Espace des fonctions d'onde d'une particule

Définition

C'est l'ensemble des fonctions qui sont de carré sommable, autrement dit, celles pour qui l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$$

converge, et qui en plus sont partout définies, continues et infiniment dérivables. Cet ensemble est noté F . C'est un espace vectoriel.

On définit le produit scalaire dans de ψ par φ :

$$(\varphi,\psi) = \int \varphi^*(x)\psi(x)dx$$

C'est un nombre complexe.

On peut vérifier que:

$$(\varphi,\psi)=(\psi,\varphi)^*$$

$$(\varphi,\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2)=\lambda_1(\varphi,\psi_1)+\lambda_2(\varphi,\psi_2)$$

$$(\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2,\psi)=\lambda_1^*(\varphi_1,\psi)+\lambda_2^*(\varphi_2,\psi)$$

Bases dans F :

$\{ U_i(x)\} \in F$ Forme une base ssi 2 relations sont satisfaites

1-La relation d'orthonormalisation:

$$(U_i,U_j) = \int U_i^*(x)U_j(x)dx = \delta_{ij}$$

2-La relation de fermeture :

$$\forall \psi(x) \in F, \quad \psi(x) = \sum_i c_i U_i(x)$$

c_i Sont les composantes de $\psi(x)$ sur $U_i(x)$

On montre que: $c_i = (U_i, \psi)$

$$\psi(x) = \sum_i c_i U_i(x) \Rightarrow U_j^{\,*}(x)\psi(x) = \sum_i c_i U_j^{\,*}(x) U_i(x)$$

$$\Rightarrow \int U_j^{\,*}(x)\psi(x)dx = \sum_i c_i \int U_j^{\,*}(x) U_i(x)dx = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

$$\Rightarrow (U_j, \psi) = c_j$$

Exemple: Si i varie de 1 jusqu'à 3

$$\sum_{i=1}^{3} c_i \delta_{ij} = c_1\delta_{1j} + c_2\delta_{2j} + c_3\delta_{3j} = c_j$$

Produit scalaire de deux fonctions d'onde:

$$\varphi(x)=\sum_i b_i U_i(x) \quad \text{et} \quad \psi(x)=\sum_i c_i U_i(x)$$

$$(\varphi,\psi)=\int \varphi^*(x)\psi(x)dx$$

$$=\int \sum_i b_i^* U_i^*(x) \sum_j c_j U_j(x)dx$$

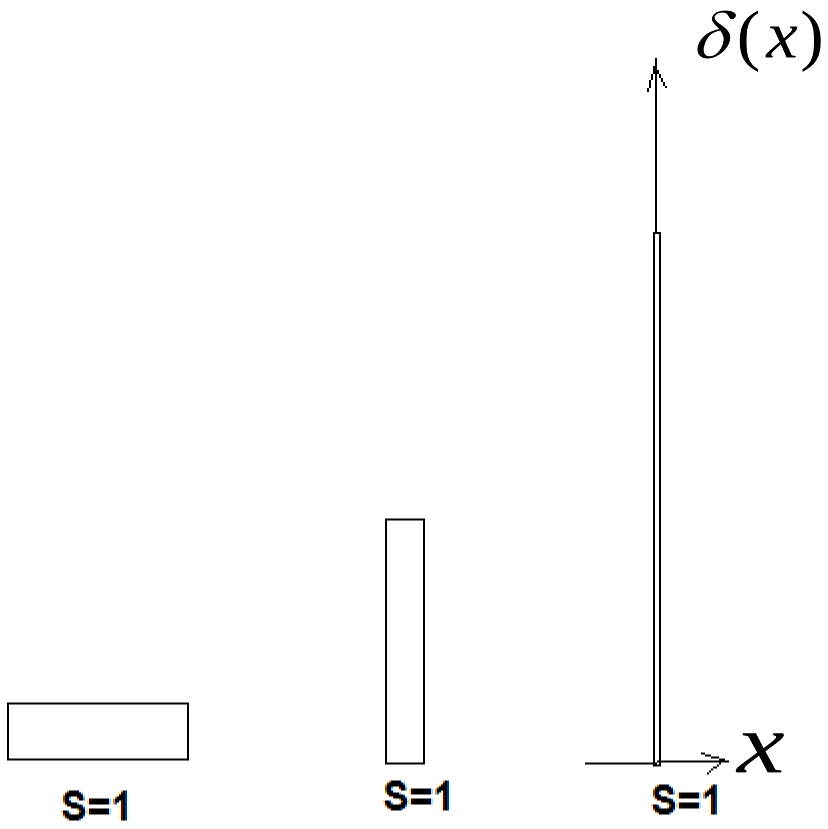
$$=\sum_i \sum_j b_i^* c_j \int U_i^*(x)U_j(x)dx = \sum_i \sum_j b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i$$

$$(\varphi,\psi)=\sum_i b_i^* c_i$$

En particulier: la norme de $\varphi(x)$

$$(\varphi,\varphi)=\sum_i |c_i|^2$$

Fonction de Dirac

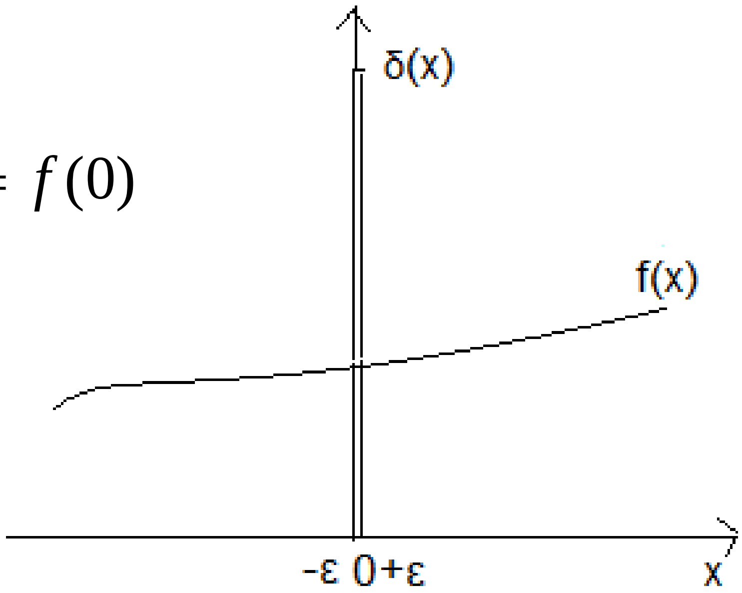


$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & si \quad x = 0 \\ 0 & si \quad x \neq 0 \end{cases}$$

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

Propriété de la fonction de Dirac:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)dx = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} f(x)\delta(x)dx \approx f(0)\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x)dx = f(0)$$



Plus généralement

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

relation de fermeture

$$\forall\,\psi(x)\in F,\quad \psi(x)=\sum_i c_i U_i(x)=\sum_i (U_i,\psi)U_i(x)$$

$$=\sum_i \int dx' U_i^*(x')\psi(x')U_i(x)$$

$$=\int \sum_i U_i^*(x')U_i(x)\psi(x')dx'$$

Donc:

$$\sum_i U_i^*(x')U_i(x)=\delta(x'-x)$$

On a obtenu la relation de fermeture

Bases qui n'appartiennent pas à F :

1-Ondes planes :

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

$$p=\hbar k \Longrightarrow \psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\exp(\frac{ipx}{\hbar})\frac{dp}{\hbar}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{g(k)}{\sqrt{\hbar}}\exp(\frac{ipx}{\hbar})dp$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\psi}(p)\exp(\frac{ipx}{\hbar})dp$$

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\psi}(p)\exp(\frac{ipx}{\hbar})dp$$

$$v_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{ipx}{\hbar})$$

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{\psi}(p)v_p(x)dp \Longleftrightarrow \psi(x)=\sum_i c_i U_i(x)$$

$$\overline{\psi}(p)=(v_p,\psi) \Longleftrightarrow (U_i,\psi)=c_i$$

{ $v_p(x)$ } forment une base qui n'appartient pas à F. On les appelle les ondes planes

2-Fonctions Delta

Sachant que: $\forall \psi(x) \in F, \;\; \psi(x) = \int \psi(x_0)\delta(x - x_0)dx_0$

On pose: $\zeta_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$

$\{\zeta_{x_0}(x)\}$ est l'ensemble des fonctions delta centrées en x_0

Cet ensemble forme une base sur laquelle se développe $\psi(x)$

$$\forall \psi(x) \in F, \;\; \psi(x) = \int \psi(x_0)\zeta_{x_0}(x)dx_0$$

$$\psi(x_0) = (\xi_{x_0}, \psi)$$