CHAPITRE 2 : PARTICULE LIBRE

Nous allons utiliser le formalisme présenté dans le chapitre précédent pour étudier l'évolution dans l'espace et dans le temps d'une particule quantique en commençant par le cas très simple de la particule libre.

1. Fonction d'onde d'une particule libre non localisée

1.1. Définition de la particule quantique Libre

On appelle **particule quantique libre**, une particule quantique évoluant dans le vide sans interaction.

L'énergie potentielle de la particule quantique libre est ainsi nulle en tout point de l'espace ; elle n'est donc soumise à aucune force et est donc isolée. Dans le référentiel $\mathscr{R}$, la quantité de mouvement de la particule quantique de masse m est notée $\vec{p}$ et son énergie mécanique E se confond avec son énergie cinétique E_C.

L'évolution de la fonction d'onde d'une particule quantique libre est donc donnée par l'équation de Schrödinger (avec $V(x) = 0$) :

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}}$$

La particule quantique libre peut se déplacer de $-\infty$ à $+\infty$.

La particule libre est dite non localisée lorsque sa densité de probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace.

1.2. Etats stationnaires d'une particule quantique libre

1.2.1. Onde plane progressive harmonique

On procède, comme précédemment, à la recherche d'une solution où la fonction d'onde est factorisée sous la forme d'un produit d'une fonction de t et d'une fonction de x. Cette fonction d'onde, nous le savons, peut se mettre sous la forme : $\Psi(x,t) = \varphi(x)\exp(-i\omega t)$, où $\varphi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps avec $V(x) = 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\hbar\omega\varphi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m\omega}{\hbar}\varphi(x) = 0$$

La résolution de cette équation différentielle implique trois cas :

- Cas où $\omega < 0$: la forme générale de la solution de cette équation s'écrit :

$$\varphi(x) = Aexp(kx) + Bexp(-kx), \qquad en\ posant\ k = \sqrt{\frac{2m(-\omega)}{\hbar}}\ ,$$

où A et B sont deux constantes complexes. Or $|\varphi(x)|^2$ diverge lorsque x→±∞. Cette solution n'est donc pas acceptable. Cela implique nécessairement *A = B = 0.*

Finalement, le cas où ω < 0 ne conduit à aucune solution physiquement acceptable.

- Cas où **ω = 0** : la forme générale de la solution de l'équation différentielle s'écrit : $\varphi(x) = Ax + B$. Comme $|\varphi(x)|^2$ ne doit pas diverger lorsque x→±∞, on a nécessairement A = 0. La contrainte de normalisation $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2\, dx = 1$ impose *B = 0.*

La fonction d'onde est donc nulle, c'est-à-dire que la particule n'existe pas. On écarte donc la possibilité ω = 0.

- Cas où **ω > 0** : la forme générale de la solution s'écrit sous la forme suivante :

$$\varphi(x) = Aexp(ikx) + Bexp(-ikx), \qquad avec\ k = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\ ,$$

où A et B sont deux constantes complexes.

L'expression complète de la fonction d'onde est donc :

$$\boxed{\Psi(x,t) = Aexp\big((i(kx-\omega t)\big) + Bexp\big((-i(kx+\omega t)\big)}\quad avec\ \omega\ >\ 0.$$

C'est la superposition d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des x croissants $Aexp\big((i(kx-\omega t)\big)$ et d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des x décroissants $Bexp\big((-i(kx+\omega t)\big)$.

La solution qui peut s'écrire sous la forme :

$$\Psi(x,t) = (Aexp(ikx) + Bexp(-ikx))\exp(-i\omega t), \text{ conduit à :}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = |Aexp(ikx) + Bexp(-ikx)|^2$$

La densité de probabilité de présence est indépendante du temps ; il s'agit donc bien d'un **état stationnaire**. Ce résultat tient à ce que les deux ondes superposées ont la même pulsation.

Remarque : Convention d'écriture de la phase d'une onde harmonique

La résolution de l'équation de Schrödinger pour une particule quantique libre a conduit à ne retenir que la solution où ω > 0. Ainsi en mécanique quantique, on convient de toujours écrire la dépendance temporelle d'une fonction d'onde harmonique sous la forme $exp(-i\omega t)$ avec ω > 0. Convention, qui résulte de la forme de l'équation de Schrödinger.

1.2.2. Cas de la particule libre non localisée. Signification physique

Nous avons vu que les états stationnaires d'une particule quantique libre sont des superpositions d'ondes planes progressives harmoniques. Pour une particule quantique libre non localisée, la densité de probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace. La solution est donc de la forme :

$$\Psi(x,t) = Aexp\big((i(kx - \omega t)\big)$$

où A est une constante complexe. L'onde associée à cette particule est une onde plane progressive harmonique ayant une probabilité de présence $|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2$ qui est bien uniforme dans tout l'espace. Une telle fonction d'onde ne peut être normalisée. Elle n'a donc, en toute rigueur, pas de réalité physique.

- Néanmoins, on peut lui donner un sens en donnant une interprétation statistique à la fonction d'onde. Soit un faisceau de N particules quantiques libres, indépendantes et identiques, toutes dans le même état stationnaire représenté par la fonction d'onde $Aexp\big((i(kx - \omega t)\big)$. Le nombre moyen de particules dN détectable, par une mesure à l'instant t, entre x et x + dx :

$$dN = NdP(x,t) = N|A|^2 dx$$

où $dP(x,t)$: probabilité de présence d'une particule au voisinage de l'abscisse *x*. On en déduit que $\rho = N|A|^2$ représente la densité linéique de particules du faisceau. En pratique, on travaillera avec la fonction d'onde $\Psi_N(x,t) = \sqrt{\rho}exp\big((i(kx - \omega t)\big)$ pour représenter le faisceau de particules. $\int_D |\Psi_N(x,t)|^2 dx$ représente alors le nombre de particules dans la domaine D.

- L'onde plane progressive harmonique, en tant que solution élémentaire de l'équation de propagation, est un outil mathématique utile. On peut en effet construire par superposition d'états stationnaires, une fonction d'onde, sous la forme d'un paquet d'ondes, qui pourra être normalisée correctement, et qui permettra de représenter une particule quantique unique, dont la probabilité de présence prend des valeurs significatives sur un support fini.

1.2.3. Relation de De Broglie

Une particule quantique (ou plus généralement un système quantique) est caractérisée par son énergie E et son impulsion (ou quantité de mouvement) $\vec{p}$. La dualité onde-corpuscule de la particule repose sur les relations suivantes :

- Relation de Planck-Einstein : $\boxed{E = \hbar\omega = h\nu}$, ν et $\omega = 2\pi\nu$ étant respectivement la fréquence et la pulsation de l'onde associée à la particule.
- Relation de De Broglie : $\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}}$ où $\vec{k}$ est le vecteur d'onde de l'onde associée avec $\|\vec{k}\| = 2\pi/\lambda$, la pulsation spatiale, donnant la longueur d'onde de De Broglie : $\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$.

Ces relations sont valables pour toute particule quantique (photon, électron, atome…), la relation entre la quantité de mouvement p et l'énergie E étant adaptée au contexte comme suit :

- Pour les particules sans masse comme le photon : $\boxed{E = cp = c\hbar k}$ où c est la célérité de la lumière.
- Pour les particules massives comme les électrons (et pour de faibles vitesses devant c) :

$\boxed{E = E_C = \frac{P^2}{2m}}$ où E_c est l'énergie cinétique. (Dans le cas d'une particule libre).

1.2.4. Relation de dispersion et vitesse de phase

La résolution de l'équation de Schrödinger de la particule libre conduit à la relation de dispersion suivante, caractéristique de la propagation d'une onde libre :

$$\boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}}$$

La **vitesse de phase** v_φ de l'onde plane progressive harmonique peut être déduite de la relation de dispersion :

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

La vitesse de phase dépend de k : la propagation d'une onde libre est dispersive.

2. Représentation d'une particule quantique par un paquet d'ondes

2.1. Inégalité de Heisenberg spatiale

Enoncé : On ne peut pas attribuer simultanément à une particule quantique une position rigoureusement précise et une quantité de mouvement rigoureusement précise. Il existe une limitation intrinsèque à la définition simultanée de la position et de la quantité de mouvement imposée par l'inégalité de Heisenberg spatiale :

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

où Δx et Δp_x représentent l'amplitude des fluctuations statistiques autour de la valeur moyenne des distributions de positions et de quantités de mouvement respectivement. On les appelle **indéterminations quantiques** sur la position et la quantité de mouvement ; la mesure de la position ou de la quantité de mouvement de chaque particule ne livrant pas une valeur certaine. Elles sont définies comme suit :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad et \qquad \Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

où $\langle x\rangle$ et $\langle p_x\rangle$ sont les valeurs moyennes respectives de la mesure de la position et de la quantité de mouvement de N particules à l'instant t selon l'axe *(O,x)*.

$$\langle x\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \quad et \quad \langle p_x\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} p_{x_j}.$$

$$\text{De même } \langle x^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \quad et \quad \langle p_x^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} p_{x_j}^2$$

Remarque : Inégalité de Heisenberg temporelle

De façon similaire à l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'amplitude des fluctuations statistiques de l'énergie d'un système quantique autour de sa valeur moyenne ΔE diminue lorsque la durée caractéristique d'évolution τ de ce système augmente. Cette indétermination est donnée par la l'inégalité de Heisenberg temporelle (relation temps-énergie) :

$$\tau.\Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

Une conséquence de cette relation est que l'énergie d'un état stationnaire est parfaitement définie. En effet un état stationnaire étant caractérisé par une densité de probabilité indépendante du temps est invariant dans le temps et peut être caractérisé par un temps caractéristique d'évolution infini : $\tau \rightarrow +\infty$. Il en résulte que $\Delta E \rightarrow 0$.

2.2. Construction d'un paquet d'ondes quasi-monochromatique

Nous envisageons ici la propagation d'une superposition d'ondes planes harmoniques de pulsations et de vecteurs d'onde proches des valeurs ω_0 et k_0 liées par la relation de dispersion:

$$\omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m}$$

Plus précisément, on superpose N ondes harmoniques, avec $N \gg 1$. Leurs vecteurs d'onde sont supposés régulièrement distribués dans l'intervalle $[k_1;k_2]$. On pose $\Delta k = k_2 - k_1$ et $k_0 = (k_1 + k_2)/2$. On fait l'hypothèse que $\Delta k \ll k_0$. Cette approximation définit un **paquet d'ondes quasi-monochromatique**.

Pour former le paquet d'ondes, on choisit d'ajouter des composantes de même amplitude :

$$\psi_n(x,t) = Aexpi(k_n x - \omega_n t)$$

$$\text{avec } k_n = \frac{\Delta k}{N-1}(n-1) + k_1 \text{ et } \omega_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} \text{ où } 1 \leq n \leq N.$$

En mettant en facteur l'onde de pulsation et de vecteur d'onde moyens, on arrive à :

$$\psi_n(x,t) = Aexp\big(i(k_0 x - \omega_0 t)\big)\, exp\Big(i\big((k_n - k_0)x - (\omega_n - \omega_0)t\big)\Big).$$

Posons $\delta k_n = k_n - k_0$. Pour évaluer $\delta\omega_n = \omega_n - \omega_0$, on utilise la relation de dispersion :

$$\omega_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m}, \qquad \omega_0 + \delta\omega_n = \frac{\hbar}{2m}(k_0 + \delta k_n)^2 = \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar k_0}{m}\delta k_n + \frac{\hbar}{2m}\delta k_n^2,$$

$$\text{soit, puisque } \omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m} : \ \delta\omega_n = \frac{\hbar k_0}{m}\delta k_n + \frac{\hbar}{2m}\delta k_n^2.$$

On remarque que $\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$ représente la **vitesse de groupe**, que l'on note désormais :

$$\boxed{v_g = \frac{\hbar k_0}{m}}$$

L'évaluation de l'ordre de grandeur du rapport des deux termes qui composent $\delta\omega_n$:

$$\left|\frac{\frac{\hbar}{2m}\delta k_n^2}{\frac{\hbar k_0}{m}\delta k_n}\right| = \left|\frac{\delta k_n}{2k_0}\right| \ll 1$$

montre qu'en première approximation, on peut se contenter de l'expression simplifiée : $\delta\omega_n = v_g \delta k_n$. La fonction d'onde obtenue par superposition des N ondes harmoniques s'écrit :

$$\boxed{\psi(x,t) = A exp(i(k_0 x - \omega_0 t)) \sum_{n=1}^{N} \exp(i\delta\, k_n (x - v_g t))}$$

La densité de probabilité de présence s'en déduit :

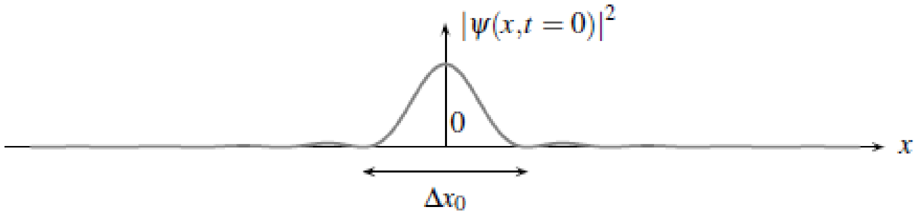
$$\boxed{|\psi(x,t)|^2 = |A|^2 \left|\sum_{n=1}^{N} \exp(i\delta k_n (x - v_g t))\right|^2}$$

À l'instant initial $t = 0$, la densité de probabilité s'écrit :

$$\boxed{|\psi(x,t=0)|^2 = |A|^2 \left|\sum_{n=1}^{N} \exp(i\delta k_n x)\right|^2}$$

- ***Structure du paquet d'ondes à l'instant initial***

La figure ci-dessous représente le graphe de $\boxed{|\psi(x,t=0)|^2}$ en fonction de x, et appelle quelques commentaires.



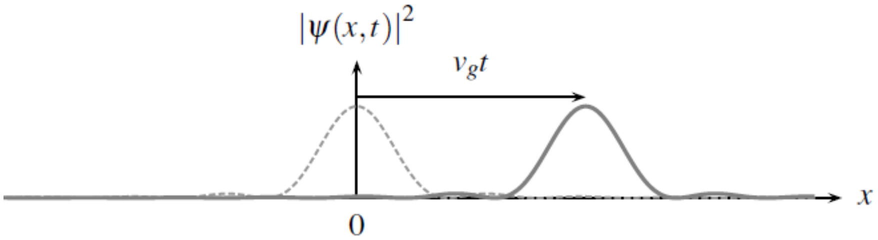
• Dans l'expression de $|\psi(x,t=0)|^2$, la somme correspond à un terme d'interférences à N ondes, avec $N \gg 1$. Chaque composante y est caractérisée par une phase égale à $\delta k_n x$.

• Pour $x = 0$, on constate que toutes ces ondes s'ajoutent en phase (interférences totalement constructives). La densité de probabilité est alors maximale, ce que montre bien le graphe de la figure ci-dessus.

• Sur le graphe, on constate que la densité de probabilité de présence prend des valeurs non nulles essentiellement au voisinage de $x = 0$ et reste très faible au-delà. Cela correspond au cas où les ondes sont en interférence destructives.

- ***Structure du paquet d'ondes à l'instant ultérieur***

En comparant l'expression de $|\psi(x,t)|^2$avec celle de l'état initial, on constate que le maximum de densité de probabilité se situe maintenant à l'abscisse $x = v_g t$ comme on peut le voir sur le graphe ci-dessous :



Ainsi, il existe une région de l'espace, d'extension limitée, où la densité de probabilité de présence est maximale et qui se déplace à la vitesse de groupe, la densité de probabilité étant fonction de la seule variable $x - v_g t$; ce qui est synonyme d'une propagation sans déformation à la vitesse vg.

Attention : En réalité le paquet d'ondes s'étale au cours de sa propagation, cela peut se comprendre si l'on ne néglige pas le second terme dans l'établissement de l'expression de $|\psi(x,t)|^2$. Cet effet est lié à la dispersion de la vitesse de groupe.

2.3. Paquet d'onde dans le cas d'une répartition continue de fréquence

En superposant une infinité d'ondes planes harmonique ($N \rightarrow +\infty$) de vecteurs d'onde voisins, la somme s'écrit avec une intégrale. En tenant compte de la condition de normalisation, la fonction d'onde du paquet d'onde s'écrit :

$$\boxed{\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, exp(i(kx - \omega(k)t))dk}$$

où $g(k)$ est une fonction éventuellement complexe représentant le poids de l'onde de vecteur d'onde *k*. *g(k)* est une fonction qui ne diffère de zéro et n'a de valeurs appréciables que dans un intervalle Δk très étroit entre $\left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right]$ (centré donc en $k = k_0$)

En utilisant les relations de De Broglie et de Planck-Einstein, cette relation peut s'écrire :

$$\boxed{\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p)\, exp\left(i\frac{px - Et}{\hbar}\right) dp}$$

où $g(p)$ représentant alors le poids de l'onde d'impulsion p.

Considérons l'expression de $\psi(x,t)$ avec *g(k)*.

Par hypothèse $\Delta k \ll k_0$ et $\Delta\omega \ll \omega_0$ $\quad$ *où* $\omega_0 = \omega(k_0)$

Développons au premier ordre la pulsation ω au voisinage de k_0 :

$$\omega(k) = \omega_0 + (k - k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} \quad ;\text{il vient :}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) exp\left[i\left(kx - \left(\omega_0 + (k - k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}\right)t\right)\right] dk$$

On peut sortir les termes indépendants de *k* de l'intégrale, il vient alors :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp\left[i\left(k_0 t\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} - \omega_0 t\right)\right] \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, exp\left[ik\left(x - t\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}\right)\right] dk.$$

Nous savons que $\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = v_g$ est la vitesse de groupe (nous le justifierons par la suite).

On peut donc écrire :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp\left[i\left(k_0 v_g t - \omega_0 t\right)\right] \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, exp\left[ik\left(x - v_g t\right)\right] dk$$

$$\text{A } t = 0, \qquad \text{on a alors :} \quad \psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, exp(ikx) dk$$

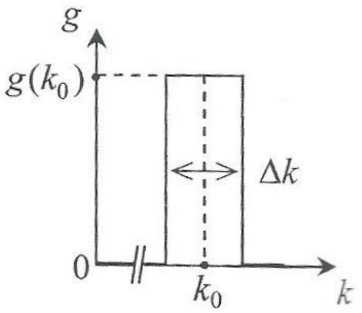
La fonction d'onde $\psi(x,t)$ est ainsi la fonction d'onde $\psi(x,0)$ translatée de la distance $v_g t$. De plus, le terme $exp\left[i\left(k_0 v_g t - \omega_0 t\right)\right]$ étant un déphasage dans l'amplitude, on a alors $|\psi(x,t)|^2 = |\psi(x,0)|^2$. Ainsi la densité de probabilité $|\psi|^2$ s'est propagée entre $t = 0$ et t à la vitesse v_g dans positif de l'axe *Ox*.

Revenons au calcul de la fonction :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) exp\left[i\left(kx - \left(\omega_0 + (k - k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}\right)t\right)\right] dk$$

Cette intégrale se calcule aisément dans une approche simplificatrice, en considérant la fonction $g(k)$ réelle et rectangulaire dans le domaine de variation de *k :*

$$g(k) = \begin{cases} a_0 = g(k_0) \;\; pour\; |k - k_0| < \dfrac{\Delta k}{2} \\ 0 \qquad\qquad\quad pour\; |k - k_0| > \dfrac{\Delta k}{2} \end{cases}$$



D'où :

$$\psi(x,t)=\frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} exp\left[i\left(kx-\left(\omega_0+(k-k_0)\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}\right)t\right)\right]dk$$

Posons $k'=k-k_0$, il vient :

$$\psi(x,t)=\frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}exp\big(i(k_0x-\omega_0t)\big)\int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{\frac{\Delta k}{2}} exp\left[i\left(k'\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\right)\right)\right]dk'$$

On trouve :

$$\psi(x,t)=\frac{g(k_0)\Delta k}{\sqrt{2\pi}}exp\big(i(k_0x-\omega_0t)\big)\frac{sin\left[\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\right)\frac{\Delta k}{2}\right]}{\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\right)\frac{\Delta k}{2}}$$

$$Posons\ u=\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\right)\frac{\Delta k}{2}$$

La fonction $\frac{sinu}{u}= sinc(u)$ est le sinus cardinal de u qui est maximal lorsque $u\to 0$.

$$|\psi(x,t)|^2\ est\ proportionnelle\ à\ sinc^2(u)$$

Ainsi la densité de probabilité (ou l'amplitude de la fonction d'onde) est maximale pour :

$$u=\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\right)\frac{\Delta k}{2}\to 0, soit\ x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\to 0\Rightarrow dx-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}dt=0$$

Ce maximum se déplace donc à la vitesse $\frac{dx}{dt}=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}=v_g$ qui est la vitesse de groupe ;

c'est à dire la vitesse du maximum de l'enveloppe du paquet d'onde.

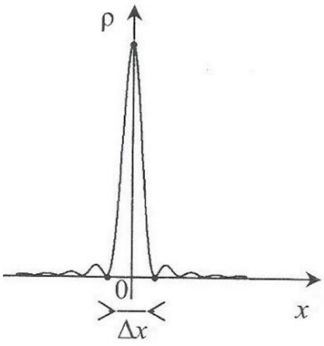
De la relation de dispersion $\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$, on obtient bien $v_g=\frac{d\omega}{dk}=\frac{\hbar k}{m}=\frac{p}{m}=v$

La vitesse de groupe s'identifie aussi à la vitesse v de la particule quantique.

A l'instant initial, on a :

$$|\psi(x,0)|=\frac{g(k_0)\Delta k}{\sqrt{2\pi}}\left|\frac{sin\left(x\frac{\Delta k}{2}\right)}{x\frac{\Delta k}{2}}\right|$$

Ainsi la densité de probabilité $|\psi(x,0)|^2$ est maximale en $x = 0$ (d'où la localisation de la particule) et s'annule si $sin\left(x\frac{\Delta k}{2}\right) = 0$ c'est-à-dire pour $x\frac{\Delta k}{2} = n\pi, n \in \mathbb{Z}$.



Les premiers minima nuls sont obtenus pour $x\frac{\Delta k}{2} = \pm\pi$

$\Longrightarrow x = \pm\frac{2\pi}{\Delta k}$

$|\psi(x,0)|^2 = \rho(x)$ est surtout importante dans la région d'extension Δx définie entre deux annulations successives d'où :

$$\Delta x = x_1 - x_2 = \frac{2\pi}{\Delta k} - \left(-\frac{2\pi}{\Delta k}\right) = \frac{4\pi}{\Delta k} \quad \Longrightarrow \Delta x.\Delta k = 4\pi$$

La relation $\Delta x.\Delta k = 4\pi$ est compatible avec l'inégalité de Heisenberg spatiale qui impose $\Delta x.\Delta k \geq 1/2$. Plus on cherche à confiner une particule dans un espace réduit moins la fréquence de l'onde associée à cette particule sera définie avec précision.

Comme $p = \hbar k$, on déduit $\Delta x.\Delta p \approx h \;\; \Longrightarrow \; \Delta x.\Delta p \geq h$.

3. Densité de courant de probabilité associée à une particule libre

Vecteur densité de courant de probabilité d'une particule quantique (paquet d'ondes quasi-monochromatique)

La probabilité de présence, à l'instant t, d'une particule quantique entre les abscisses x et x +dx est donnée par la relation $dP = |\psi(x,t)|^2\, dx$. Cette particule quantique peut être représentée par un paquet d'ondes, de vecteur d'onde moyen k, qui se déplace à la vitesse de groupe $v_g = \hbar k/m$. Ainsi le paquet d'ondes parcourt la distance dx pendant la durée $dt = dx/v_g$, permettant d'écrire :

$$dP = |\psi(x,t)|^2 dx = v_g\, |\psi(x,t)|^2\, dt = \frac{\hbar k}{m}|\psi(x,t)|^2 dt.$$

Par analogie avec la densité de courant électrique, cette relation met en évidence un « débit » de probabilité de présence dP à l'abscisse x à travers une surface unité, qui être peut exprimer au moyen d'un vecteur densité de courant de probabilité :

$$\boxed{\vec{J}(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \frac{\hbar\vec{k}}{m}}$$

La probabilité de présence qui « s'écoule » à travers une abscisse x pendant une durée dt est :

$$dP = \vec{J}(x,t).\vec{u}_x dt.$$

Dans cette approche unidimensionnelle, $\|\vec{J}\|$ s'exprime en s−1.

Remarque :

Dans le cas d'une seule particule, on utilise le vecteur :

$$\vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

qui permet de calculer le débit de probabilité de présence de cette particule à une abscisse donnée.

Dans le cas d'un faisceau de N particules, on utilise le vecteur :

$$\vec{J}_N = \rho \frac{\hbar\vec{k}}{m},$$

dans une description « hydrodynamique », permettant de calculer le flux $\Phi = \vec{J}_N.\vec{u}_x$, de particules à une abscisse donnée (nombre de particules qui passent à une abscisse donnée par unité de temps). ρ étant la densité linéique de particules quantiques.