Position et vitesse d'une particule quantique

L'équation de Schrödinger générale

Chapitre 2

Joseph Fourier
1768-1830

William R. Hamilton
1805-1865

La particule libre en mécanique quantique

En mécanique quantique, l'état d'une particule ponctuelle est décrit par une fonction d'onde $\psi(x,t)$ (on se limitera ici au cas à une dimension)

Description probabiliste :

Une mesure de position donnera le résultat x à $\mathrm{d}x$ près avec la probabilité

$$\mathrm{d}P = |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x$$

densité de probabilité : $\mathcal{P}(x,t) = |\psi(x,t)|^2$

Evolution dans le temps :

Si la particule est libre, c'est-à-dire n'est soumise à aucune force, ni aucune mesure, l'évolution de $\psi(x,t)$ est donnée par

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

Questions centrales du cours d'aujourd'hui

Que trouve-t-on quand on mesure la vitesse ou l'impulsion d'une particule ?

Il s'agit également d'un résultat probabiliste, avec une densité de probabilité reliée à la transformée de Fourier de $\psi(x,t)$

Notion d'opérateur position et d'opérateur impulsion

Equation de Schrödinger en présence d'un potentiel $V(x)$

Peut-on connaître à la fois la position et l'impulsion d'une particule ?

Les relations d'incertitude de Heisenberg.

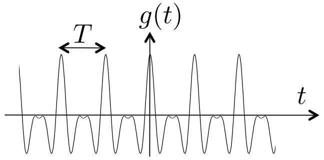
1.

La transformation de Fourier

propagation de la chaleur

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

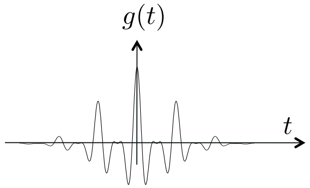
Des séries de Fourier à la transformation de Fourier



Fonction périodique $g(t)$ de classe C^2

$$g(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f_n \, \mathrm{e}^{-in\omega_0 t} \qquad \omega_0 = \frac{2\pi}{T}$$

Convergence uniforme, $\quad f_n = \frac{1}{T}\int_0^T \mathrm{e}^{in\omega_0 t}\, g(t)\, \mathrm{d}t$



Peut-on exprimer $g(t)$ comme une somme « continue » d'exponentielles oscillantes $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$?

$$g(t) \stackrel{?}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\, \mathrm{d}\omega$$

Si oui, comment trouver $f(\omega)$ connaissant $g(t)$?

La transformation de Fourier, du cours de maths au cours de physique

Maths en tronc commun : la TF est définie dans L_1 (fonctions sommables)

$$f \longrightarrow \hat{f} \qquad \hat{f}(\xi) := \int_{\mathbf{R}^N} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi\cdot x}\, f(x)\, \mathrm{d}x$$

Physique : la TF est défini dans L_2 (fonctions de carré sommable)

1D : $\quad \psi \longrightarrow \varphi \qquad \varphi(p) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}xp/\hbar}\, \psi(x)\, \mathrm{d}x$

$xp/\hbar$: sans dimension, x = longueur, $\hbar$ = Joule.seconde $\rightarrow$ p = impulsion

On utilise aussi l'espace S de Schwartz :
fonctions C^∞ décroissant plus vite que toute puissance de x à l'infini

Les propriétés essentielles de la TF pour la physique (I)

Connaissant $\psi(x)$, on calcule $\varphi(p)$ en utilisant

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}xp/\hbar}\, \psi(x)\, \mathrm{d}x$$

Inversement, peut-on reconstruire $\psi(x)$ si on connaît sa TF $\varphi(p)$?

OUI ! $\qquad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}\, \varphi(p)\, \mathrm{d}p$

On dit pour simplifier que $\psi(x)$ et $\varphi(p)$ sont TF l'une de l'autre,
même s'il faut se souvenir de la valeur du signe dans $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}xp/\hbar}$

$$\psi(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi(p)$$

Les propriétés essentielles de la TF pour la physique (II)

La TF est une isométrie pour l'espace L_2

$$\psi_1(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi_1(p) \qquad \psi_2(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi_2(p)$$

$$\int \psi_1^*(x)\, \psi_2(x)\, \mathrm{d}x = \int \varphi_1^*(p)\, \varphi_2(p)\, \mathrm{d}p$$

Notation compacte: $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle$

Si $\psi(x)$ est normée, alors $\varphi(p)$ l'est également :

$$1 = \int |\psi(x)|^2\, \mathrm{d}x = \int |\varphi(p)|^2\, \mathrm{d}p$$

Notation compacte: $\quad 1 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle$

Les propriétés essentielles de la TF pour la physique (III)

Dérivation et transformée de Fourier $\psi(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi(p)$

On part de $\psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \displaystyle\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}\, \varphi(p)\, \mathrm{d}p$

et on suppose qu'on peut dériver sous le signe intégral (OK dans l'espace S)

On en déduit la TF de la dérivée de $\psi(x)$ par rapport à x :

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar} \left[\frac{\mathrm{i}p}{\hbar}\,\varphi(p)\right] \mathrm{d}p \qquad \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \xleftrightarrow{\text{TF}} \frac{\mathrm{i}p}{\hbar}\,\varphi(p)$$

Dérivation par rapport à x dans l'espace des *positions*

=

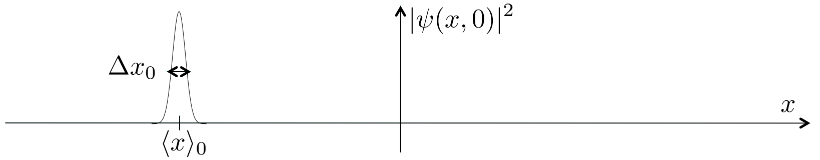
multiplication par p dans l'espace des *impulsions*

2.

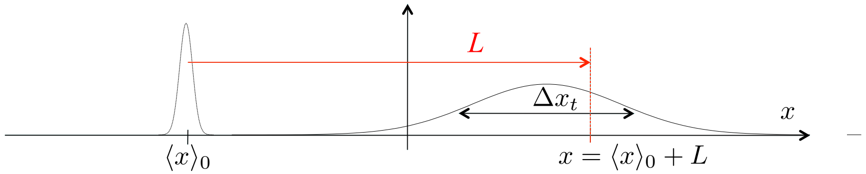
La distribution en impulsion d'une particule quantique

Comment faire une mesure de vitesse ou d'impulsion ?

A l'instant $t = 0$, la particule a pour fonction d'onde $\psi(x, 0)$



Méthode de temps de vol : la particule évolue pendant un temps t suffisamment long de sorte que $\Delta x_t \gg \Delta x_0$ (on peut montrer que $\Delta x_t \propto t$ quand $t \to \infty$)



Probabilité pour que la particule parcourt la distance $\approx L$ pendant le temps t ?

L'analyse rigoureuse de ce problème est faite au chapitre 2, §6 (hors programme)

La densité de probabilité pour l'impulsion

Proposition : si une particule est dans l'état $\psi(x)$, alors la distribution de probabilité pour son impulsion est :

$$\mathcal{P}(p) = |\varphi(p)|^2 \qquad \psi(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi(p)$$

Est-ce mathématiquement possible ?

On a vu que $\varphi(p)$ est normée si $\psi(x)$ est normée, donc $\displaystyle\int \mathcal{P}(p)\, \mathrm{d}p = 1$

$\mathcal{P}(p)$ peut donc bien être une densité de probabilité

Est-ce physiquement réaliste?

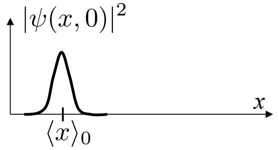
Classiquement, une fois connue la trajectoire $x(t)$ de la particule, on définit l'impulsion de la particule par :

$$p = m\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

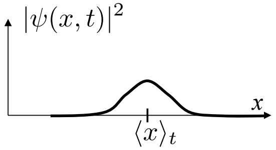
Retrouve-t-on ce résultat au niveau quantique pour les valeurs moyennes ?

Impulsion moyenne d'une particule libre quantique

Au niveau quantique, on sait calculer l'évolution de la position moyenne de la particule en fonction du temps :



$$\langle x\rangle_0 = \int x\,|\psi(x,0)|^2\,\mathrm{d}x$$



$$\langle x\rangle_t = \int x\,|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$$

Trouve-t-on $\langle p\rangle_t = m\dfrac{\mathrm{d}\langle x\rangle_t}{\mathrm{d}t}$ si on définit $\langle p\rangle_t$

par $\langle p\rangle_t = \int p\,|\varphi(p,t)|^2\,\mathrm{d}p$?

Un résultat utile pour la suite du cours $\quad \varphi(p) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \psi(x)$

Comment s'exprime $\langle p\rangle = \int p\,|\varphi(p)|^2\,\mathrm{d}p$ en fonction de $\psi(x)$?

On réécrit cette valeur moyenne sous la forme : $\langle p\rangle = \int \varphi^*(p)\,p\,\varphi(p)\,\mathrm{d}p$

isométrie : $\displaystyle\int \varphi_1^*(p)\,\varphi_2(p)\,\mathrm{d}p = \int \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,\mathrm{d}x$

$$\varphi_1(p) = \varphi(p) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \psi_1(x) = \psi(x)$$

dérivation : $\varphi_2(p) = p\,\varphi(p) \overset{\text{TF}}{\longleftrightarrow} \psi_2(x) = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}$

d'où le résultat: $\displaystyle\langle p\rangle = \int \psi^*(x)\,\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x$

Retour à la question : $\langle p\rangle_t = m\dfrac{\mathrm{d}\langle x\rangle_t}{\mathrm{d}t}$?

L'évolution de la position moyenne de la particule est donnée par

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle_t}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int x\,\psi^*(x,t)\,\psi(x,t)\,\mathrm{d}x \quad = \int x\,\psi^*\,\frac{\partial\psi}{\partial t}\,\mathrm{d}x + \int x\,\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\,\psi\,\mathrm{d}x$$

On injecte alors l'évolution donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \qquad\qquad -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}$$

Intégrations par parties en supposant que ψ tend vers 0 quand $|x| \to \infty$

$$m\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle_t}{\mathrm{d}t} = -i\hbar\int \psi^*\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\,\mathrm{d}x$$ à vérifier en exercice

$$= \langle p\rangle_t$$ (cf. diapo précédente)

Question résolue !

3.

Opérateurs position, impulsion, énergie

et

l'équation de Schrödinger générale

Position et impulsion en mécanique quantique

Valeur moyenne de la position : $\langle x \rangle = \int x \, |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = \int \psi^*(x) \, x \, \psi(x) \, \mathrm{d}x$

Valeur moyenne de l'impulsion : $\langle p \rangle = \int p \, |\varphi(p)|^2 \, \mathrm{d}p = \int \psi^*(x) \, \frac{\hbar}{i} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \, \mathrm{d}x$

Structure commune en terme d'opérateur :

$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) \; [\hat{x} \, \psi(x)] \; \mathrm{d}x \qquad \psi(x) \xrightarrow{\hat{x}} x \, \psi(x)$ multiplication par x

$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \; [\hat{p} \, \psi(x)] \; \mathrm{d}x \qquad \psi(x) \xrightarrow{\hat{p}} \frac{\hbar}{i} \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}$ dérivation par rapport à x (à $\hbar/i$ près)

Nous généraliserons plus tard cette structure à toute quantité physique

Retour sur l'équation de Schrödinger pour une particule libre

Nous avons vu que l'évolution de la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'une particule libre était régie à une dimension par l'équation :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

mise sous la forme : $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$

Cette équation peut se réécrire en utilisant l'opérateur impulsion

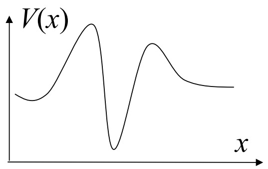
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi \qquad \text{avec} \qquad \psi(x) \xrightarrow{\hat{p}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$$

ou encore $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$ avec $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

$\hat{H}$ est l'opérateur « énergie cinétique », qui coïncide ici avec l'énergie totale car aucun potentiel n'est pris en compte

Equation de Schrödinger = lien temps - énergie

L'équation de Schrödinger en présence d'un potentiel



Nous allons garder la structure $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

en incluant dans $\hat{H}$ toutes les contributions à l'énergie de la particule : cinétique et potentielle

$\hat{H}$: opérateur énergie totale ou « Hamiltonien »

Principe 2 (cas général)

L'équation de Schrödinger qui régit l'évolution de la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'une particule de masse m en mouvement dans le potentiel $V(x)$ s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \qquad \text{avec} \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Ecriture explicite : $\hat{H}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$

Equivalent quantique du principe fondamental de la dynamique (Newton)

4.

Paquets d'ondes et inégalité de Heisenberg

Interprétation « physique » de la TF

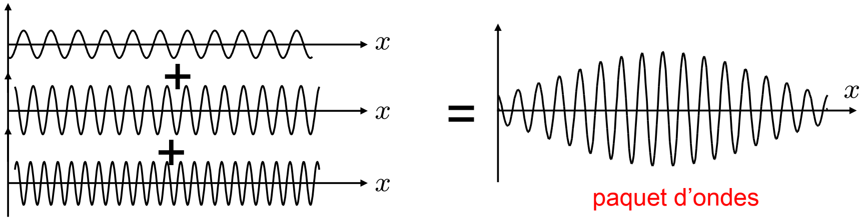
Premier amphi : on a vu l'onde de de Broglie $\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp_0/\hbar}$ associée à une particule d'impulsion p_0, mais cette onde n'est pas normalisée

Aujourd'hui : toute fonction d'onde normalisée peut s'écrire

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}\, \varphi(p)\, \mathrm{d}p$$

$\psi(x)$ est une superposition d'ondes de de Broglie $\mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}$

$\varphi(p)$ représente l'amplitude de l'onde $\mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}$ dans ce développement



paquet d'ondes

La TF est similaire au développement sur une base

Développement d'un vecteur $\vec{A}$ sur une base orthonormée $\{\ \vec{u}_n\ \}$

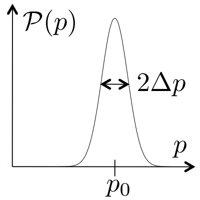
$$\vec{A} = \sum_n \varphi_n\, \vec{u}_n \qquad \text{à relier à} \qquad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}\, \varphi(p)\, \mathrm{d}p$$

Élément à développer	vecteur $\vec{A}$	fonction $\psi(x)$
Type de somme	somme discrète	intégrale
Vecteurs de base	$\vec{u}_n$	$u_p(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}xp/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$
« poids » d'un vecteur de base	$\lvert\varphi_n\rvert^2$	$\lvert\varphi(p)\rvert^2$
normalisation	$\sum_n \lvert\varphi_n\rvert^2 = 1$	$\int \lvert\varphi(p)\rvert^2\, \mathrm{d}p = 1$

On peut formaliser cette analogie en introduisant la notion de base continue.
Hors programme pour ce cours (bases hilbertiennes dans l'amphi 5)

L'exemple d'un paquet d'ondes « gaussien »

Les calculs de TF peuvent être menés analytiquement avec les gaussiennes



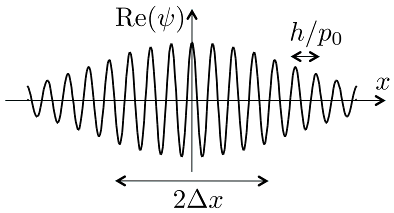
$\varphi(p) \propto \mathrm{e}^{-(p-p_0)^2/(4q^2)}$ $\qquad \mathcal{P}(p) \propto \mathrm{e}^{-(p-p_0)^2/(2q^2)}$

moyenne : $\langle p \rangle = p_0$

écart-type : $\Delta p = q$

Quelle est la fonction d'onde $\psi(x)$ correspondante ? $\psi(x) \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0 x/\hbar}\ \mathrm{e}^{-q^2x^2/\hbar^2}$

$\mathcal{P}(x) \propto \ \mathrm{e}^{-2q^2x^2/\hbar^2}$



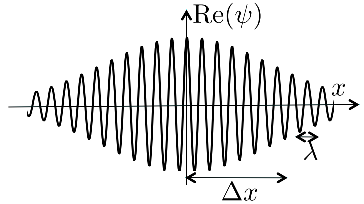
moyenne : $\langle x \rangle = 0$

écart-type : $\Delta x = \dfrac{\hbar}{2q}$

Pour ce paquet d'ondes gaussien, on a toujours : $\Delta x\ \Delta p = \dfrac{\hbar}{2}$

Deux cas limites intéressants du paquet gaussien

Le paquet quasi-monocinétique : $\Delta p \ll p_0$



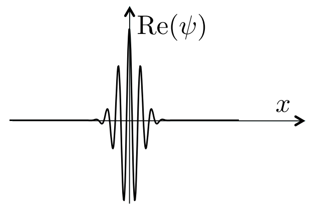
Il y a alors beaucoup d'oscillations de $\psi(x)$ avec une amplitude similaire car

$$\lambda = \frac{h}{p_0} \quad \ll \quad \Delta x = \frac{\hbar}{2\,\Delta p}$$

On retrouve une onde plane dans la limite $\Delta p \to 0$

Le paquet bien localisé : $\Delta x \approx \lambda$

L'impulsion est alors mal définie : $\Delta p \approx p_0$



$\Delta x\ \Delta p = \dfrac{\hbar}{2}$: un paquet ne peut pas être à la fois bien localisé et quasi-monocinétique

L'inégalité de Heisenberg dans le cas général

On se donne une fonction d'onde normalisée $\psi(x)$, de TF $\varphi(p)$

Distribution de probabilité pour la position de la particule : $\mathcal{P}(x) = |\psi(x)|^2$

$$\langle x \rangle = \int x\, |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x \qquad \Delta x = \left[\langle x^2\rangle - \langle x \rangle^2\right]^{1/2}$$

Distribution de probabilité pour l'impulsion de la particule : $\mathcal{P}(p) = |\varphi(p)|^2$

$$\langle p \rangle = \int p\, |\varphi(p)|^2 \,\mathrm{d}p \qquad \Delta p = \left[\langle p^2\rangle - \langle p \rangle^2\right]^{1/2}$$

On a toujours : $\boxed{\Delta x\ \Delta p \geq \dfrac{\hbar}{2}}$ cf. PC

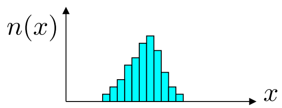
égalité atteinte seulement pour les gaussiennes

Signification physique de l'inégalité de Heisenberg

Il est impossible de préparer une particule dans un état tel que la position et l'impulsion de la particule soient simultanément arbitrairement bien définies

On considère 2*N* particules toutes préparées dans le même état $\psi(x) \overset{\mathrm{TF}}{\longleftrightarrow} \varphi(p)$

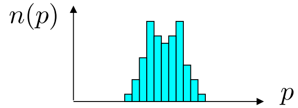
Mesure *de la position* sur *N* particules



$\langle x \rangle$

Δx

Mesure de *l'impulsion* sur *N* particules



$\langle p \rangle$

Δp

$$\Delta x\ \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

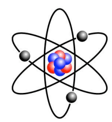
Ces histogrammes ne peuvent pas être simultanément arbitrairement étroits

Cette relation d'incertitude n'a rien à voir avec la résolution des appareils de mesure, c'est-à-dire la largeur des canaux des histogrammes

5.

La stabilité de la matière assurée par l'inégalité de Heisenberg

L'instabilité de la matière « classique » (1)



La « catastrophe » du rayonnement classique pour un atome :

- un électron tournant autour d'un noyau est accéléré,
- une charge accélérée rayonne.

⟶ Dans le modèle planétaire classique, l'électron en rotation autour du noyau finit par « tomber » sur ce noyau.

Un électron en mouvement circulaire uniforme de rayon r et de pulsation ω

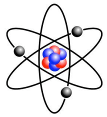
énergie potentielle : $V(r) = -e^2/r \qquad e^2 = \dfrac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}$

équilibre des forces : $m\omega^2 r = e^2/r^2 \quad \longrightarrow \quad v = \omega r = e/\sqrt{mr}$

énergie cinétique : $E_{\mathrm{cin}} = \dfrac{1}{2}mv^2 = \dfrac{1}{2}m\dfrac{e^2}{mr} \quad \longrightarrow \quad E_{\mathrm{cin}} = \dfrac{e^2}{2r}$

énergie totale : $E_{\mathrm{tot}} = E_{\mathrm{cin}} + V(r) = -\dfrac{e^2}{2r} \qquad E_{\mathrm{tot}} \to -\infty$, $r \to 0$

L'instabilité de la matière « classique » (2)



Puissance rayonnée par une charge accélérée (cf. cours d'électromagnétisme antérieur) :

$$\mathcal{P} \sim \frac{e^2 a^2}{c^3}$$

$a = \omega^2 r$: accélération

c : vitesse de la lumière

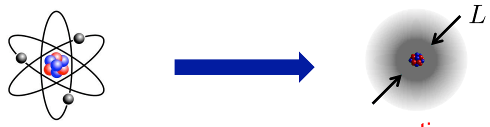
Perte relative d'énergie sur un tour : $\frac{\delta E}{|E_{\rm tot}|} \sim 4\pi \left(\frac{e^2/r}{mc^2}\right)^{3/2}$

Valeur typiques : $r = 1\,\text{Å}$ $\quad \omega \approx 2\,10^{16}\,\mathrm{s}^{-1}$ $\quad \frac{e^2/r}{mc^2} \approx 3\,10^{-5}$

La perte relative d'énergie par tour est faible ($\approx 10^{-6}$),
mais l'électron fait $\omega/(2\pi) \approx 3\,10^{15}$ tours par seconde…

En un temps de l'ordre de $m^2c^3r^3/e^4 \approx 0.4$ ns,
l'électron devrait tomber sur le noyau !

La stabilité de la matière « quantique »



Les atomes sauvés par l'inégalité de Heisenberg…

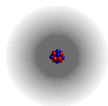
Confiner une particule dans une région d'étendue L « coûte » de l'énergie cinétique :

$$\Delta x \leq L \quad \longrightarrow \quad \Delta p \geq \frac{\hbar}{2L}$$

On a ici $\langle p \rangle = 0$ et donc $E_{\rm cin} = \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8mL^2}$

Quand la taille *L* de « l'orbite » tend vers 0, ce coût en énergie cinétique $\propto 1/L^2$
l'emporte sur le gain en énergie potentielle $\propto -1/L$

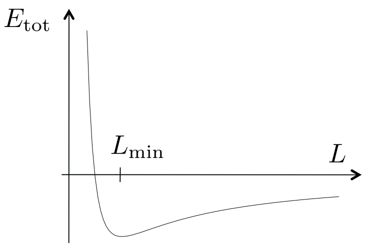
La taille de « l'orbite » de l'électron qui minimise son énergie totale



$$E_{\rm tot} = E_{\rm cin} + E_{\rm pot}$$

$$E_{\rm cin} \sim \frac{\hbar^2}{8mL^2}$$

$$E_{\rm pot} \sim V(L) = -\frac{e^2}{L}$$



Minimum de $\frac{\hbar^2}{8mL^2} - \frac{e^2}{L}$ atteint pour $L_{\rm min} = \frac{\hbar^2}{4me^2}$

Raisonnement non rigoureux, mais qui donne bien (à un facteur numérique près)
le rayon de Bohr, c'est-à-dire la taille de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène

Dans cet état fondamental, l'atome ne peut pas rayonner d'énergie

En résumé

- Distribution de probabilité pour la position $|\psi(x)|^2$ et pour l'impulsion $|\varphi(p)|^2$

$$\psi(x) \overset{\rm TF}{\longleftrightarrow} \varphi(p) \qquad\qquad \Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

- Structure opératorielle :

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x)\ [\hat{x}\ \psi(x)]\ \mathrm{d}x$$

Opérateur position : $\psi(x) \xrightarrow{\hat{x}} x\,\psi(x)$

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x)\ [\hat{p}\ \psi(x)]\ \mathrm{d}x$$

Opérateur impulsion : $\psi(x) \xrightarrow{\hat{p}} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$

- Equation de Schrödinger générale : $i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$

Opérateur énergie ou « Hamiltonien » $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$