = [p_x \cdot x - E(p_x)t] , \quad (3.17)$$

on montre que $|\Psi(x, t)|$ est maximum lorsque $\beta(p_x)$ est constante au voisinage de $p_x = p_0$. En effet, si $\beta(p_x)$ variait significativement dans l'intervalle $[p_0 - \Delta p_x, p_0 + \Delta p_x]$, le facteur $\exp[i\beta(p_x)/\hbar]$ oscillerait rapidement, de sorte que la valeur de l'intégrale (3.16) soit petite. Ainsi $|\Psi(x, t)|$ aura des valeurs significatives seulement dans une région limitée et son maximum serait atteint lorsque la condition suivante :

$$\left[\frac{d\beta(p_x)}{dp_x} \right]_{p_x=p_0} = 0 \quad (3.18)$$

sera satisfaite. Cette condition fixe le centre du paquet d'ondes, qui selon (3.17-3.18) évolue suivant l'équation horaire :

$$x = v_g t \quad (3.19)$$

avec

$$v_g = \left[\frac{dE(p_x)}{dp_x} \right]_{p_x=p_0} . \quad (3.20)$$

On déduit de (3.19) que le centre du paquet d'ondes se déplace à la vitesse v_g . Cette vitesse est appelée *vitesse de groupe* du paquet d'ondes. De (3.20) et puisque $E = \hbar\omega$, et $p_x = \hbar k$, on a :

$$v_g = \left[\frac{d\omega(k)}{dk} \right]_{k=k_0} . \quad (3.21)$$

avec $k_0 = p_0/\hbar$. Remarquons que cette vitesse est en générale différente de la vitesse de phase v_{ph} qui, elle, est définie comme la vitesse de propagation d'une onde plane individuelle. Pour l'onde plane $A \exp[i(k_0x - \omega(k_0)t)]$ la vitesse de phase est définie par

$$v_{ph} = \frac{\omega(k_0)}{k_0} = \frac{E(p_0)}{p_0} . \quad (3.22)$$

Propagation sans déformation du paquet d'ondes

Comme dans le paragraphe précédent (voir eq. 3.9), nous allons montrer que le paquet d'ondes (3.15) peut s'écrire comme le produit d'une onde plane unique modulée par une enveloppe. Revenons à l'expression (3.15) du paquet d'ondes

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p_x) e^{i[p_x \cdot x - E(p_x)t]/\hbar} dp_x$$

et faisons un développement limité de $E(p_x) = p_x^2/2m$ autour de p_0 :

$$\begin{aligned} E(p_x) &= \frac{p_0^2}{2m} + \frac{p_0}{m}(p_x - p_0) + \frac{(p_x - p_0)^2}{2m} \\ &= E(p_0) + v_g(p_x - p_0) + \frac{(p_x - p_0)^2}{2m} . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Comme la fonction $\Phi(p_x)$ dans (3.15) est négligeable partout sauf dans l'intervalle $[p_0 - \Delta p_x, p_0 + \Delta p_x]$, nous pouvons négliger le troisième terme dans (3.23), à la limite des temps t assez petits tels que

$$\frac{1}{2m\hbar}(\Delta p_x)^2 t \ll 1 . \quad (3.24)$$

En effet, si la condition (3.24) est satisfaite, la quantité $\exp[-i(p_x - p_0)^2 t / 2m\hbar]$ dans (3.15) tend vers 1. En faisant cette approximation, l'équation (3.15) se réduit à

$$\Psi(x, t) = e^{i[p_0 x - E(p_0)t]/\hbar} F(x, t) \quad (3.25)$$

où

$$F(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_x - p_0)(x - v_g t)/\hbar} \Phi(p_x) dp_x . \quad (3.26)$$

Le paquet d'ondes (3.25) est le produit d'une onde plane de longueur d'onde $\lambda_0 = h/|p_0|$ et de fréquence $\omega_0 = E(p_0)/\hbar$ avec une fonction enveloppe de modulation $F(x, t)$ telle que $|\Psi(x, t)|^2 = |F(x, t)|^2$. Puisque

$$F(x, t = 0) = F(x + v_g t, t) \quad (3.27)$$

la fonction enveloppe se propage sans déformation avec la vitesse de groupe v_g . Notons que ceci n'est valable que dans les limites des temps t définis par approximation (3.24). Pour des temps suffisamment longs la forme du paquet d'onde varie au cours de la propagation.

Transformée de Fourier et fonction d'onde dans l'espace des moments

Revenons à l'expression (3.15), et posons $\psi(x) \equiv \Psi(x, t = 0)$. En utilisant les résultats de l'Annexe C, nous voyons que les fonctions

$$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{ip_x x/\hbar} \phi(p_x) dp_x \quad (3.28)$$

et

$$\phi(p_x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{-ip_x x/\hbar} \psi(x) dx \quad (3.29)$$

sont des transformées de Fourier l'une de l'autre. Plus généralement, à toute date t , nous pouvons introduire $\Phi(p_x, t)$ telle que

$$\Psi(x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{ip_x x/\hbar} \Phi(p_x, t) dp_x \quad (3.30)$$

et

$$\Phi(p_x, t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{-ip_x x/\hbar} \Psi(x, t) dx \quad (3.31)$$

soient également des transformées de Fourier l'une de l'autre. La fonction $\Phi(p_x, t)$ est appelée *fonction d'onde dans l'espace des moments* et on voit que $\phi(p_x) = \Phi(p_x, t = 0)$. La définition (3.31) de la fonction d'onde de l'espace des moments est générale, elle est valable pour n'importe quelle fonction d'onde $\Psi(x, t)$, qu'elle soit associée à une particule libre ou non.

Du théorème de Parseval, on déduit que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(p_x, t)|^2 dp_x = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx . \quad (3.32)$$

Par conséquent la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ est de carré sommable et convenablement normalisée si et seulement si $\Phi(p_x, t)$ l'est également

$$\int |\Phi(p_x, t)|^2 dp_x = 1 .$$

Cette propriété fournit une règle de construction des paquets d'ondes consistant à choisir $\Phi(p_x, t)$ de carré sommable et normalisée.

De la relation (B.6) de l'annexe C, on voit que, si Δx et Δp_x sont respectivement les extensions du paquet dans l'espace des positions et des moments, alors le produit $\Delta x \Delta p_x$ est une constante de l'ordre de $\hbar$. Ceci signifie que plus le paquet est localisé dans l'espace des positions plus il est étalé dans l'espace des moments et inversement. Pour fixer les idées, considérons deux exemples simples de paquets d'ondes.

Exemples

Exemple I : Onde plane tronquée

Considérons une fonction d'onde définie par

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_0 x}, & \text{si } -a \leq x \leq +a \\ 0, & \text{si } |x| > a . \end{cases} \quad (3.33)$$

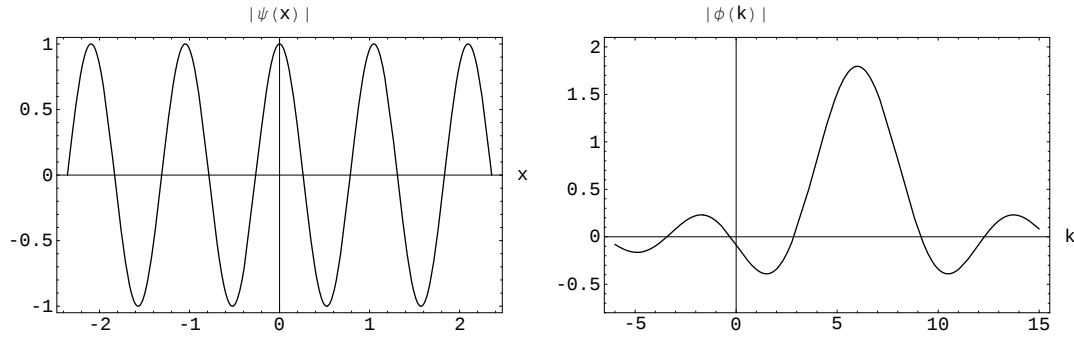


FIGURE 3.3 – Partie réelle de l'onde plane tronquée et partie réelle de sa transformée de Fourier (avec $a = 2, 25, k_0 = 6$).

Cette onde plane tronquée d'extension $\Delta x = 2a$. Elle peut s'écrire comme un paquet d'ondes de type (3.28)

$$\psi(x) = (2\pi)^{-1/2} \int e^{ik_x \cdot x} \phi(k_x) dk_x$$

La fonction $\phi(k_x)$ est obtenue par transformée de Fourier de $\psi(x)$

$$\phi(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^{+a} e^{-i(k_x - k_0)x} dx = \frac{2a}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin[(k_x - k_0)a]}{(k_x - k_0)a} \quad (3.34)$$

Les fonctions $\psi(x)$ et $\phi(k_x)$ sont représentées sur la figure 3.3. La fonction $\phi(k_x)$ est une fonction centrée autour de $k_x = k_0$. Pour simplifier les calculs, prenons pour largeur Δk_x , le double de la distance du maximum central au premier zéro, soit $\Delta k_x = 2\pi/a$. Nous trouvons que

$$\Delta x \Delta k_x = 4\pi \quad \text{c'est-à-dire} \quad \Delta x \Delta p_x = 4\pi \hbar. \quad (3.35)$$

La relation (3.35) indique que largeur Δx de la fonction $\psi(x)$ est d'autant plus grande que la largeur Δp_x de la fonction $\phi(p_x)$ est plus petite. En d'autres termes cette relation exprime le fait que plus la fonction $\psi(x)$ est étalée, plus $\phi(p_x)$ est localisée. La largeur de la fonction $\phi(p_x)$ est inversement proportionnelle à celle de la fonction $\psi(x)$. Notons enfin que le produit $\Delta x \Delta p_x$ est une constante de l'ordre de $\hbar$, indépendante de a , demi-largeur de la fonction $\psi(x)$.

Exemple II : Paquet d'ondes gaussien

Considérons maintenant une fonction d'onde d'enveloppe gaussienne

$$\psi(x) = A e^{ik_0 \cdot x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}. \quad (3.36)$$

Cette fonction représente une onde plane de vecteur d'onde $k_0 \vec{x}$ modulée par une enveloppe gaussienne $e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$ centrée en $x = x_0$. Il est commode de prendre comme largeur de cette fonction $\Delta x = 2\sigma$ car en $x = x_0 + \sigma$, la fonction $\psi(x)$ tombe à $1/\sqrt{e}$ de son amplitude maximale, A . La fonction d'onde (3.36) peut s'écrire comme un paquet d'ondes

$$\psi(x) = (2\pi)^{-1/2} \int e^{ik_x \cdot x} \phi(k_x) dk_x$$

avec $\phi(k_x)$ donnée par la transformée de Fourier de $\psi(x)$

$$\phi(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_x \cdot x} \psi(x) dx = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(k_x - k_0)x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} dx. \quad (3.37)$$

On a :

$$\phi(k_x + k_0) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_x \cdot x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} dx . \quad (3.38)$$

Posons $x = u + x_0$

$$\phi(k_x + k_0) = A e^{-ik_x \cdot x_0} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_x \cdot u} e^{-u^2/2\sigma^2} du \right] . \quad (3.39)$$

En analyse de Fourier on montre que l'intégrale dans le crochet n'est rien d'autre que la transformée de Fourier d'une fonction gaussienne,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_x \cdot u} e^{-u^2/2\sigma^2} du = \sigma e^{-k_x^2 \sigma^2/2} \quad (3.40)$$

qui est elle-même une fonction gaussienne. Nous avons donc

$$\phi(k_x + k_0) = A \sigma e^{-k_x^2 \sigma^2/2} e^{-ik_x \cdot x_0} , \quad (3.41)$$

soit finalement

$$\phi(k_x) = A \sigma e^{-(k_x - k_0)^2 \sigma^2/2} e^{-i(k_x - k_0)x_0} . \quad (3.42)$$

Cette fonction représente une onde plane modulée par un paquet d'ondes gaussien centré en

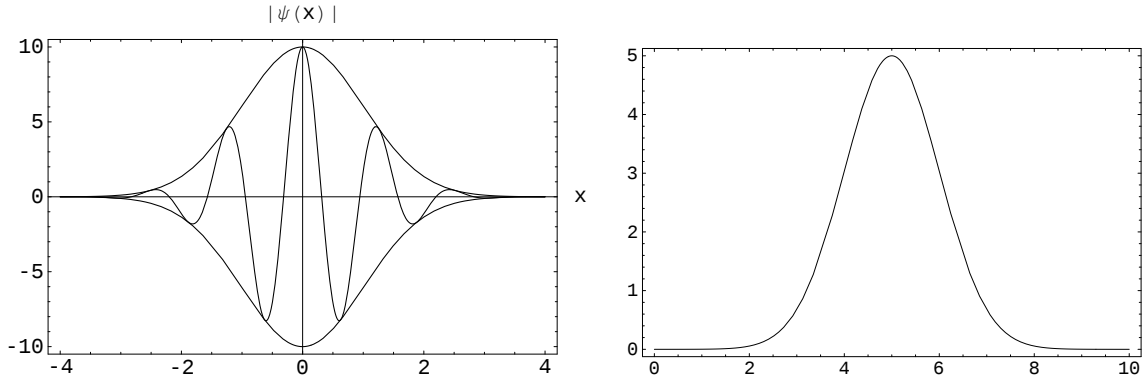


FIGURE 3.4 – Partie réelle du paquet d'ondes gaussien et de sa transformée de Fourier (avec $x_0 = 0, k_0 = 5, \sigma = 1$).

$k_x = k_0$. Les fonctions $\psi(x)$ et $\phi(k_x)$ sont représentées sur la figure 3.3. En définissant la largeur de la fonction $\phi(k_x)$ de la même façon que pour $\psi(x)$, on obtient

$$\Delta k_x = 2/\sigma , \quad (3.43)$$

et donc

$$\Delta x \Delta k_x = 4 \quad \text{soit} \quad \Delta x \Delta p_x = 4\hbar . \quad (3.44)$$

Le produit $\Delta x \Delta p_x$ est encore une fois indépendant de la largeur de notre fonction de départ. Encore une fois, de la relation 3.44 nous déduisons que plus on localise le paquet d'ondes dans l'espace des positions x , plus il s'élargit dans l'espace des vecteurs d'ondes k . La relation $\Delta x \Delta p_x = cte$ est une propriété des transformées de Fourier. Nous verrons dans la section suivante que cette propriété est à la base du principe d'indétermination d'Heisenberg.

Paquet d'ondes dans l'espace à trois dimensions

La discussion que nous avons faite concernant la particule libre évoluant en une dimension peut facilement être étendue aux dimensions 2 ou 3. Par superposition d'ondes planes de la forme $\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - E(p)t)\right]$, on obtient le paquet d'ondes

$$\Psi(\vec{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i[\vec{p} \cdot \vec{r} - E(p)t]/\hbar} \phi(\vec{p}) d\vec{p} \quad (3.45)$$

où $d\vec{p} = dp_x dp_y dp_z$ est le volume élémentaire dans l'espace des impulsions. En écrivant $\psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, t=0)$, il vient selon l'annexe C que les fonctions

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar} \phi(\vec{p}) d\vec{p} \quad (3.46)$$

et

$$\phi(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.47)$$

sont des transformées de Fourier l'une de l'autre. Comme dans le cas de la dimension 1, on peut introduire la fonction d'onde $\Phi(\vec{p}, t)$ de l'espace des impulsions définie comme la transformée de Fourier de $\Psi(\vec{r}, t)$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar} \Phi(\vec{p}, t) d\vec{p} \quad (3.48)$$

et

$$\Phi(\vec{p}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}/\hbar} \Psi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (3.49)$$

avec $\phi(\vec{p}) = \Phi(\vec{p}, t=0)$. Comme en 1D, on a l'égalité

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \int |\Phi(\vec{p}, t)|^2 d\vec{p} \quad (3.50)$$

qui signifie que si le paquet d'ondes est de carré sommable et normalisé dans l'espace des positions $\vec{r}$, il l'est également dans l'espace des impulsions $\vec{p}$. Notons enfin que la vitesse de groupe du paquet d'ondes en 3D est définie par

$$\vec{v}_g = \left[\vec{\nabla} E(p) \right]_{\vec{p}=\vec{p}_0} . \quad (3.51)$$

3.4 Les inégalités de Heisenberg

Nous avons montré sur des exemples en 1D que le produit de la largeur Δx du paquet d'ondes dans l'espace des positions est relié à sa largeur Δp_x dans l'espace des impulsions par la relation

$$\Delta x \Delta p_x = \text{constante}$$

où la constante est de l'ordre de $\hbar$. En fait cette est une relation générale qui découle des propriétés des Transformées de Fourier. En effet, de l'équation (B.4) de l'annexe C, on déduit que les largeurs Δx et Δp_x du paquet d'ondes vérifient l'inégalité :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (3.52)$$

En utilisant les propriétés des transformations de Fourier en $3D$, on a

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.53)$$

Les relations (3.53) sont les relations d'incertitudes position - impulsion de Heisenberg. Leurs interprétations physiques est la suivante : *Si une mesure de la position est faite avec une précision Δx ; et si une mesure "simultanée" de la quantité de mouvement est faite avec une précision Δp_x ; alors le produit des deux incertitudes ne peut jamais être plus petit qu'un nombre de l'ordre de $\hbar$:*

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

ou en d'autres termes *une particule ne peut être simultanément localisée en position et en impulsion au delà de la limite (3.53).*

Une relation d'incertitude temps - énergie analogue aux relations d'incertitudes position - impulsion peut être obtenue de la manière suivante. Soit $\Psi(t) \equiv \Psi(\vec{r}_0, t)$, une fonction d'onde associée à une particule. Ce paquet d'ondes "temporel" a une certaine extension Δt dans le temps : c'est-à-dire que la fonction d'onde $\Psi(t)$ est négligeable partout sauf dans l'intervalle Δt . Ce paquet temporel peut être décrit comme une superposition d'ondes monochromatiques planes de fréquences angulaires ω par l'intégrale de Fourier :

$$\Psi(t) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (3.54)$$

où la fonction $\Phi(\omega)$ est donnée par

$$\Phi(\omega) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (3.55)$$

Comme $\Psi(t)$ prend des valeurs significatives seulement pour une durée Δt , il vient de la propriété générale (B.4) des transformées de Fourier que $\Phi(\omega)$ n'est non négligeable que pour des valeurs de $\omega \in \Delta\omega$ telle que :

$$\Delta\omega \Delta t \geq \frac{1}{2}.$$

De l'équation $E = \hbar\omega$, on en déduit que la largeur ΔE de la distribution en énergie de la particule satisfait la relation d'incertitude temps - énergie

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.56)$$

L'interprétation de cette relation (3.56) est la suivante : *si le temps caractéristique de l'évolution de la particule est Δt , alors l'énergie de la particule ne peut être connue avec une précision meilleure à $\frac{\hbar}{2\Delta t}$.*

Exercices d'applications

- Supposons que la quantité de mouvement d'une particule donnée puisse être mesurée au millièmes. Quelle sera l'incertitude minimum sur la position de cette particule si :
 - elle est une masse de $1mg$ de vitesse $2m/s$
 - elle est un électron dont la vitesse est $1,8 \times 10^8 m/s$.
- Quelle est l'incertitude minimale sur la position d'un photon de longueur d'onde $3000\text{\AA}$ si celle-ci est connue au millionième.
- Quelle est l'incertitude minimum sur l'état d'énergie d'un atome si un électron demeure dans cet état pendant $10^{-8}s$?

3.5 Conclusion

En conclusion retenons que les aspects ondulatoire et corpusculaire peuvent être rendus complémentaires grâce à la notion de paquets d'ondes monochromatiques planes. Dans ce contexte, les inégalités d'Heisenberg s'imposent :

1. Entre le temps caractéristique Δt d'un phénomène et la largeur de son spectre énergétique ΔE , on a : $\Delta t \Delta E \geq \hbar/2$.
2. Entre l'extension spatiale Δx d'un phénomène et la largeur de son spectre en quantité de mouvement (suivant cette dimension) Δp_x , on a : $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$.

Enfin notons que les notions de vitesse de phase v_ϕ et de vitesse de groupe v_g permettent de souligner la différence entre onde monochromatique plane et paquet d'ondes :

$$v_\phi = \frac{\omega}{k}, \quad v_g = \frac{d\omega}{dk}.$$