Les inégalités de Heisenberg spatiales et leurs conséquences

I- Inégalités de Heisenberg spatiales.

A- Enoncé et illustrations.

1- Enoncé des inégalités de Heisenberg spatiales.

INEGALITES DE HEISENBERG SPATIALES
ou **PRINCIPE D'INDETERMINATION DE HEISENBERG :**

Dans toute situation, une mesure conjointe de position et de quantité de mouvement ne peut se faire qu'avec des indéterminations quantiques vérifiant :

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \Delta y \times \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad , \quad \Delta z \times \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Les inégalités de Heisenberg concernent donc les indéterminations des observables de position et de quantité de mouvement le long d'un **même axe cartésien**. Si on s'intéresse à des mesures de position et de quantité de mouvement le long de deux axes distincts ou de coordonnées non cartésiennes, elles ne sont plus valables ; par exemple :

$\Delta x \times \Delta p_y$ ou $\Delta r \times \Delta p_r$ ne vérifient pas ces inégalités !

- Ces inégalités peuvent être démontrées mais à notre niveau nous les admettons.
- Il existe une **version faible** de ces inégalités utilisées pour certains calculs approchés ou certains raisonnements qualitatifs : $\Delta x \times \Delta p_x \gtrsim \hbar$ ou $\Delta x \times \Delta p_x \gtrsim h$
- **Signification** :

Il est ontologiquement impossible (même avec des instruments de précision arbitrairement faible) de préparer ou d'observer une particule dans un état quantique où sa position et sa quantité de mouvement le long d'un même axe cartésien sont simultanément « bien déterminées ».

On rappelle que ces indéterminations quantiques n'ont rien à voir avec une quelconque incertitude expérimentale mais sont intrinsèques à la physique quantique.

- Si on essaie de localiser la particule selon l'axe (Ox) en imposant une faible valeur de Δx, alors Δp_x devient très élevé et la quantité de mouvement est « mal déterminée » ; et réciproquement.
- Le principe de Heisenberg rend a priori caduque la notion de trajectoire classique d'une particule, cette notion étant fondamentalement liée à la possibilité de définir une position et une vitesse instantanée pour la particule (détails au § 2).

2- Illustration n°1 : particule libre localisée.

- Nous avons effectué au paragraphe consacré au paquet d'onde l'étude pour la description d'une particule localisée spatialement :

→ Si la particule est localisée à chaque instant dans une zone de taille typique $\boldsymbol{\delta x}$, elle est décrite par une fonction d'onde ayant la forme d'un paquet d'ondes de largeur spectrale spatiale typique $\boldsymbol{\delta k \approx 2\pi/\delta x}$ (propriété de la transformée de Fourier qui régit le lien entre la forme spatiale du paquet d'onde et son spectre).

→ Chaque onde plane de pulsation spatiale k constituant le paquet est un état propre de la quantité de mouvement associé à la valeur $p_x = \hbar k$ donc, d'après le principe de décomposition spectrale, la mesure de la quantité de mouvement d'un tel paquet d'ondes est associée à un spectre de valeurs possibles de largeur $\boldsymbol{\delta p_x \approx \hbar\delta k \approx h/\delta x}$.

→ Ainsi, les indéterminations quantiques Δx et Δp_x étant respectivement proportionnelles à ces largeurs δx et δp_x , avec un coefficient de proportionnalité proche de 1, on en déduit que pour cette particule :

$$\boxed{\boldsymbol{\Delta p_x \approx h/\Delta x}}$$

ce qui est cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale.

- **Inégalité de Heisenberg et étalement du paquet d'ondes.**
  - Tous ces résultats sur le paquet d'ondes ne sont valables qu'aux « temps courts ». Sur de longues durées, il se produit, comme en électromagnétisme, un phénomène **d'étalement du paquet d'ondes**, qui se traduit ici par une **augmentation de l'indétermination quantique $\boldsymbol{\Delta x}$** au cours du temps.
  - Contrairement à Δx, l'indétermination **$\boldsymbol{\Delta p_x}$ n'est pas modifiée** lors de l'étalement car le spectre spatial du paquet reste le même à tout instant [1].
  - Cette augmentation de Δx alors que Δp_x ne change pas respecte l'inégalité de Heisenberg : si à $t = 0$, $\Delta x.\Delta p_x \approx h$ et que par la suite Δx augmente à Δp_x fixé, on aura $\Delta x.\Delta p_x > h$!

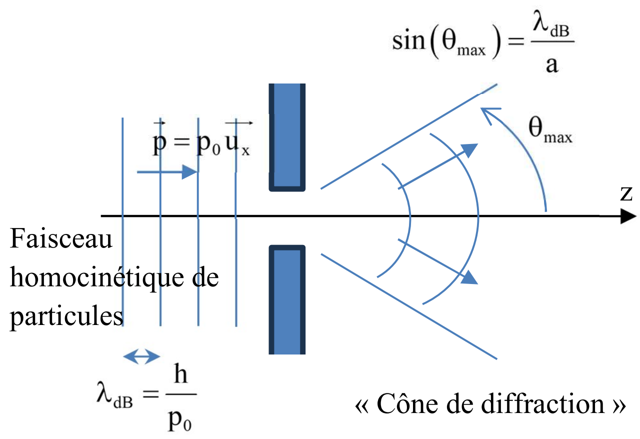
- **Cas limite de l'onde plane** :
Question : On sait d'une onde plane qu'elle est un état propre de la quantité de mouvement, donc que $\boldsymbol{\Delta p_x = 0}$, et que sa densité de probabilité de présence est uniforme sur tout l'axe (Ox) donc que $\boldsymbol{\Delta x \to \infty}$. Le produit est $\Delta x.\Delta p_x$ n'étant pas défini, peut-on dire que l'onde plane vérifie l'inégalité de Heisenberg spatiale ?
Réponse : Nous avons vu qu'une onde plane est davantage un cas limite théorique qu'un état quantique réel ; ainsi, en considérant précisément cette onde plane comme la limite du paquet d'ondes précédent lorsque $\Delta p_x \to 0$ et $\Delta x \to \infty$, nous pouvons dire qu'elle vérifie asymptotiquement, comme ce paquet d'onde, la relation $\Delta x.\Delta p_x \approx h$; en ce sens, elle est donc compatible avec l'inégalité de Heisenberg spatiale !

---

[1] En effet, chaque onde plane de la décomposition est une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger et « évolue indépendamment des autres » en se propageant à sa vitesse de phase ; autrement dit, par linéarité de l'équation de Schrödinger, la fonction d'onde reste à tout instant une superposition de toutes ces ondes planes et le spectre n'est donc pas modifié, ce qui montre d'ailleurs que la quantité de mouvement est conservée au cours du temps (normal pour une particule libre). Quant à la modification de la forme spatiale du paquet, i.e. son étalement progressif, elle liée au déphasage progressif entre ces ondes planes lors de leur propagation. Cette situation est totalement analogue à celle rencontrée en électromagnétisme.

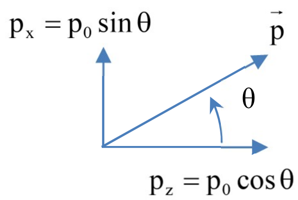
3- Illustration n°2 : Diffraction d'un faisceau de particules par une fente.

- **Situation étudiée et observations expérimentales :**
  - Un faisceau homocinétique de particules d'énergie *E* et de quantité de mouvement $p_0\vec{u}_z = \sqrt{2mE}\,\vec{u}_z$ est envoyé vers une ouverture en forme de fente centrée en un point *O*, de taille *a* dans la direction (O*x*) et très longue dans la direction (O*y*), comme indiqué sur le schéma ci-contre.



  - D'un point de vue quantique, le faisceau incident sur la fente peut être décrit par une onde plane de longueur de de Broglie : $\boxed{\lambda_{dB} = \dfrac{h}{p_0}}$ que l'on suppose < *a*.
  - On observe alors une diffraction de ce faisceau par la fente, sous forme d'un cône d'ouverture angulaire typique 2 θ_{max} avec : $\boxed{\sin(\theta_{max}) \approx \dfrac{\lambda_{dB}}{a}}$ [2].
  - Ceci signifie qu'après la fente il existe des particules dont la quantité de mouvement fait avec l'axe (O*z*) un angle $\theta \neq 0$, avec typiquement $\theta \in [-\theta_{max}\ ;\theta_{max}]$.

- **Vérification de l'inégalité de Heisenberg selon l'axe (O*x*) juste après la fente :**
  - Juste après la fente, celle-ci impose : $\boxed{\Delta x \approx \dfrac{a}{2}}$.
  - Que vaut, en ordre de grandeur, Δp_x ? En admettant que la diffraction ne modifie pas l'énergie des particules, $\|\vec{p}\| = \sqrt{2mE}$ est conservée et vaut donc p_0 . En revanche, la direction de $\vec{p}$ est modifiée avec désormais $(Oz,\vec{p}) = \theta \in [-\theta_{max}\ ;\theta_{max}]$. Une construction géométrique élémentaire (voir ci-contre) montre alors que :



$p_x = p_0 \times \sin\theta \in \left[-p_0\sin\theta_{max} ; p_0\sin\theta_{max}\right]$ donc :

$$\boxed{\Delta p_x \approx p_0 \sin\theta_{max} = \frac{p_0\lambda_{dB}}{a} = \frac{h}{a}}$$

  - Ainsi : $\boxed{\Delta x\,\Delta p_x \approx \left(\dfrac{a}{2}\right)\times\left(\dfrac{h}{a}\right) = \dfrac{h}{2} > \dfrac{\hbar}{2}}$ CQFD

[2] Cette diffraction ainsi que l'expression $\sin\theta_{max} \approx \lambda / a$ existent pour toute onde, qu'elle soit mécanique, électromagnétique ou quantique ; et dans le cas usuel où $\lambda / a < 0{,}1$ il est d'usage de linéariser le sinus et d'écrire : $\theta_{max} \approx \lambda / a$.

Commentaire : Il est remarquable que la valeur typique de l'angle de diffraction soit celle qui conduit exactement (en ordre de grandeur) à la limite inférieure imposée par l'inégalité de Heisenberg ; c'est un peu comme si c'était l'inégalité de Heisenberg qui était à l'origine de la diffraction dans le cas quantique…

B- Inégalités de Heisenberg et notion de trajectoire.

La notion de trajectoire d'une particule, à la base de la mécanique classique, est fondamentalement liée à la possibilité de définir à chaque instant un vecteur position et un vecteur vitesse pour la particule ; or, le principe de Heisenberg indique qu'il est ontologiquement impossible de préparer une particule dans un état quantique où sa position et sa quantité de mouvement le long d'un même axe cartésien sont simultanément « bien déterminées » ; il rend donc a priori cette notion caduque.

Toutefois, la physique quantique doit redonner les mêmes résultats que la physique classique lorsqu'on étudie des objets macroscopiques ; nous en déduisons que, pour une particule de taille et de masse élevée, il doit être possible de définir une trajectoire approchée, avec une excellente approximation. Et, toujours d'après le principe de Heisenberg, la condition nécessaire (et souvent suffisante) pour effectuer une telle approximation peut s'énoncer comme suit :

Soit une particule évoluant dans une situation caractérisée par des échelles spatiales typiques (L_x, L_y, L_z) et des quantités de mouvement typiques (P_x, P_y, P_z) selon un système d'axe cartésien $(Oxyz)$; il est possible d'associer à cette particule une trajectoire approchée, avec une excellente approximation, si et seulement si le long de chaque axe les indéterminations quantiques de la position de son barycentre et de sa quantité de mouvement peuvent être négligées, i.e. si elles vérifient :

$$\underline{\Delta x \ll L_x \quad \text{et} \quad \Delta p_x \ll P_x}$$

Or, d'après les inégalités de Heisenberg spatiales, on a nécessairement $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar/2$; il faut donc nécessairement que, le long de chaque axe, on ait :

$$\boxed{L_x \times P_x \gg h}$$

- L'échelle spatiale typique L_x peut être, suivant le cas, la taille de la particule, la taille d'une ouverture par laquelle on fait passer la particule, le rayon ou la longueur d'une trajectoire supposée de la particule…
- On vérifiera aisément que cette condition est vérifiée pour une particule macroscopique ou mésoscopique (un grain de poussière par exemple) mais pas pour un électron dans un atome !

II- Conséquences des inégalités de Heisenberg spatiales sur l'énergie d'une particule confinée

A- Relation générale entre énergie cinétique moyenne et confinement

- Définition
  Une particule est dite confinée (ou dans un état lié) si elle est dans un état stationnaire tel que $|\psi|^2 \to 0$ quand $|x| \to \infty$ (ou y ou z) ou dans une superposition de tels ES

- Propriété

Soit une particule confinée dans une zone de taille (L_x, L_y, L_z) au sens où $\Delta x \le L_x$, $\Delta y \le L_y$, $\Delta z \le L_z$. Alors l'énergie cinétique moyenne de la particule est nécessairement supérieurs à l'énergie de confinement : $\boxed{\langle E_c\rangle \ge E_{\text{confinement}} = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{1}{L_x^2}+\frac{1}{L_y^2}+\frac{1}{L_z^2}\right)}$

Preuve $\langle E_c\rangle = \frac{1}{2m}\left(\langle p_x^2\rangle + \langle p_y^2\rangle + \langle p_z^2\rangle\right)$

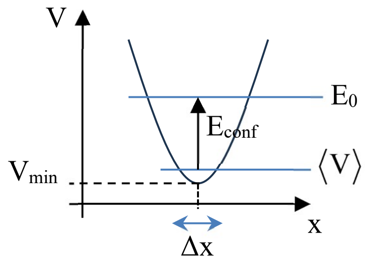
Or $\Delta p_x^2 = \langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2 \le \langle p_x^2\rangle$

D'où $\langle E_c\rangle \ge \frac{1}{2m}\left(\Delta p_x^2 + \Delta p_y^2 + \Delta p_z^2\right)$

Enfin, par l'inégalité de Heisenberg spatiale :

$$\langle E_c\rangle \ge \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}+\frac{1}{\Delta z^2}\right) = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{1}{L_x^2}+\frac{1}{L_y^2}+\frac{1}{L_z^2}\right)$$

- Analyse de ce résultat
  - En physique classique, l'état stable d'une particule piégée dans un puits et immobile au fond du puit : $E_{m,eq} = \min\left(E_p\right)$ et $E_c = 0$
  - Il n'existe aucun équivalent de cette propriété en physique quantique. L'état de plus basse énergie et l'état fondamental d'énergie E_0 qui vérifie
  $$E_0 \underset{\substack{\text{l'état fondamental}\\ \text{et un état propre}\\ \text{de l'énergie}}}{=} \langle E\rangle = \underbrace{\langle E_c\rangle}_{\ge E_{\text{onfinement}}} + \underbrace{\langle V\rangle}_{V_{\min}}$$



B- Energie fondamentale d'une particule confinée dans un puits infini 1D

Question : Utiliser les inégalités de Heisenberg pour déterminer un ordre de grandeur de l'énergie fondamentale d'une particule confinée dans un puits de potentiel infini à 1D.

Réponse : D'après les inégalités de Heisenberg :

$$\langle E_c\rangle \underset{1D}{=} \frac{\langle p_x^2\rangle}{2m} = \frac{\langle p_x\rangle^2 + \Delta p_x^2}{2m} \underset{\langle p_x\rangle = 0}{=} \frac{\Delta p_x^2}{2m} \underset{\text{Heisenberg}}{\ge} \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$$

L'état fondamental est un état propre de l'énergie associée à la valeur de E_0 vérifiant

$$E_0 = \langle E\rangle = \langle E_c\rangle + \langle V\rangle \ge \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \langle V\rangle$$

Dans le cas d'un puits infini 1D, on a : $\begin{array}{l}\langle V\rangle = 0\\ \Delta x \le a \quad \left(\text{ou même } \frac{a}{2}\right)\end{array}$

D'où $E_0 \ge \frac{\hbar^2}{8ma^2}$ ou $E_0 \ge \frac{\hbar^2}{2ma^2}$

On postule que l'état fondamental étant l'état de plus basse énergie et la seule contrainte étant

$E_0 \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2}$, on a en ordre de grandeur $E_0 \approx \frac{\hbar^2}{8ma^2}$ (ou $E_0 \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$)

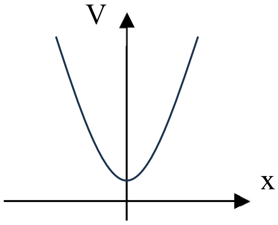
Confrontation au résultat exact : $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ OK

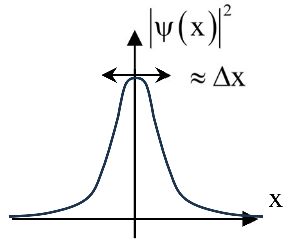
C- Energie fondamental d'une particule confinée dans un puits de potentiel harmonique 1D

Même question avec un puits $V(x) = V_0 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$

D'après l'inégalité de Heisenberg $\langle E_c \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = \frac{\langle p_x \rangle^2 + \Delta p_x^2}{2m} = \frac{\Delta p_x^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$

$$E_0 = \langle E \rangle = \langle E_c \rangle + \langle V \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \langle V \rangle$$





Difficulté : Δx est inconnu et o ne peut pas le majorer …
Idée : Si Δx augmente (resp diminue), $E_{confinement}$ diminue (resp augmente) et $\langle V \rangle$ augmente (resp diminue)

Donc on cherchera $\Delta x_{critique}$ qui minimise $\frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \langle V \rangle$; on va chercher $\Delta x_{critique}$ et postuler que

$$E_0 \approx \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \langle V \rangle$$

$$\langle V \rangle = V_0 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \langle x^2 \rangle = V_0 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \left(\langle x \rangle^2 + \Delta x^2 \right) \geq V_0 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \Delta x^2$$

On obtient donc $E_0 \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + V_0 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \Delta x^2 = f(\Delta x)$; une étude de fonction donne alors

$\Delta x_{critique} = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$, $E_0 \geq V_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

On postule que $\boxed{E_0 \approx V_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega_0}$

Confrontation au résultat exact : $E_n = V_0 + \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar\omega_0$