Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P/PS 2011-2012
C. Pinettes

Transformées de Fourier « Fonction » δ de Dirac

Ce document rappelle les définitions et résultats utilisés dans le cours de Physique Quantique concernant les transformées de Fourier et la « fonction » δ de Dirac.

1 Transformées de Fourier

1.1 Définitions

Soit $f(x)$ une fonction à variables complexes définie sur $\mathbb{R}$. On définit la transformée de Fourier de $f(x)$, $g(k)$, par la relation :

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \, f(x) \, dx$$

On montrera au § 2.4 que l'on a alors la transformation de Fourier inverse :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \, g(k) \, dk$$

En physique, x désigne une position et k un vecteur d'onde (homogène à l'inverse d'une longueur). Evidemment, nous supposons que ces intégrales existent, c'est à dire que les fonctions $f(x)$ et $g(k)$ sont « suffisamment » régulières, ce qui sera le cas en général en physique.

Remarque : Les conventions utilisées pour définir les transformées de Fourier ne sont pas universelles. On peut, par exemple, définir les transformées de Fourier par les relations :

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} g(k) dk \qquad g(k) = \int e^{-ikx} f(x) dx$$

mais on préférera la définition précédente, plus symétrique et donc plus facile à mémoriser.
D'autre part, on pourra noter que les intégrales de Fourier peuvent être vues comme limites de séries de Fourier (voir par exemple l'appendice I du *Cohen-Tannoudji*).

1.2 Les transformées de Fourier en mécanique quantique

En mécanique quantique, on s'intéresse aux fonctions d'ondes $\psi(x)$ (à une dimension), x étant la position et à leurs transformées de Fourier $\bar{\psi}(p)$, p étant la quantité de mouvement :

$$\boxed{\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar}\ \psi(x)\ dx} \tag{1}$$

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ \bar{\psi}(p)\ dp} \tag{2}$$

Pour obtenir ces relations, on a fait le changement de variable $p = \hbar k$ et pris : $\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} g(k) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} g(p/\hbar)$, convention qui permet de garder des relations symétriques.

1.3 Propriétés des TF

• **Théorème de Parseval-Plancherel**

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\ \psi(x)\ dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\varphi}^*(p)\ \bar{\psi}(p)\ dp} \tag{3}$$

et en particulier :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\ dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p)|^2\ dp$$

$\Rightarrow$ la T.F. conserve la norme.

Démonstration :

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi^*(x)\ \psi(x) \quad &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{ipx/\hbar}\ \bar{\psi}(p) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{ipx/\hbar}\ \varphi^*(x) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\psi}(p)\ \bar{\varphi}^*(p)
\end{aligned}$$

• **Relation d'incertitude**

Si $\psi(x)$ est une fonction d'onde normalisée, alors d'après Parseval-Plancherel, sa TF $\bar{\psi}(p)$ l'est aussi : $|\psi(x)|^2$ et $|\bar{\psi}(p)|^2$ décrivent alors des lois de probabilité et on peut définir les valeurs moyennes :

$$< x >= \int_{-\infty}^{+\infty} x\ |\psi(x)|^2\ dx \qquad < p >= \int_{-\infty}^{+\infty} p\ |\bar{\psi}(p)|^2\ dp$$

et les écarts-types de ces lois de probabilité :

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} \qquad \Delta p = \sqrt{< p^2 > - < p >^2}$$

On peut alors montrer (on l'admettra) que les écarts-types Δx et Δp des lois de probabilités $|\psi(x)|^2$ et $|\bar{\psi}(p)|^2$ vérifient l'inégalité suivante :

$$\boxed{\Delta x \; \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{4}$$

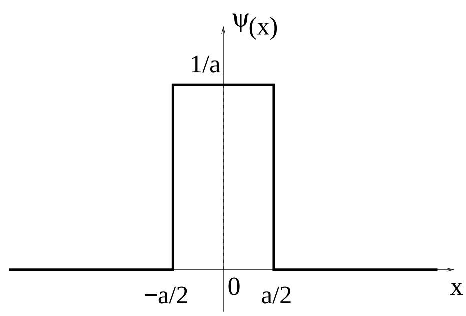
C'est *la relation d'incertitude*, bien connue en mécanique quantique. Donc, si la fonction $|\psi(x)|^2$ est piquée (Δx faible), alors sa transformée de Fourier $|\bar{\psi}(p)|^2$ est étalée (Δp grand) et vice-versa.

Remarque : On verra au § suivant que si $|\psi(x)|^2$ est une gaussienne, on a l'égalité : $\Delta x \; \Delta p = \frac{\hbar}{2}$. On peut montrer que l'on n'a l'égalité *que* pour les distributions gaussiennes.

1.4 Deux exemples : la fonction créneau et la gaussienne

• TF de la fonction créneau

Considérons la fonction créneau $\psi(x)$ représentée ci-dessous et calculons sa TF.



On a :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \; e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \; \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \; \frac{1}{a} \left[-\frac{\hbar}{ip} e^{-i\frac{px}{\hbar}} \right]_{-a/2}^{a/2}$$

Soit :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \; \frac{\sin \frac{pa}{2\hbar}}{\frac{pa}{2\hbar}}$$

On a donc :

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{a} \text{ si } -a/2 \leq x \leq a/2 \text{ et } 0 \text{ sinon} \quad \Rightarrow \quad \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \text{ sinc } \frac{pa}{2\hbar}} \tag{5}$$

• **TF d'une gaussienne**

On veut montrer que :

- la TF d'une gaussienne est une gaussienne.
- si $|\psi(x)|^2$ est une gaussienne normée, alors on a $\Delta x \; \Delta p = \frac{\hbar}{2}$.

On choisit la fonction d'onde $\psi(x)$ telle que $|\psi(x)|^2$ est une gaussienne normée :

$$\psi(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\;\sigma}} \quad \Rightarrow \quad |\psi(x)|^2 = \frac{e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi}\;\sigma}$$

$|\psi(x)|^2$ est bien une gaussienne normée d'écart-type $\Delta x = \sigma$ (cf cours de méca. stat.).
On remarquera que $\psi(x)$ est aussi une gaussienne (mais pas normée et d'écart-type $\sqrt{2}\sigma$).

La transformée de Fourier de $\psi(x)$ s'écrit alors :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \; A \; e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \; dx$$

avec $A = 1/\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma}$.
On peut calculer la TF de deux façons : en calculant directement l'intégrale de Fourier dans le plan complexe ou en se ramenant à la résolution d'une équation différentielle.

Méthode 1 : Intégration dans le plan complexe

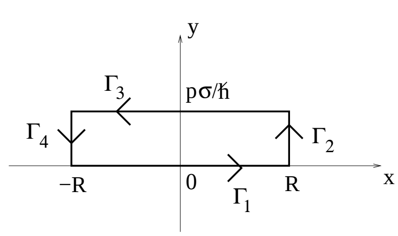
Pour calculer $\bar{\psi}(p)$, on commence par compléter le carré dans l'exponentielle :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \; e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{x}{2\sigma}+i\frac{p\sigma}{\hbar}\right)^2} \; dx$$

Puis on fait le changement de variable $u = \frac{x}{2\sigma}$:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{2A\sigma}{\sqrt{2\pi\hbar}} \; e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(u+i\frac{p\sigma}{\hbar}\right)^2} \; du$$

Considérons le contour rectangulaire Γ indiqué ci-dessous :



L'intégrale que l'on cherche à calculer est égale à :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(x+i\frac{p\sigma}{\hbar}\right)^2} \; dx = \lim_{R\to+\infty} \int_{-R}^{+R} e^{-\left(x+i\frac{p\sigma}{\hbar}\right)^2} \; dx = -\lim_{R\to+\infty} \int_{\Gamma_3} e^{-z^2} dz$$

car sur Γ_3, $z = x + ip\sigma/\hbar$, avec x variant de R à $-R$.

Or, d'après le théorème des résidus :

$$\oint_\Gamma e^{-z^2}\ dz = \int_{\Gamma_1} + \int_{\Gamma_2} + \int_{\Gamma_3} + \int_{\Gamma_4} = 0$$

Sur les côtés Γ_2 et Γ_4, on a $z = \pm R + iy$ avec $y \in [0, p\sigma/\hbar]$.
Donc :

$$|e^{-z^2}| = |e^{-(\pm R+iy)^2}| = |e^{-(R^2-y^2)}\ e^{\mp 2iRy}| = e^{-R^2} e^{y^2} \underset{R\to+\infty}{\longrightarrow} 0$$

car e^{y^2} est bornée pour $y \in [0, p\sigma/\hbar]$. Donc $\int_{\Gamma_2} \underset{R\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ et $\int_{\Gamma_4} \underset{R\to+\infty}{\longrightarrow} 0$.
On a donc :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x+i\frac{p\sigma}{\hbar})^2}\ dx = \lim_{R\to+\infty} \int_{\Gamma_1} e^{-z^2} dz = \lim_{R\to+\infty} \int_{-R}^{R} e^{-x^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = I \tag{6}$$

On peut utiliser les tables des intégrales gaussiennes pour obtenir I, mais c'est une intégrale facile à retrouver. L'astuce, c'est de calculer I^2 par les coordonnées polaires :

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\ dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}\ dy = \iint_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2-y^2}\ dx\ dy = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{+\infty} dr\ r\ e^{-r^2} = \pi$$

donc :

$$\boxed{I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}} \tag{7}$$

Finalement, on trouve :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{2A\sigma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ I\ e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2} = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2}$$

Méthode 2 : Equation différentielle

On remarquera d'abord que $\psi(x)$ vérifie l'équation différentielle : $\psi'(x) + \frac{x}{2\sigma^2}\psi(x) = 0$.
On va donc chercher une équation du même type en calculant $\bar{\psi}'(p)$:

$$\bar{\psi}'(p) = -\ \frac{i/\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} x\ e^{-ipx/\hbar}\ A\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ dx$$

que l'on peut calculer par intégration par parties :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x\ e^{-ipx/\hbar}\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ dx \qquad &= -2\ \sigma^2 \Big[\ e^{-ipx/\hbar}\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \Big]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{2\ i\ p\ \sigma^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar}\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ dx \\ &= -\ \frac{2\ i\ p\ \sigma^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar}\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ dx \end{aligned}$$

On obtient donc :

$$\bar{\psi}'(p) = -\ \frac{2\ p\ \sigma^2}{\hbar^2}\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty}\ e^{-ipx/\hbar}\ \ A\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ dx = -\ \frac{2\ p\ \sigma^2}{\hbar^2}\ \bar{\psi}(p)$$

$\bar{\psi}(p)$ vérifie donc l'équation différentielle suivante :

$$\bar{\psi}'(p) = -\ \frac{2\ p\ \sigma^2}{\hbar^2}\ \bar{\psi}(p)$$

Equation différentielle que l'on résout sans difficulté : $\bar{\psi}(p) = \bar{\psi}(0)\ e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2}$.

Reste à calculer $\bar{\psi}(0)$. Un changement de variable évident donne :

$$\bar{\psi}(0) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ \int_{-\infty}^{+\infty}\ e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ dx = \ \frac{2A\sigma}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty}\ e^{-u^2}\ du = \frac{2A\sigma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ I$$

Or, d'après (7) : $I = \sqrt{\pi}$, donc :

$$\bar{\psi}(0) = \left(\ \frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\ \right)^{1/4} \quad \Rightarrow \quad \bar{\psi}(p) = \left(\ \frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\ \right)^{1/4}\ e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2}$$

<u>Conclusion</u> :

$$\boxed{\psi(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\ \sigma}} \quad \Rightarrow \quad \bar{\psi}(p) = \left(\ \frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\ \right)^{1/4}\ e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2}} \tag{8}$$

⋆ $\bar{\psi}(p)$ est bien une gaussienne : la TF d'une gaussienne est donc une gaussienne.
⋆ On peut vérifier sans difficulté que $|\bar{\psi}(p)|^2$ est bien normée (Parseval-Plancherel).
⋆ Et on vérifie bien la relation d'incertitude (4) puisque $|\psi(x)|^2$ est une gaussienne d'écart-type $\Delta x = \sigma$ et $|\bar{\psi}(p)|^2$ une gaussienne d'écart-type $\Delta p = \hbar/(2\sigma)$
$\Rightarrow$ $\Delta x \Delta p = \hbar/2$.
$\Rightarrow$ si le pic de $|\psi(x)|^2$ est étroit, le pic de $|\bar{\psi}(p)|^2$ est large et vice-versa.

Attention :
$\psi(x)$ est une gaussienne d'écart-type $\Delta x = \sqrt{2}\sigma$ et $\bar{\psi}(p)$ une gaussienne d'écart-type $\Delta p = \hbar/(\sqrt{2}\sigma) \Rightarrow \Delta x \Delta p = \hbar \neq \hbar/2$. Cela vient de ce que $\psi(x)$ et $\bar{\psi}(p)$ ne sont pas des lois de probabilités car $\int \psi(x) dx \neq 1$ et $\int \bar{\psi}(p) dp \neq 1$.

On peut aussi calculer de la même façon la TF d'une gaussienne normée et on obtient sans difficulté :

$$\boxed{\psi(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi}\ \sigma} \quad \Rightarrow \quad \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ e^{-\frac{p^2\sigma^2}{2\hbar^2}}} \tag{9}$$

1.5 Généralisation à 3 dimensions

Les définitions des TF se généralisent sans difficulté à 3d :

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{p}.\vec{r}/\hbar}\ \bar{\psi}(\vec{p})\ d^3p} \tag{10}$$

$$\boxed{\bar{\psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\vec{p}.\vec{r}/\hbar}\ \psi(\vec{r})\ d^3r} \tag{11}$$

Parseval-Plancherel :

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^3} \varphi^*(\vec{r})\ \psi(\vec{r})\ d^3r = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\varphi}^*(\vec{p})\ \bar{\psi}(\vec{p})\ d^3p} \tag{12}$$

Relations d'incertitude :

$$\boxed{\Delta x\ \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}} \quad \boxed{\Delta y\ \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}} \quad \boxed{\Delta z\ \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{13}$$

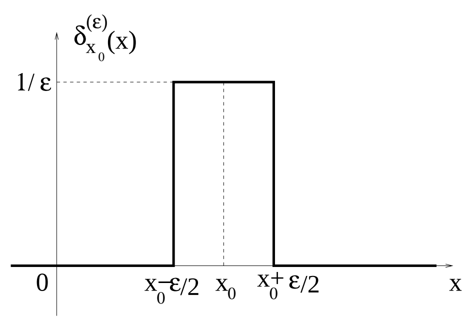
Les valeurs moyennes étant données par :

$$< x >= \int_{\mathbb{R}^3} x\ |\psi(\vec{r})|^2\ d^3r \qquad < p_x >= \int_{\mathbb{R}^3} p_x\ |\bar{\psi}(\vec{p})|^2\ d^3p$$

2 « Fonction » δ de Dirac

2.1 Définition

Considérons la fonction créneau $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ représentée ci-dessous, avec $\epsilon > 0$:



Calculons l'intégrale suivante, $\psi(x)$ étant une fonction d'onde quelconque (càd en pratique une fonction complexe sur $\mathbb{R}$ de carré sommable) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\ \psi(x)\ dx = \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0-\epsilon/2}^{x_0+\epsilon/2} \psi(x)\ dx$$

Dans la limite $\epsilon \to 0$, on peut développer $\psi(x)$ au voisinage de x_0 dans l'intervalle $[x_0 - \epsilon/2, x_0 + \epsilon/2]$:

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon\to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\ \psi(x)\ dx \qquad &= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{x_0-\epsilon/2}^{x_0+\epsilon/2} [\psi(x_0) + (x-x_0)\psi'(x_0) + ...]\ dx \\
&= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\epsilon} [\epsilon\psi(x_0) + O(\epsilon^2)] = \lim_{\epsilon\to 0}\ [\psi(x_0) + O(\epsilon)] = \psi(x_0)
\end{aligned}$$

On a donc :

$$\lim_{\epsilon\to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)\ \psi(x)\ dx = \psi(x_0) \tag{14}$$

Bien que $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ diverge en $x = x_0$ lorsque $\epsilon \to 0$, l'intégrale (14) est bien définie.

On définit alors la « fonction » $\delta(x - x_0)$ par la relation :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x_0)\ \psi(x)\ dx = \psi(x_0)} \tag{15}$$

valable pour toute fonction $\psi(x)$ définie en x_0.

Cette relation est une écriture symbolique et doit être vue comme résultant de la limite de l'équation (14). On dira que la fonction $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ « tend » vers $\delta(x - x_0)$ lorsque $\epsilon \to 0$, dans le sens que les intégrales (14) et (15) tendent vers la même valeur $\psi(x_0)$.
On verra plus loin que la relation (15) est très commode, car elle permet de faire des calculs d'intégrales sans avoir à expliciter les limites.

En particulier, l'équation (15) donne pour la fonction $\psi(x) = 1$ partout :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x_0)\ dx = 1} \tag{16}$$

et pour $x_0 = 0$:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\ \psi(x)\ dx = \psi(0)} \qquad \boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\ dx = 1} \tag{17}$$

Remarque :
On remarquera que si $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ est bien une fonction, sa limite lorsque $\epsilon \to 0$ n'est pas une fonction (elle diverge !) : $\delta(x - x_0)$ n'est donc pas elle-même une fonction mais une *distribution* et l'écriture de l'équation (15) n'est pas rigoureuse du point de vue des mathématiques.
En fait, que $\delta(x - x_0)$ ne soit pas une fonction n'est pas essentiel du point de vue de la physique : la seule chose qui compte, c'est qu'elle permette de simplifier les calculs d'intégrales.
C'est pourquoi en physique, on manipulera $\delta(x - x_0)$ comme une fonction (d'où son nom, « fonction » δ). On considérera que $\delta(x-x_0)$ est la fonction créneau $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ (ou une autre fonction $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ « tendant » vers δ) où ϵ est aussi petit que l'on veut mais non nul. Cette approche, bien que non rigoureuse mathématiquement, est suffisante en physique et, on le verra, très commode.

Remarque :
$\delta(x - x_0)$ est une généralisation du symbole de Kronecker $\delta_{n,n'}$.
En particulier, les relations :

$$\sum_{n'} \delta_{n,n'} \ \psi_{n'} = \psi_n \qquad\qquad \sum_{n'} \delta_{n,n'} = 1$$

sont analogues aux équations (15) et (16).

2.2 Fonctions « tendant » vers δ

On peut définir plusieurs fonctions $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ « tendant » vers $\delta(x-x_0)$. Il suffit de choisir une fonction $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ piquée autour de x_0 et d'aire égale à 1, avec un pic, de largeur d'ordre ϵ et de hauteur d'ordre ϵ^{-1}. On a vu au paragraphe précédent que l'on peut prendre une fonction créneau, mais on peut aussi prendre par exemple la gaussienne suivante :

$$\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \epsilon} \ e^{-(x-x_0)^2/(2\epsilon^2)} \tag{18}$$

dont l'aire vaut bien 1 et avec un pic en $x = x_0$ de hauteur $1/(\sqrt{2\pi}\ \epsilon)$ et de largeur 2ϵ (cf cours de méca. stat.).
On a alors :

$$\begin{aligned}
\lim_{\epsilon\to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x) \ \psi(x) \ dx \qquad &= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \epsilon} \ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-x_0)^2/(2\epsilon^2)} \ \psi(x) \ dx \\
&= \lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \ \psi(x_0 + \sqrt{2}\epsilon u) \ du \\
&= \psi(x_0) \ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} du \ e^{-u^2} \\
&= \psi(x_0)
\end{aligned}$$

d'après (7). Lorsque $\epsilon \to 0$, $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ « tend » bien vers $\delta(x - x_0)$.

Il existe d'autres fonctions $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ « tendant » vers $\delta(x - x_0)$ (voir par exemple l'appendice II du *Cohen-Tannoudji*).

2.3 Propriétés de δ

- $\boxed{\delta(x) = \delta(-x)}$

Démonstration :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(-x) \ \psi(x) \ dx = -\int_{+\infty}^{-\infty} \delta(x) \ \psi(-x) \ dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \ \psi(-x) \ dx = \psi(0), \quad \forall\psi$$

- $\boxed{\delta(x) = \delta^*(x)}$

Démonstration :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^*(x)\ \psi(x)\ dx = \Big[\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\ \psi^*(x)\ dx \Big]^* = [\psi^*(0)]^* = \psi(0), \quad \forall \psi$$

- $$\boxed{\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ dp = \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar}\ dp} \tag{19}$$

Calculons l'intégrale suivante en remarquant qu'elle est égale à la limite d'une autre intégrale :

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ dp = \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ e^{-p^2\epsilon^2/(2\hbar^2)}\ dp$$

En complétant le carré dans l'exponentielle, on a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ dp \qquad &= \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{e^{-x^2/(2\epsilon^2)}}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{p\epsilon}{\sqrt{2}\hbar} - i\frac{x}{\sqrt{2}\epsilon}\right)^2}\ dp \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{\sqrt{2}\hbar/\epsilon}{2\pi\hbar}\ e^{-x^2/(2\epsilon^2)}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(u - i\frac{x}{\sqrt{2}\epsilon}\right)^2}\ du \end{aligned}$$

En prenant un contour semblable à celui de l'intégrale (6), on obtient :

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ dp = \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{1}{\sqrt{2}\pi\epsilon}\ e^{-x^2/(2\epsilon^2)}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2}\ du = \lim_{\epsilon\to 0}\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ \epsilon}\ e^{-x^2/(2\epsilon^2)}$$

d'après (7), soit :

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ dp = \lim_{\epsilon\to 0}\ \delta_0^{(\epsilon)}(x) = \delta(x)$$

avec la fonction gaussienne $\delta_0^{(\epsilon)}(x)$ (18). On obtient bien la relation (19).

Plus généralement, on a donc :

$$\boxed{\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x_0)/\hbar}\ dp = \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip(x-x_0)/\hbar}\ dp} \tag{20}$$

Attention, cette écriture n'est pas rigoureuse mathématiquement (l'intégrale diverge !). Cette relation doit être utilisée à l'intérieur d'une intégrale sur x, comme par exemple :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi(x)\ \delta(x - x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \psi(x)\ \frac{1}{2\pi\hbar}\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x_0)/\hbar}\ dp$$

On verra que la relation (20), comme la relation (15), sont très commodes pour les calculs d'intégrales (cf. § 2.4) .

Remarque :
On aurait pu utiliser directement les TF des fonctions créneau ou gaussienne du § 1.4 pour obtenir la relation (19). Par exemple, en prenant la fonction créneau $\delta_{x_0}^{(\epsilon)}(x)$ du § 2.1 et en utilisant (5), on a :

$$\delta_0^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\delta}_0^{(\epsilon)}(p)\ e^{i\frac{px}{\hbar}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{i\frac{px}{\hbar}}\ \text{sinc}\ \frac{p\epsilon}{2\hbar}$$

Et on obtient directement la relation (19) :

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to 0}\ \delta_0^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{i\frac{px}{\hbar}}\ \lim_{\epsilon\to 0} \left(\text{sinc}\ \frac{p\epsilon}{2\hbar}\right) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar}\ dp$$

Remarque :
Il y a d'autres propriétés de la « fontion » δ que nous n'avons pas abordées ici (voir par exemple appendice II du *Cohen-Tannoudji*).

2.4 Transformée de Fourier inverse

La transformation de Fourier inverse (éq. (2)) se démontre simplement à l'aide de la « fonction » δ. En remplaçant $\bar{\psi}(p)$ par sa définition (1) :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{ipx/\hbar}\ \bar{\psi}(p) \quad &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{ipx/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ e^{-ipx'/\hbar}\ \psi(x') \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi(x')\ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{ip(x-x')/\hbar}
\end{aligned}$$

En utilisant (20) puis (15) :

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{ipx/\hbar}\ \bar{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx'\ \psi(x')\ \delta(x-x') = \psi(x)$$

On retrouve bien la transformation de Fourier inverse (2).

2.5 Transformée de Fourier de δ

La transformée de Fourier $\bar{\delta}_{x_0}(p)$ de la « fonction » $\delta(x-x_0)$ vaut, d'après la définition (1) :

$$\bar{\delta}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{-ipx/\hbar}\ \delta(x-x_0)$$

Donc d'après (15) :

$$\boxed{\bar{\delta}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\ e^{-ipx_0/\hbar}}$$

Et en particulier :

$$\boxed{\bar{\delta}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}}$$

2.6 Généralisation à 3 dimensions

On peut généraliser sans difficulté la « fonction » δ à 3d en coordonnées cartésiennes, en posant :

$$\boxed{\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \delta(x-x_0)\ \delta(y-y_0)\ \delta(z-z_0)}$$

On a alors :

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^3} \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\ \psi(\vec{r})\ d^3r = \psi(\vec{r}_0)} \tag{21}$$

$$\boxed{\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\vec{p}.(\vec{r}-\vec{r}_0)/\hbar}\ d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\vec{p}.(\vec{r}-\vec{r}_0)/\hbar}\ d^3p} \tag{22}$$

$$\boxed{\bar{\delta}_{\vec{r}_0}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\ e^{-i\vec{p}.\vec{r}_0/\hbar}} \tag{23}$$

2.7 La « fonction » δ en mécanique quantique

Pour une base discrète $\{|u_n\rangle\}$, la relation d'orthonormalisation s'écrit :

$$\langle u_n | u_n' \rangle = \delta_{n,n'}$$

Tout ket $|\psi\rangle$ se développe alors dans cette base selon :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n\ |u_n\rangle$$

avec $c_n = \langle u_n|\ \psi\rangle$ = composante du ket $|\psi\rangle$ sur le ket de base $|u_n\rangle$.

Pour une base continue $\{|\vec{r}\rangle\}$, on écrira la relation d'orthonormalisation :

$$\langle \vec{r}\ | \vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

Tout ket $|\psi\rangle$ se développe alors dans la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ suivant :

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\ \psi(\vec{r})\ |\vec{r}\rangle$$

avec $\psi(\vec{r})$ = composante du ket $|\psi\rangle$ sur le ket de base $|\vec{r}\rangle$: la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ est donc la *représentation* $\{|\vec{r}\rangle\}$ du ket $|\psi\rangle$.

On a alors :

$$\langle \vec{r}\ |\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r'\ \psi(\vec{r}\,')\langle \vec{r}\ |\vec{r}\,'\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r'\ \psi(\vec{r}\,')\ \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = \psi(\vec{r})$$

analogue à la relation $\langle u_n|\ \psi\rangle = c_n$.

Par ailleurs, soit un autre ket $|\varphi\rangle$:

$$|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \ \varphi(\vec{r}) \ |\vec{r}\rangle$$

Le produit scalaire entre les deux kets s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \ \varphi^*(\vec{r}) \ \psi(\vec{r}\,') \ \langle\vec{r}\,|\vec{r}\,'\rangle \qquad &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \int_{\mathbb{R}^3} d^3r' \ \varphi^*(\vec{r}) \ \psi(\vec{r}\,') \ \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \ \varphi^*(\vec{r}) \ \psi(\vec{r})\end{aligned}$$

On retrouve bien le produit scalaire de la mécanique quantique ondulatoire.

Ainsi, la « fonction » δ permet de définir un produit scalaire en mécanique quantique.