Equation de Schrödinger

Aubin SIONVILLE

MPI Clemenceau - 2021-2023

Equation de Schrödinger

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}(M,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\underline{\psi}(M,t) + V(M,t)\underline{\psi}(M,t)}$$

$V(M,t)$ est une énergie potentielle, que l'on appellera par la suite potentiel (abus de langage).
Δ est le laplacien.
Cette année, on n'étudiera que des systèmes 1D donc on a :

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\underline{\psi}(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\underline{\psi}(x,t)}$$

L'équation de Schrödinger est linéaire, on peut donc appliquer le théorème de superposition.

Solutions stationnaires

Etats stationnaires

On connaît des exemples d'ondes stationnaires (ex : corde vibrante), à laquelle on a associé des modes propres.
$\underline{\psi}(x,t) = a_0\mathrm{e}^{i(\omega t-kx)} = a_0\mathrm{e}^{i\omega t}\mathrm{e}^{-ikx}$ est une onde stationnaire quantique.

Solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger

On cherche alors des solutions sous la forme $\underline{\psi}(x,t) = \underline{\varphi}(x)\underline{g}(t)$

$$\boxed{\begin{array}{lll} \underline{g}(t) \quad \text{vérifie} & \underline{g}'(t) + i\dfrac{E_0}{\hbar}\underline{g}(t) = 0 & \text{avec } E_0 \text{ une constante} \\ \underline{\varphi}(x) \quad \text{vérifie} & -\dfrac{\hbar^2}{2m}\underline{\varphi}''(x) + V(x)\underline{\varphi}(x) = E_0\underline{\phi}(x) & \end{array}}$$

Les solutions stationnaires sont des états d'énergie E constante tels que :

$$\boxed{\underline{\psi}(x,t) = \varphi(x)\exp\bigg(-i\frac{E}{\hbar}t\bigg)}$$

Ces états sont particulièrement intéressants car ils forment une base de l'espace des états.
Autrement dit, toute solution de l'équation de Schrödinger est une combinaison linéaire des états stationnaires indépendants entre eux.

Probabilité de présence

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

Comme $\left|\exp\left(-i\dfrac{E}{\hbar}t\right)\right|^2 = 1$, $\underline{\mathrm{d}P \text{ ne dépend pas du temps}}$ (d'où le nom de stationnaire).

Equation de Schrödinger pour indépendante du temps

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\underline{\varphi}(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\underline{\varphi}(x) = E\underline{\varphi}(x)}$$

On défini alors l'opérateur Hamiltonien : $\boxed{H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V}$ où Δ est le laplacien

L'équation de Schrödinger pour les états stationnaires est alors l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien :

$$H\underline{\varphi}(x) = E\underline{\varphi}(x)$$

Les valeurs propres sont les énergies E des états stationnaires.

Les fonctions $\underline{\varphi}$ sont les fonctions propres de l'hamiltonien.

Etats stationnaires d'une particule libre

Une particule libre quantique est un quanton qui évolue dans le vide sans interactions.

Cas $E = 0$

La seule fonction d'onde stationnaire d'énergie nulle est la fonction d'onde nulle, donc sans intéret.

Cas $E > 0$

L'équation devient

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\underline{\varphi}(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\underline{\varphi}(x) = \frac{\mathrm{d}^2\underline{\varphi}(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\underline{\varphi}(x) = 0}$$

On a alors des solutions de la forme

$$\boxed{\underline{\psi}(x,t) = A\mathrm{e}^{-i(kx+\omega t)} + B\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}}$$

Donc la superposition de deux ondes planes harmoniques

Une particule quantique réelle est décrite par un paquet d'ondes, que la particule soit libre ou non.

Relation de dispersion

$$\boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}}$$ (Il y a dispersion du quanton)

Vitesses de groupe et de phase

$$\boxed{v_g = 2v_\varphi = \frac{p}{m} = \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{m}}}$$

$\underline{\psi}(x)$ est la transformée de Fourier de $f(k)$: $\underline{\psi}(x) = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(k)\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{d}k$

On a alors $\Delta k \Delta x \geq \dfrac{1}{2}$

Donc $\Delta(\hbar k)\Delta(x) \geq \dfrac{\hbar}{2}$(Inégalité d'Heisenberg sur l'axe$x$)