Cours de Mécanique Quantique & Nano-Technologie

Résumé appliqué sur la Transformée de Fourier

Depuis la dernière réforme des Prépas, la Transformée de Fourier ne fait plus partie du programme des classes préparatoires. Or, il s'agit d'un outil mathématique puissant et indispensable pour comprendre et décrire des systèmes et outils qui se fondent sur des phénomènes ondulatoires (émetteurs/récepteurs radio, images JPEG, etc.).

L'objectif de ce document est de donner les résultats clés sur les Transformées de Fourier nécessaires à la compréhension du cours de Mécanique Quantique & Nano-Technologie. Les détails et le cadre théorique seront abordés plus tard dans le cadre du cours de Mathématiques (polycopié disponible d'ors et déjà sur Moodle).

Intérêt et principe de la Transformée de Fourier

Considérons une fonction périodique très simple : $f(t) = A\cos(\omega_0 t+\varphi)$ (avec $A \in \mathbb{R}$, $\omega_0 \in \mathbb{R}$ et $\varphi \in \mathbb{R}$). Dans l'espace du temps, cette fonction est représentée comme une courbe continue et donc possédant une infinité de valeurs qui dépendent de t. Or dans l'espace des amplitudes, des pulsations et des phases, cette même fonction est représentée uniquement par un point de coordonnées (A, ω_0, φ). Le nombre d'informations concernant cette fonction est fortement réduit. Ce principe est utilisé pour la compression de données.

La dérivée de la fonction $f(t)$ vaut : $f'(t) = -A\omega_0 \sin(\omega_0 t + \varphi) = A\omega_0 \cos(\omega_0 t + \varphi + \pi/2)$. Donc, dans l'espace des amplitudes, des pulsations et des phases, la dérivée temporelle revient à effectuer la transformation : $(A, \omega_0, \varphi) \to (A\omega_0, \omega_0, \varphi + \pi/2)$. La conséquence est qu'il est alors possible de résoudre des équations différentielles de manière algébrique en se plaçant dans un espace réciproque.

D'après ce qui précède, nous pouvons alors définir la fonction suivante associée à la fonction $f(t)$:

$$\begin{array}{rrll} \hat{f}: & \mathbb{R} \to & \mathbb{C} & \\ & \omega \to & Ae^{i\varphi} & si \;\; \omega = \omega_0 \\ & & 0 & si \;\; \omega \neq \omega_0 \end{array}$$

et par conséquent nous avons : $\hat{f'}\,(\omega) = i\omega \hat{f}(\omega)$.

Le principe de la Transformée de Fourier est d'exprimer une fonction dans son espace réciproque. Dans l'exemple cité, nous sommes passés de l'espace du temps à l'espace des pulsations (ou bien des fréquences). Notez que la transformée inverse est possible ($f(t) \leftrightarrow \hat{f}(\omega)$). La Transformée de Fourier n'est pas réservée aux fonctions temporelles ; il est possible de passer de l'espace des positions ($\vec{x}$) à l'espace des vecteurs d'onde ($\vec{k}$).

Définition de la Transformée de Fourier

Dans le cadre de ce document, la Transformée de Fourier sera appliquée uniquement aux fonctions $f \in \mathrm{L}^2$ car nous appliquons cette transformée sur des fonctions d'onde. Notez que ces fonctions ne sont en général pas périodiques.

La Transformée de Fourier est définie comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}: \quad L^2 &\to L^2 \\ f &\to \hat{f} \end{aligned}$$

avec

$$\hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt$$

La Transformée de Fourier inverse (qui est également une Transformée de Fourier) s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1}: \quad L^2 &\to L^2 \\ \hat{f} &\to f \end{aligned}$$

avec

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(\omega)e^{i\omega t}d\omega$$

Notez bien le changement de signe dans l'exponentielle. Le facteur 2π provient du fait que nous exprimons les Tranformées de Fourier en pulsation et non en fréquence. Vous pouvez également trouver dans la littérature un facteur $1/\sqrt{2\pi}$ devant les intégrales des Transformées. Ces coefficients ne changent en rien l'utilisation des Transformées de Fourier ; il suffit d'être cohérent dans les calculs.

Propriétés de la Transformée de Fourier

Nous allons donner les propriétés importantes de la Transformée de Fourier pour le cours de mécanique quantique.

Linéarité

Au vu de la définition, la Transformée de Fourier est évidemment linéaire. Soient $\alpha,\ \beta \in \mathbb{C}$ et $f,\ g \in L^2$, alors :

$$\mathcal{F}[\alpha f + \beta g] = \alpha\mathcal{F}[f] + \beta\mathcal{F}[g]$$

Cette propriété est fondamentale. Elle implique que la propriété de superposition des fonctions d'onde dans un espace est également valable dans son espace réciproque.

Décalage

Soient $a \in \mathbb{R}$ et $f \in L^2$, alors :

$$\mathcal{F}[f(t-a)](\omega) = e^{-i\omega a}\mathcal{F}[f(t)](\omega)$$

Démonstration en utilisant le changement de variable $u = t - a$:

$$\mathcal{F}[f(t-a)](\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-a)e^{-i\omega t}dt = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{-i\omega(u+a)}du = e^{-i\omega a}\mathcal{F}[f(t)](\omega)$$

La conséquence est qu'un changement d'origine implique un changement de phase locale dans l'espace réciproque. Le module reste inchangé. Par conséquent, la densité de probabilité d'un système quantique n'est pas affectée par un changement d'origine.

Changement d'échelle

Soient $a \in \mathbb{R}^*$ et $f \in L^2$, alors :

$$\mathcal{F}[f(at)](\omega) = \frac{1}{|a|}\mathcal{F}[f(t)]\left(\frac{\omega}{a}\right)$$

Démonstration en utilisant le changement de variable $u = at$:

$$\mathcal{F}[f(at)](\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(at)e^{-i\omega t}dt = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)e^{-i\frac{\omega}{a}u}\frac{du}{|a|} = \frac{1}{|a|}\mathcal{F}[f(t)]\left(\frac{\omega}{a}\right)$$

Ce résultat montre comment la Transformée de Fourier se transforme suite à un changement d'échelle ou d'unité. Quand une dilatation a lieu dans un espace, il y a contraction dans l'espace réciproque. Le principe d'incertitude de Heisenberg repose mathématiquement sur cette propriété.

Transformée de Fourier d'une dérivée

Nous allons déterminer quel est le lien entre la Transformée de Fourier d'une fonction et celle de sa dérivée. Soit $f \in L^2$. Nous avons :

$$\mathcal{F}\left[\frac{\partial f}{\partial t}(t)\right](\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial t}e^{-i\omega t}dt = \left[f(t)e^{-i\omega t}\right]_{-\infty}^{+\infty} + i\omega\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt = i\omega\mathcal{F}[f(t)](\omega)$$

où nous avons utilisé une intégration par parties et le fait que $f \in L^2$ qui implique que $f(\pm\infty) = 0$.

L'opérateur dérivée correspond dans l'espace réciproque à une multiplication par $i\omega$. Par conséquent, une intégration revient à diviser par ce même facteur. Comme nous l'avons déjà mentionné, le passage dans l'espace réciproque permet d'algébriser les équations différentielles.

Exemples

Voici quelques exemples de Transformée de Fourier de fonctions qui seront utilisées dans le cadre du cours de mécanique quantique.

Distribution de Dirac

La distribution de Dirac est définie comme suit :

$$\begin{array}{rlll} \delta_{x_0}: & \mathbb{R} \rightarrow & \mathbb{R} & \\ & x \rightarrow & +\infty & si \quad x = x_0 \\ & & 0 & si \quad x \neq x_0 \end{array}$$

La distribution de Dirac possède la propriété suivante :

$$f(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx$$

où nous avons utilisé la convention $\delta(.) = \delta_0(.)$.

La Transformée de Fourier de la distribution de Dirac vaut :

$$\mathcal{F}[\delta_{x_0}](k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}(x) e^{-ikx} dx = e^{-ikx_0} = e^{-ikx_0} \mathcal{F}[\delta](k)$$

La dernière égalité est obtenue suite à un décalage de x_0. Par convention, nous notons k la grandeur réciproque de x (correspondance position/vecteur d'onde).

Remarque : la distribution de Dirac est infiniment étroite et sa Transformée de Fourier est infiniment large (constante en module). La conséquence est que la Transformée de Fourier d'une fonction constante est une distribution de Dirac :

$$\mathcal{F}[A](k) = \int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-ikx} dx = A\delta(k)$$

Onde plane

Les ondes planes progressives sont définies par une pulsation (ω_0) et un vecteur d'onde ($\vec{k}_0$) :

$$OPP_{\omega_0, \vec{k}_0}(t, \vec{x}) = A e^{-i(\omega_0 t - \vec{k}_0 \cdot \vec{x})}$$

Remarquons que l'expression des ondes planes progressives est une multiplication d'exponentielles de quatre espaces disjoints :

$$OPP_{\omega_0, \vec{k}_0}(t, \vec{x}) = A e^{-i\omega_0 t} e^{ik_{0x}x} e^{ik_{0y}y} e^{ik_{0z}z}$$

Donc nous pouvons effectuer une Transformée de Fourier pour chacune des quatre dimensions de manière indépendante :

$$\mathcal{F}[OPP_{\omega_0, \vec{k}_0}](\omega, \vec{k}) = \int\int\int\int_{-\infty}^{+\infty} A e^{-i((\omega_0 + \omega)t - (\vec{k}_0 - \vec{k}) \cdot \vec{x})} dt d\vec{x} = A\delta_{-\omega_0}(\omega) \delta_{\vec{k}_0}(\vec{k})$$

Donc la Transformée de Fourier d'une onde plane progressive est une distribution de Dirac dans l'espace $(\omega, \vec{k})$. Même remarque que précédemment : le module d'une onde plane est constant dans l'espace-temps, donc sa Transformée de Fourier est infiniment étroite dans l'espace réciproque.

Distribution Gaussienne

La distribution Gaussienne est définie par une valeur moyenne que nous noterons x_0 et une largeur notée σ_x. La distribution Gaussienne normalisée s'écrit :

$$\mathcal{G}_{x_0,\sigma_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}}$$

avec $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{G}_{x_0,\sigma_x}(x)dx = 1$. En anticipant sur le résultat final et pour plus de généralité, cette distribution va être légèrement modifiée afin de rajouter une phase locale non nulle caractérisée par un vecteur d'onde k_0 :

$$\mathcal{G}_{x_0,\sigma_x,k_0}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}} e^{ik_0x}$$

Effectuons le calcul de la Transformée de Fourier de cette distribution :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}_{x_0,\sigma_x,k_0}](k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}} e^{i(k_0-k)x} dx$$

Le changement de variable $u = (x - x_0)/\sigma_x$ donne :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}_{x_0,\sigma_x,k_0}](k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{u^2}{2} - i(k-k_0)(\sigma_x u + x_0)} du$$

En remarquant que :

$$[u + i\sigma_x(k - k_0)]^2 = u^2 + 2i\sigma_x(k - k_0)u - \sigma_x^2(k - k_0)^2$$

il vient que :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}_{x_0,\sigma_x,k_0}](k) = \frac{e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-\frac{\sigma_x^2}{2}(k-k_0)^2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{[u-i\sigma_x(k-k_0)]^2}{2}} du$$

Dans le cours de Mathématiques, vous apprendrez comment calculer des intégrales dans $\mathbb{C}$. L'intégrale ci-dessus ne pose alors pas de problème et vaut $\sqrt{2\pi}$. Ainsi nous obtenons la formule de la Transformée de Fourier d'une distribution Gaussienne quelconque :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}_{x_0,\sigma_x,k_0}](k) = e^{-i(k-k_0)x_0} e^{-\frac{\sigma_x^2}{2}(k-k_0)^2}$$

De ce résultat, nous obtenons que la Transformée de Fourier d'une distribution Gaussienne est également une distribution Gaussienne caractérisée par une valeur moyenne k_0 (provenant de la phase locale initiale e^{ik_0x}) et une largeur $\sigma_k = 1/\sigma_x$. Cette dernière caractéristique est importante. Plus le système est localisé dans l'espace (σ_x petit) plus la distribution des vecteurs d'onde est large ($\sigma_k = 1/\sigma_x$ grand). Nous obtenons même que :

$$\sigma_x\sigma_k = 1$$

Dans le cours de mécanique quantique, nous verrons que ce résultat est intimement lié au principe d'incertitude de Heisenberg.

Applications en physique de la Transformée de Fourier

Comme mentionné en introduction, la Transformée de Fourier est utilisée dans beaucoup de domaines de la physique et de l'ingénierie. En voici quelques exemples typiques.

Signaux électriques et filtres

Tout signal électrique mesuré comprend une partie d'intérêt, du bruit et éventuellement un partie "porteuse" pour les ondes radio. La partie intéressante du signal doit bien souvent être extraite du signal brut ; c'est-à-dire qu'il faut réduire fortement le niveau de bruit ainsi que la partie porteuse. Pour ce faire, des filtres (passe-bas, passe-bande, passe-haut, etc.) sont utilisés. Afin de caractériser l'efficacité de ces filtres, vous avez appris en classes préparatoires à calculer des diagrammes de Bode et notamment la courbe de gain notée $H(\omega)$. Comme M. Jourdain, vous avez déjà utilisé les Transformées de Fourier sans le savoir !

Considérons un signal AM bruité. Pour des raisons de simplicité, nous considérons que l'émission de radio correspond à une note bien précise de fréquence $\nu_s = \omega_s/(2\pi)$. La porteuse du signal radio possède une fréquence précise ($\nu_p = \omega_p/(2\pi)$) telle que $\nu_p \gg \nu_s$. Quant à lui, le bruit est décrit par une fonction temporelle quelconque notée $b(t)$. Le signal radio brut mesuré s'écrit sous la forme :

$$s(t) = E\left[1 + A\cos(\omega_s t)\right]\cos(\omega_p t + \varphi) + b(t)$$

Nous considérons que $A < 1$. Se rappelant que $\cos a \cos b = \left[\cos(a+b) + \cos(a-b)\right]/2$, la Transformée de Fourier de ce signal vaut :

$$\hat{s}(\omega) = \frac{E}{2}\left[\delta_{\omega_p}(\omega) + \delta_{-\omega_p}(\omega) + A\left\{\delta_{\omega_p-\omega_s}(\omega) + \delta_{-\omega_p+\omega_s}(\omega) + \delta_{\omega_p+\omega_s}(\omega) + \delta_{-\omega_p-\omega_s}(\omega)\right\}\right] + \hat{b}(\omega)$$

Pour obtenir ce résultat, nous avons utilisé l'expression sous forme de somme d'exponentielles de cosinus et les résultats obtenus lors de calculs de la Transformée de Fourier de la Distribution de Dirac. Par la suite, nous n'allons pas nous intéresser aux pulsations négatives.

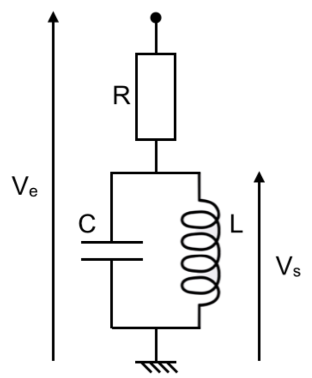

Figure 1 – Circuit RLC dit de "bouchon".

Dans l'espace des pulsations, le signal possède la forme d'un fond dû au bruit et de trois pics correspondant aux trois pulsations ($\omega_p - \omega_s$, ω_p et $\omega_p + \omega_s$). Afin d'extraire le son de l'émission, il faut arriver à isoler le pic correspondant par exemple à la pulsation $\omega_p + \omega_s$. Ceci est fait à l'aide de filtres utilisant des résistances, des inductances et de condensateurs tel que celui présenté ci-contre.

Pour rappel, dans le cadre du calcul des diagrammes de Bode d'un circuit RLC, l'impédance d'une inductance vaut $iL\omega$ et celle d'un condensateur $1/(iC\omega)$. Au passage, ces valeurs s'expliquent par le fait que la tension aux bornes d'une inductance est proportionnelle à la dérivée du courant d'où le facteur $i\omega$ et celle aux bornes d'un condensateur à l'intégrale du courant d'où le facteur $1/(i\omega)$ (cf. précédemment).

Le module carré de la fonction de transfert de ce filtre vaut :

$$|H(\omega)|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{Q^2}\left(\frac{\omega_0}{\omega} - \frac{\omega}{\omega_0}\right)^2} \leq 1$$

avec la pulsation propre $\omega_0^2 = 1/(LC)$ et le facteur de qualité $Q^2 = L\omega_0/R$. Ce circuit correspond à un filtre passe-bande. En choisissant les valeurs de l'inductance et du condensateur, nous pouvons faire en sorte que la pulsation de résonance ω_0, pour laquelle $|H(\omega)|^2 = 1$, soit égale à $\omega_p + \omega_s$. L'amplitude des signaux de pulsation autre que ω_0 est alors réduite. Le signal mesuré est nettoyé afin d'extraire la composante voulue.

Dans l'espace des pulsations, le signal filtré ($f(t)$) vaut :

$$\hat{f}(\omega) = H(\omega)\hat{s}(\omega)$$

Il suffirait d'effectuer la Transformée de Fourier inverse pour obtenir l'expression de $f(t)$.

En classes préparatoires, le diagramme de Bode n'a été expliqué et appliqué en général que sur des signaux harmoniques pur, c'est-à-dire des signaux possédant une pulsation bien définie ($\hat{f}(\omega) = \delta_{\omega_0}(\omega)$). Or les ondes peuvent se superposer ce qui se traduit par la linéarité de la Transformée de Fourier. N'importe quel signal peut être considéré comme un paquet d'ondes.