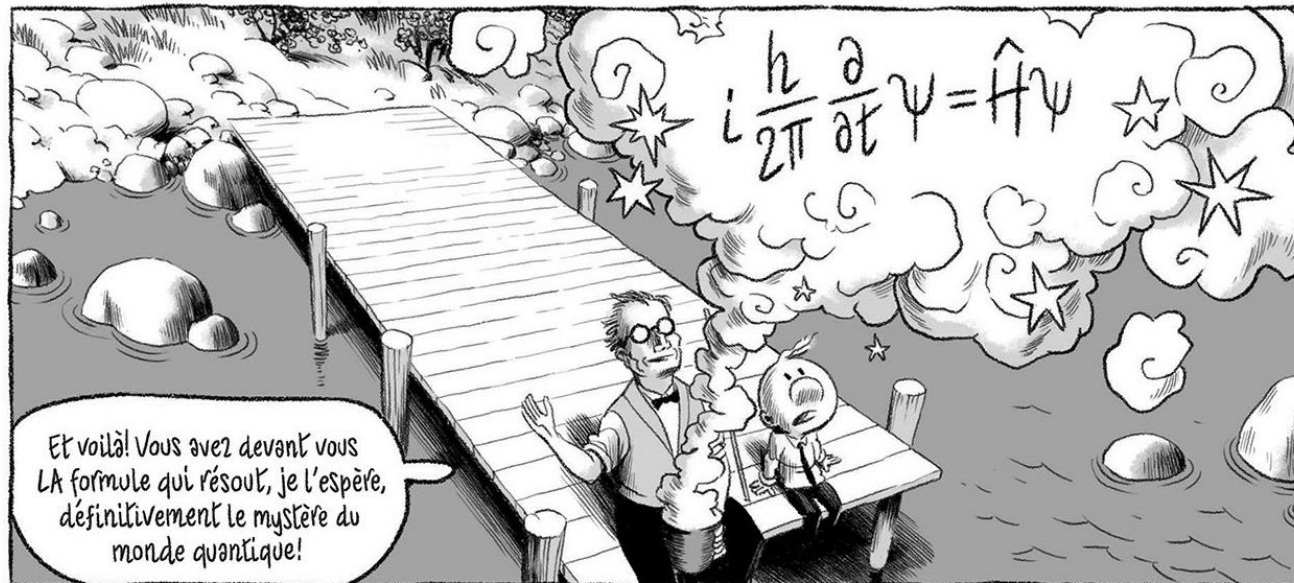


Chapitre IV - Partie 2

Equations de Schrödinger



Extrait de la BD « Le mystère du monde quantique », de Damour et Burniat (2016)

Mécanique Quantique
2021-2022 – Semestre 5 – JUNIA ISEN Lille

David Mele
david.mele@junia.com

IV.3 Equation de Schrödinger

A – Dépendant du temps



Postulat 3:

La fonction d'onde d'une particule suit l'équation d'évolution spatio-temporelle postulée par Schrödinger (1926):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + \hat{V}(\vec{r}) \Psi$$

ou

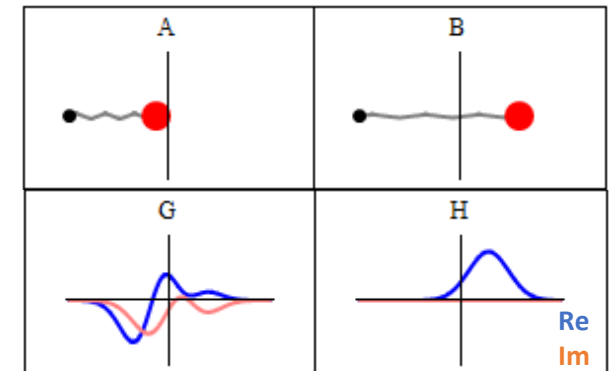
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

avec \hat{H} l'opérateur Hamiltonien $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\vec{r})$

partie rattachée à
l'énergie cinétique

partie rattachée à
l'énergie potentielle

oscillateurs classiques



Fonctions d'onde évoluant au cours du temps

Gardez en tête qu'ici $\Psi = \Psi(\vec{r}, t) = \Psi(r, t)$

Pour rappel le Laplacien $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Anatomie de l'équation de Schrödinger

Égale à $\hat{H}\Psi$, l'Hamiltonien du système

Energie cinétique
de la particule

Energie potentielle à laquelle est soumise la
particule (décrit les forces qui agissent
sur le système et nulle si la particule est libre)

Fonction d'onde qui au carré
donne la densité de probabilité
de présence de la particule

Masse de la
particule

Opérateur Laplacien (somme des
dérivées seconde par rapport à x, y et z).
Décrit comment la fonction d'onde
change de forme d'un endroit à l'autre

$\sqrt{-1}$
Rotation de 90°
dans le plan complexe

Constante de
Planck réduite

Décrit comment la fonction
d'onde change de forme au
cours du temps

Égale à $E\Psi$ si la fonction d'onde est stationnaire
(équation indépendante du temps)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Equations différentielles en physique

Concrètement l'équation de Schrödinger montre que le changement de Ψ dans l'espace est proportionnel au changement de Ψ dans le temps (multiplié par un complexe).

Equation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \hat{V}(\vec{r}) \Psi$$

<https://youtu.be/jvvkomcmuyo>

Mais il existe une multitude d'équations de ce type en physique:

Principe fondamental de la dynamique de Newton

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} x = -\nabla U(x)$$

Equation de diffusion ou de la chaleur:

$$\frac{\partial}{\partial t} T = \alpha \nabla^2 T$$

Equation de propagation d'onde EM de Maxwell:

$$\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} E = \nabla^2 E$$

Equation d'onde :

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} u = \nabla^2 u$$

Equation de Navier-Stokes :
(mécanique des fluides)

$$\frac{\partial}{\partial t} v = \mu \nabla^2 v - (v \cdot \nabla) v + F_{ext} - \frac{1}{\rho} (\nabla P)$$

<https://youtu.be/ly4S0oi3Yz8>

IV.2 Fonction d'onde

B – Principe de superposition

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi$$

On remarque que l'équation de Schrödinger est linéaire.



OK mais pourquoi?

Si $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ et $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$
sont deux solutions de l'équation

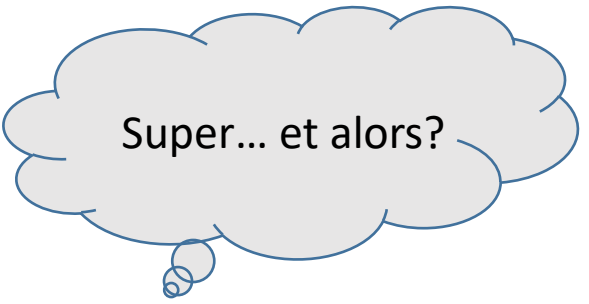
alors

$$\alpha_1 \Psi_1(\mathbf{r}, t) + \alpha_2 \Psi_2(\mathbf{r}, t)$$

est aussi solution de l'équation

(avec α_1 et α_2 des constantes complexes quelconques)

Principe de superposition



Super... et alors?

Il est alors possible d'écrire la solution
générale sous forme d'une combinaison
linéaire de solutions ayant des propriétés qui
simplifient l'équation.

En particulier on peut éliminer le temps de
l'équation!

Voir démonstration IV.3-C

IV.3 Equation de Schrödinger

C – Indépendant du temps

Equation générale de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H} \Psi(r, t)$$

Voir démonstration IV.3-C

TD3

Equation de Schrödinger indépendante du temps
(solutions stationnaires)

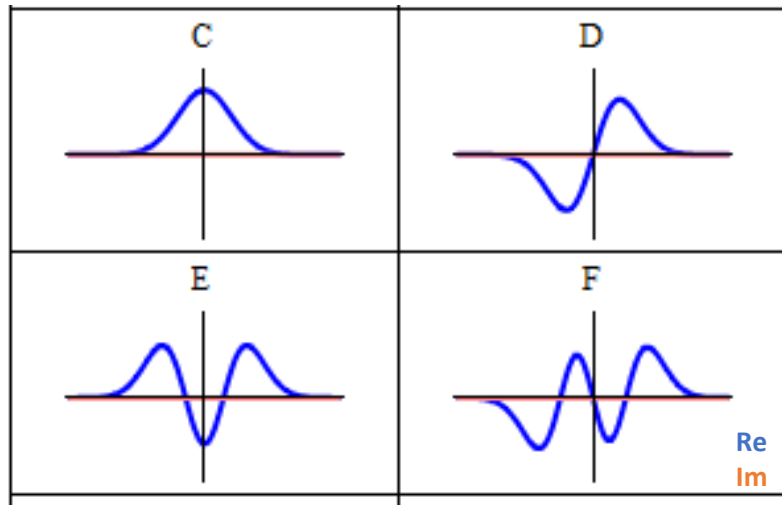
$$E\psi(r) = \hat{H}\psi(r)$$

IV.3 Equation de Schrödinger

C – Indépendant du temps

On a donc démontré que dans certain cas, l'équation de l'évolution spatio-temporelle de la fonction d'onde peut s'écrire comme une équation stationnaire (indépendante du temps)

Voir démonstration IV.2-B



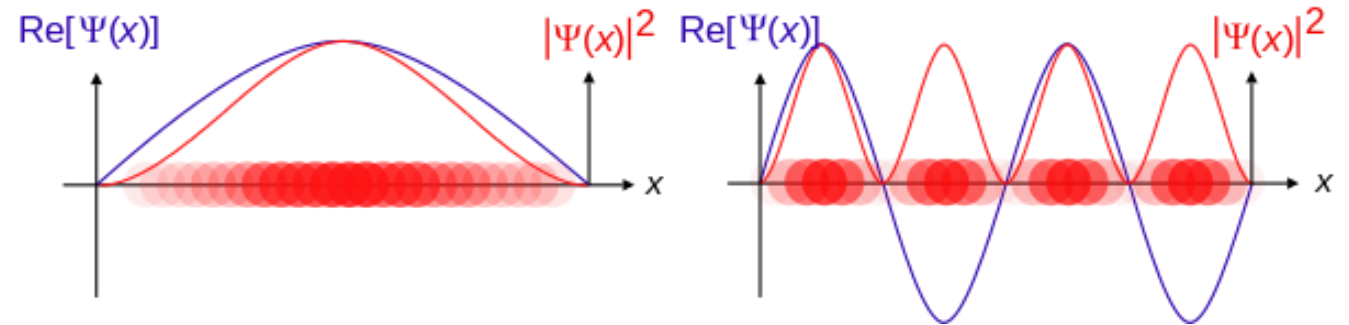
Fonctions d'onde stationnaires

Equation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hbar\omega\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r) + \hat{V}(r)\psi(r)$$

$$E\psi = \hat{H}\psi$$

D'après la
relation de Planck
 $E = h\nu = \hbar\omega$



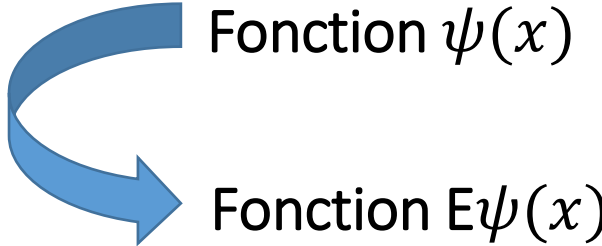
Relation entre fonction d'onde et probabilité de présence de la particule

Notez le passage de la notation $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$ à $\psi = \psi(\vec{r})$

IV.3 Equation de Schrödinger

C – Solutions stationnaires - Indépendant du temps

$E\psi = \hat{H}\psi$ Operateur \hat{H}



Fonction $\psi(x)$
Fonction $E\psi(x)$

Ici l'application de l'opérateur \hat{H} sur $\psi(x)$ redonne $\psi(x)$ multipliée par une constante d'énergie E qui reste à déterminer

- Il se trouve, que dans beaucoup de cas, cette équation n'a de solution physiquement acceptable que pour un ensemble discret de valeurs de E (qu'on appelle valeurs propres) ([voir chapitre suivant](#)).

IV.3 Equation de Schrödinger

D – Solutions générales - Dépendant du temps

Pour retrouver la forme générale (dépendante du temps):

- On recherche $\psi(x)$ et les valeurs de E pour les états stationnaires :

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x)$$

- L'état complet s'obtient en ajoutant le facteur de phase temporel :

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \psi(x)f(t) \\ &= \psi(x)\exp(-i \omega t) \\ &= \psi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)\end{aligned}$$

TD 3 et 4

IV.4 Paquet d'onde

A – Retour sur l'onde plane monochromatique (OPM)

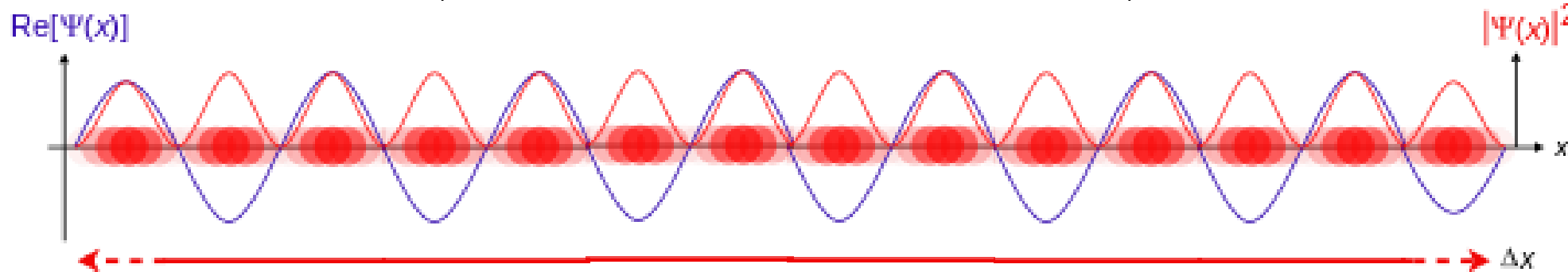
On a vu que l'onde plane monochromatique $\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{i(px - Et)/\hbar}$ est bien solution de l'équation de Schrödinger (vu que c'est à partir d'elle qu'elle est construite).

Voir chap IV.2 A

Voir TD3

Mais l'onde plane monochromatique est-elle une fonction d'onde acceptable?

Quelle est la probabilité de présence d'une OPM sur tout l'espace?
(La fonction est-elle de carré sommable?)



Le carré de l'OPM se propage jusqu'à l'infini avec la même amplitude de probabilité.
Son intégrale sur tout l'espace (ici x) doit donc tendre vers l'infini et ne peut être normalisée.
C'est-à-dire que la probabilité de trouver la particule sur tout l'espace ne peut être ramenée à 1.

→ **L'onde plane ne peut être une fonction d'onde!**

IV.4 Paquet d'onde

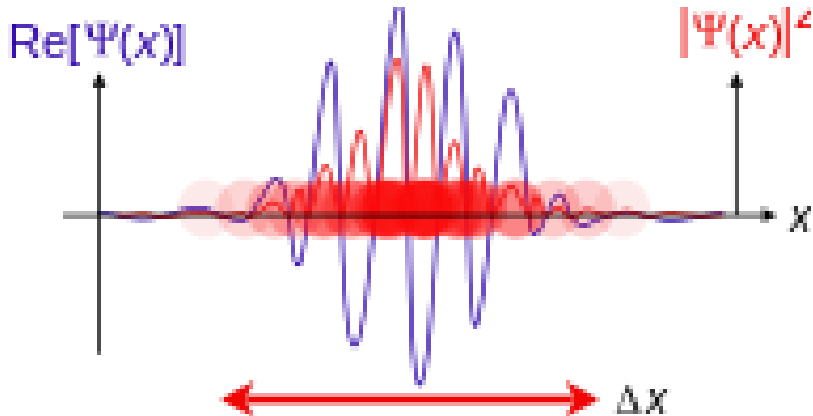
B – Paquet d'onde

Pour résoudre ce problème, on introduit le paquet d'onde. C'est une superposition linéaire à coefficients complexes d'ondes planes monochromatiques.

En vertu du principe de superposition, si l'OPM est solution (non normalisable) de l'équation de Schrödinger, alors une superposition linéaire est aussi solution:

$$\Psi(r, t) = \sum_{n=1}^N a_n \Psi_0 e^{i(p_n r - E_n t)/\hbar}$$

Somme discrète



$$\Psi(r, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(p) e^{i(p_n r - E_n t)/\hbar} d^3 p$$

Somme continue (transformée de Fourier)

$\varphi(p) e^{-iEt/\hbar}$ est la TF de $\Psi(r, t)$ et vice versa.

Le paquet d'onde étant localisé et délimité dans l'espace le carré de son amplitude (probabilité) sur tout l'espace est aussi défini et **peut être normalisé** (égalé à 1).

→ **Le paquet d'onde est une fonction d'onde normalisable!**

IV.4 Paquet d'onde

C – Paquet d'onde

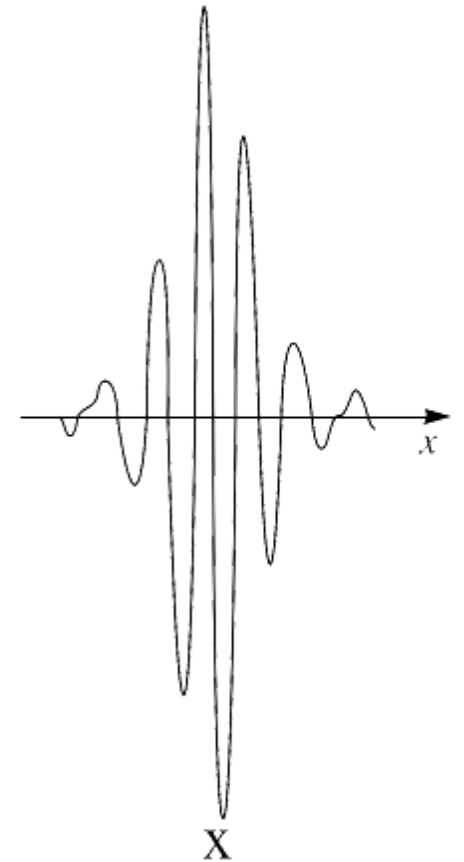
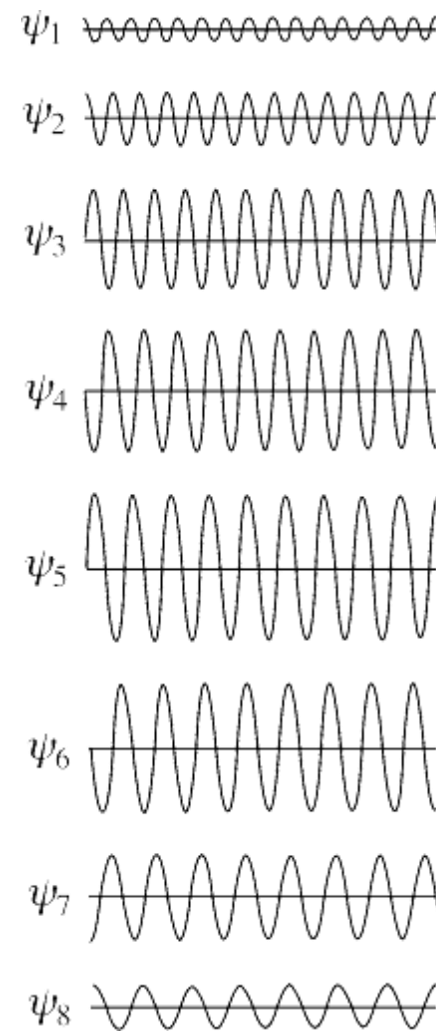
On l'a vu, une onde plane s'exprime sous la forme:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]$$

Un paquet d'onde est donc une superposition linéaire d'ondes planes de la forme

$$\Psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int f(\vec{k}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] d\vec{k}$$

Un paquet d'onde a une distribution spatiale étroite et a donc les caractéristiques à la fois d'une onde et d'une particule.



IV.4 Paquet d'onde

D – Relation d'incertitude (suite du III.1-D)

Plus on rajoute d'onde de vecteurs d'onde k , plus la distribution Δk est grande mais plus la distribution spatiale Δx est petite.

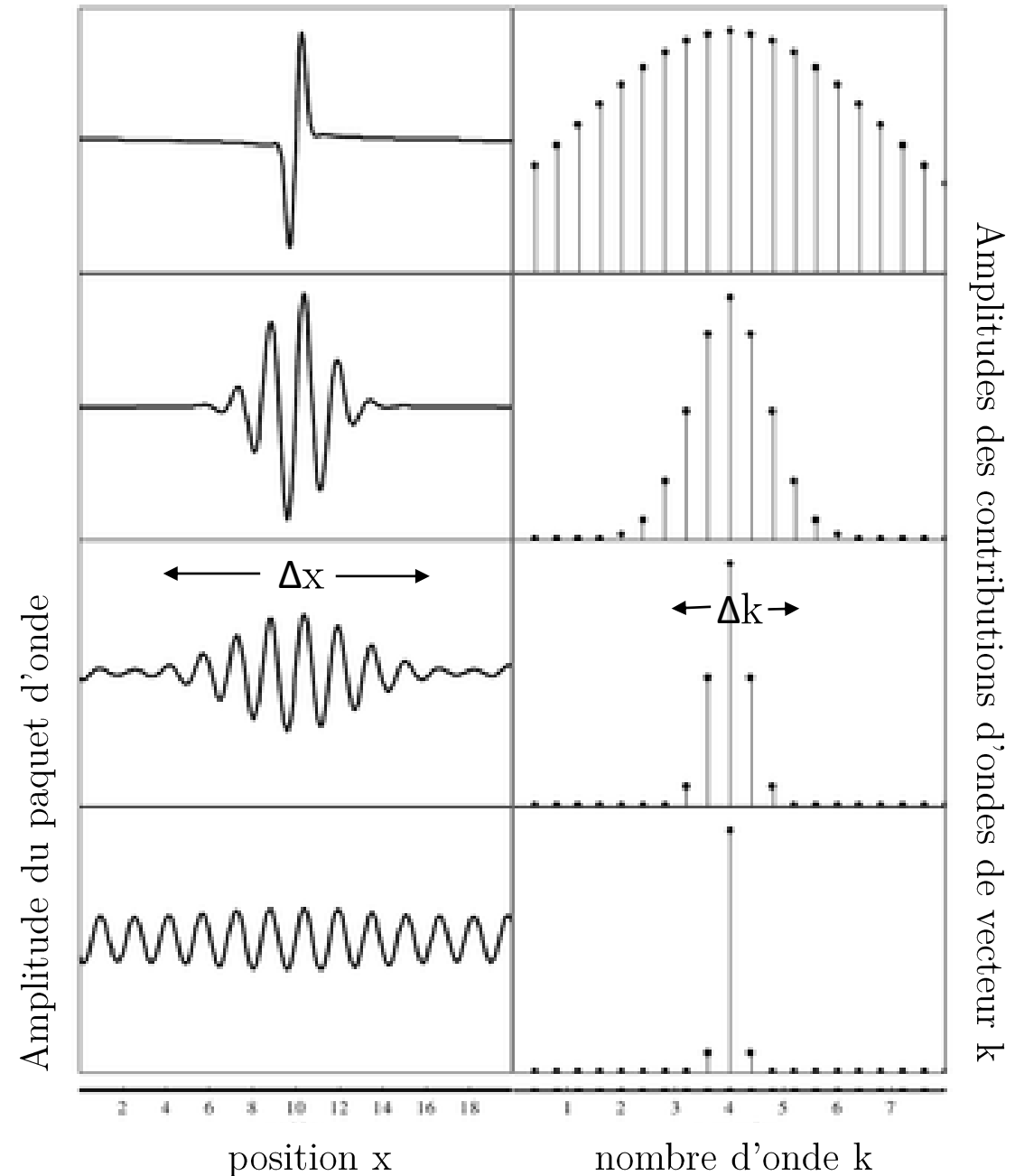
Et moins on superpose d'onde, plus le paquet d'onde est grand.

→ on retrouve la relation d'incertitude d'Heisenberg

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$$

$$\text{avec } \mathbf{p} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{2\pi}$$

Les variables x et p sont appelées variables conjuguées



IV.4 Paquet d'onde

E – Relation de dispersion

Equation de Schrödinger
pour une particule libre

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t)$$

- On cherche la **relation de dispersion**, c'est-à-dire la relation qui lie la fréquence (ou l'énergie) et le vecteur d'onde.

Photon (particule sans masse) :

$$\omega = ck$$

Particule libre

Ici on a: $E = \hbar\omega = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ et $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

On trouve donc : $\omega = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}$

la dispersion est quadratique en k pour une particule libre et non plus linéaire comme pour une particule sans masse

IV.4 Paquet d'onde

E – Relation de dispersion

Equation de Schrödinger pour une particule libre
$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t)$$

- On cherche la **relation de dispersion**, c'est-à-dire la relation qui lie la fréquence (ou l'énergie) et le vecteur d'onde.

Photon (particule sans masse) :

$$\omega = ck$$

Particule libre:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

- La vitesse de phase $v_\phi = \omega/k$ et la vitesse de groupe $v_g = d\omega/dk$ sont donc identiques pour les photons, tandis que la vitesse de groupe des particules libres peut être identifiée avec la vitesse $v = p/m$

Photon:

$$v_g = v_\phi = c$$

Particule libre:

$$v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad v_\phi = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{1}{2} v_g$$

IV.4 Paquet d'onde

C – Particule libre ($V=0$)

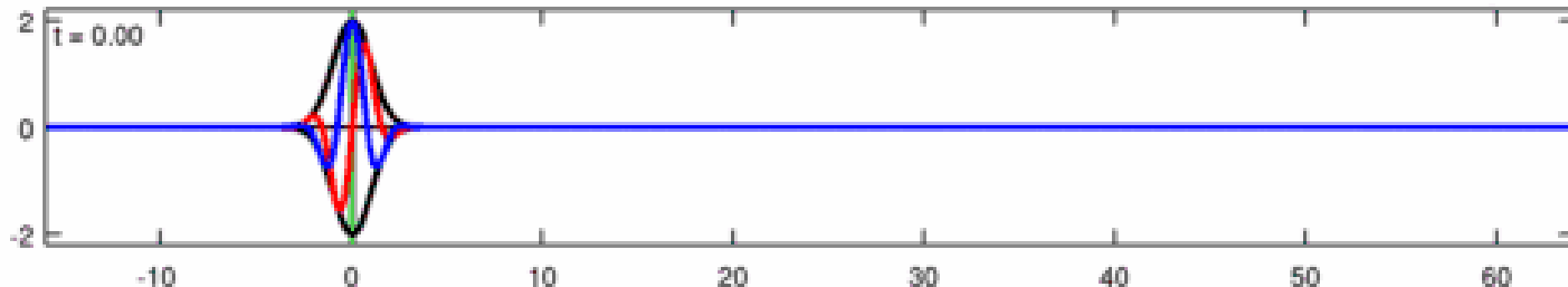
D'après Heisenberg, il y a aucun état quantique pour lequel $\Delta x=0$ et $\Delta p=0$, donc pas de trajectoire au sens classique du terme.

Une particule localisée au repos n'existe pas!

De plus v_g et v_ϕ ne sont pas identiques, mais alors, comment évolue un paquet d'onde libre?

particule massive libre dépendant du temps $\Psi(x, t) = \underbrace{\psi(x)}_{\text{amplitude}} \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$

ω et E étant positifs, l'amplitude de l'onde présente dans son terme d'évolution temporelle une décroissance exponentielle, dite de dispersion



Le paquet d'onde s'étale dans l'espace au cours du temps.

V Méthodologie

D – Comment la résoudre l'équation de Schrödinger?

Problèmes exactement solubles

- Particule dans une boîte (1D, nD)
 - Modèle de polyènes.
 - Mouvements de translation.
- Oscillateur harmonique (1D,nD)
 - Vibrations moléculaires
- Rotateur rigide
 - Rotations moléculaires
- Atome hydrogénoïde

Chapitre V et VI
TD4 et 5

TD7

Notez le passage de la notation $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$ à $\psi = \psi(\vec{r})$

A noter : on verra plus tard que $H \Psi = E \Psi$ est une équation aux valeurs propres
Un état stationnaire est aussi un état propre de l'opérateur H

Pour retrouver la forme générale (dépendante du temps):

- On recherche $\psi(x)$ et les valeurs de E pour les états stationnaires

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x)$$

- L'état complet s'obtient en ajoutant le facteur de phase temporel :

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \psi(x) \exp(-i\omega t) \\ &= \psi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)\end{aligned}$$

De Schrödinger, je retiens:

- A l'échelle quantique la trajectoire est remplacée par une fonction d'onde complexe.
- Elevée au carré, l'amplitude de la fonction d'onde me donne la probabilité de trouver ma particule dans tel ou tel état.
- Cette fonction d'onde « s'effondre » en une particule ponctuelle dès que je l'observe.
- La fonction d'onde évolue dans le temps et l'espace suivant l'équation différentielle de Schrödinger.

De Schrödinger, je retiens (suite):

- L'équation libre fait apparaître une équation différentielle du 2^{ème} ordre en x.
- On introduit l'Hamiltonien H dans lequel on décrit les différents termes en énergie. (L'énergie cinétique étant cet opérateur de dérivation du second ordre.)
- Il existe des règles pour construire l'opérateur H qui permettent d'écrire l'équation de Schrödinger pour chaque problème.

Quelques exemples d'équations de Schrödinger

– Electron dans un **potentiel constant V à 1D** →

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = E\Psi$$

– **Oscillateur harmonique**

– Electron dans un **atome H à 3D**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - \frac{e^2}{r} \Psi = E\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2 \Psi = E\Psi$$

$$F = k.x \quad \longleftrightarrow \quad W = \frac{1}{2} k.x^2$$

(force de rappel) \longleftrightarrow (énergie pot.)

Voir chapitre V

De Schrödinger, je retiens (suite et fin):

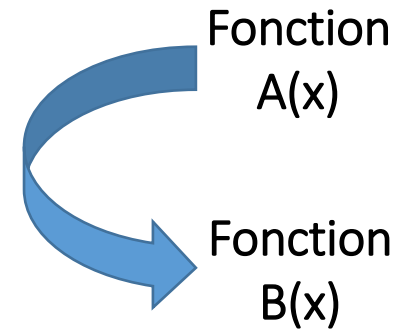
- Les grandeurs physiques sont des opérateurs
- Leurs valeurs sont les valeurs propres de ces opérateurs .

Voir chapitre VII

Rappel sur les opérateurs quantiques

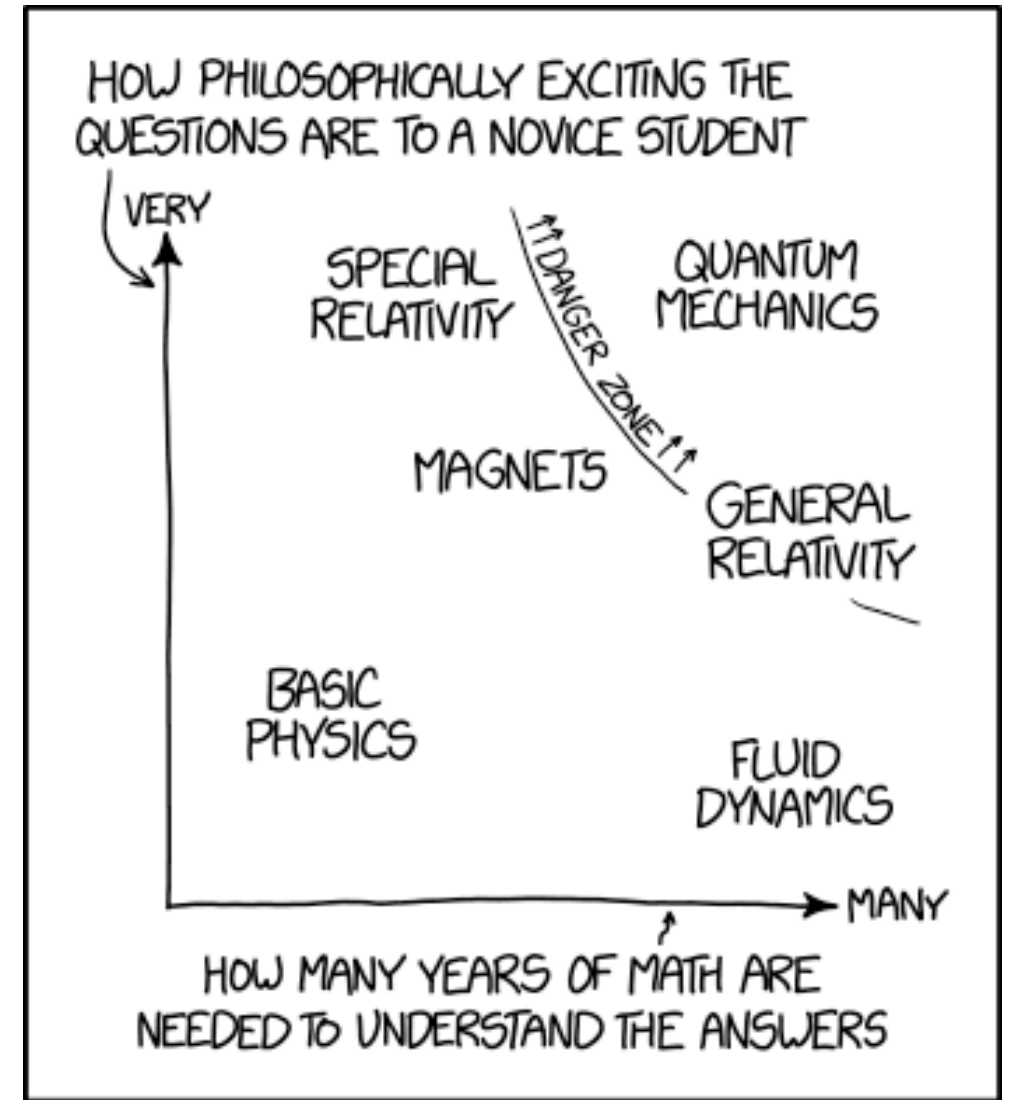
Un opérateur applique une opération mathématique (multiplication, dérivation, intégration, etc...) sur une fonction donnée pour donner une nouvelle fonction.

Opérateur
 \hat{F}



Nom	Variable classique	Opérateur quantique	Opération sur Ψ
Position	x	$\hat{x} \rightarrow x$	Multiplier par x
Potentiel $V(x)$ ou toute fonction $f(x)$	V	$\hat{V} \rightarrow V(x)$	Multiplier par $V(x)$ (par exemple multiplier par $\frac{1}{2}kx^2$)
Energie cinétique	E_{cin}, K	$\hat{T}, \hat{K} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$	Prendre la dérivée seconde par rapport à x
Hamiltonien (indépendant du temps)	H	$\hat{H} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V}(x)$	Prendre la dérivée seconde par rapport à x et ajouter un terme multiplié par $V(x)$
Hamiltonien (dépendant du temps)	H	$\hat{H} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$	Prendre la dérivée de Ψ par rapport au temps et multiplier par $i\hbar$
Hamiltonien (dépendant du temps)	H	$\hat{H} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$	Prendre la dérivée de Ψ par rapport au temps et multiplier par $i\hbar$
Impulsion / quantité de mouvement (ici selon x)	p_x	$\hat{p}_x \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$	Prendre la dérivée de Ψ par rapport à x et multiplier par $-i\hbar$

Pour aller plus loin



WHY SO MANY PEOPLE HAVE WEIRD IDEAS ABOUT QUANTUM MECHANICS

Réflexions philosophiques

Moi aussi je suis
quantique? Je suis ici
et partout à la fois?

Non, la décohérence (effondrement de la fonction d'onde) apparaît très rapidement à mesure que le nombre de particules augmente (ou que l'agitation thermique domine) même si de nombreux phénomènes macroscopiques ne s'expliquent que par la physique quantique.

Au final, c'est une
théorie probabiliste,
tout ça c'est du pif!

Alors peut être mais surtout non!

La physique quantique permet de prévoir la probabilité d'obtenir tel ou tel résultat d'une expérience mais elle le fait avec une incroyable précision. C'est même la théorie la plus précise que les physiciens ont!

Quand on répète un grand nombre de fois les mesures, elles collent aux probabilités au milliardième près.

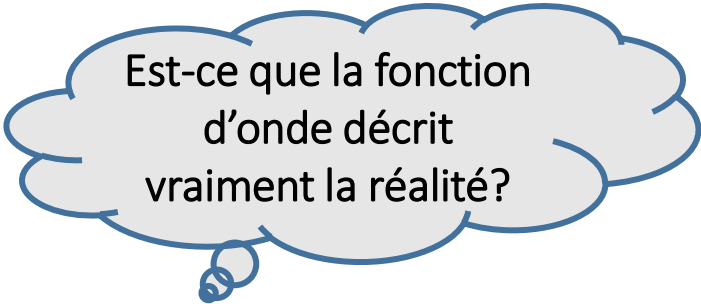
« Dieu ne joue
pas aux dés! »
Einstein à Bohr

« Mais qui êtes-vous,
Albert Einstein, pour dire à
Dieu ce qu'il doit faire ? »

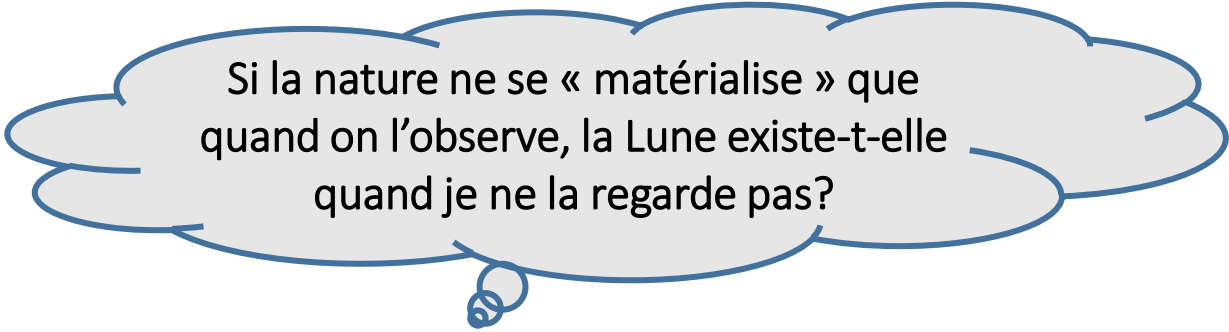
Bohr à Einstein



Réflexions philosophiques



Est-ce que la fonction d'onde décrit vraiment la réalité?



Si la nature ne se « matérialise » que quand on l'observe, la Lune existe-t-elle quand je ne la regarde pas?

Contrairement à d'autres théories physiques, descriptives, qui cherchent à comprendre la nature et à prévoir ses phénomènes, la mécanique quantique est une théorie de la prédiction: son unique objectif est de prédire les résultats des expériences qu'on lui soumet.

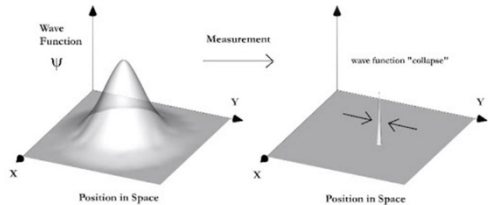
Le formalisme utilisé en mécanique quantique ne décrit pas ce qui se passe pendant l'expérience, il ne parle jamais de la réalité.

Cette interprétation dominante et pragmatique, dite de Copenhague, ne peut parler que de ce qui est mesurable, observable, la réalité est une notion naïve qu'il est presque puéril de rechercher (positivisme ou opérationnalisme extrême).

Mais il existe d'autres interprétations

Interprétations de la méca Q

Interprétation de Copenhague



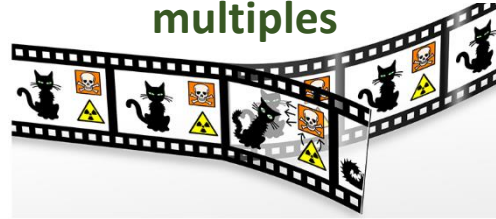
probability wave → collapse

« *shut up and calculate!* »

Feynman

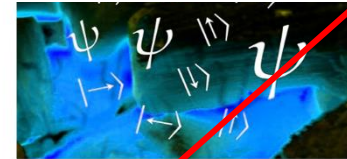
Non déterministique

Interprétation des mondes multiples



Tout les états possibles
coexistent dans un
multivers

Théorie des variables cachées?



On ne sait pas (encore) tout

« *Dieu ne joue pas aux dés* »

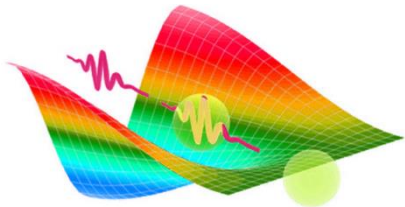
Déterministique

Professor Wheeler: "Feynman, I know why all electrons have the same charge and the same mass"

- "Why?"

- "Because, they are all the same electron!"

Théorie de De Broglie-Bohm

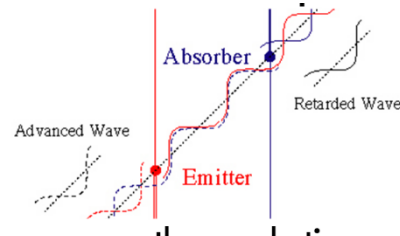


Onde pilote

Déterministique

Non locale

Interprétation transactionnelle



Ondes dans les deux sens
du temps

théorie retro causale



QBism



reality is observation
participatory realism
subjective Bayesianism

Superdeterminism



everything is predetermined
Bell's theorem loophole
quantum fuzziness is not real

Ensemble Interpretation

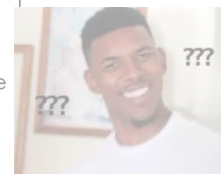


probabilities in groups
minimalist
statistics go brrr

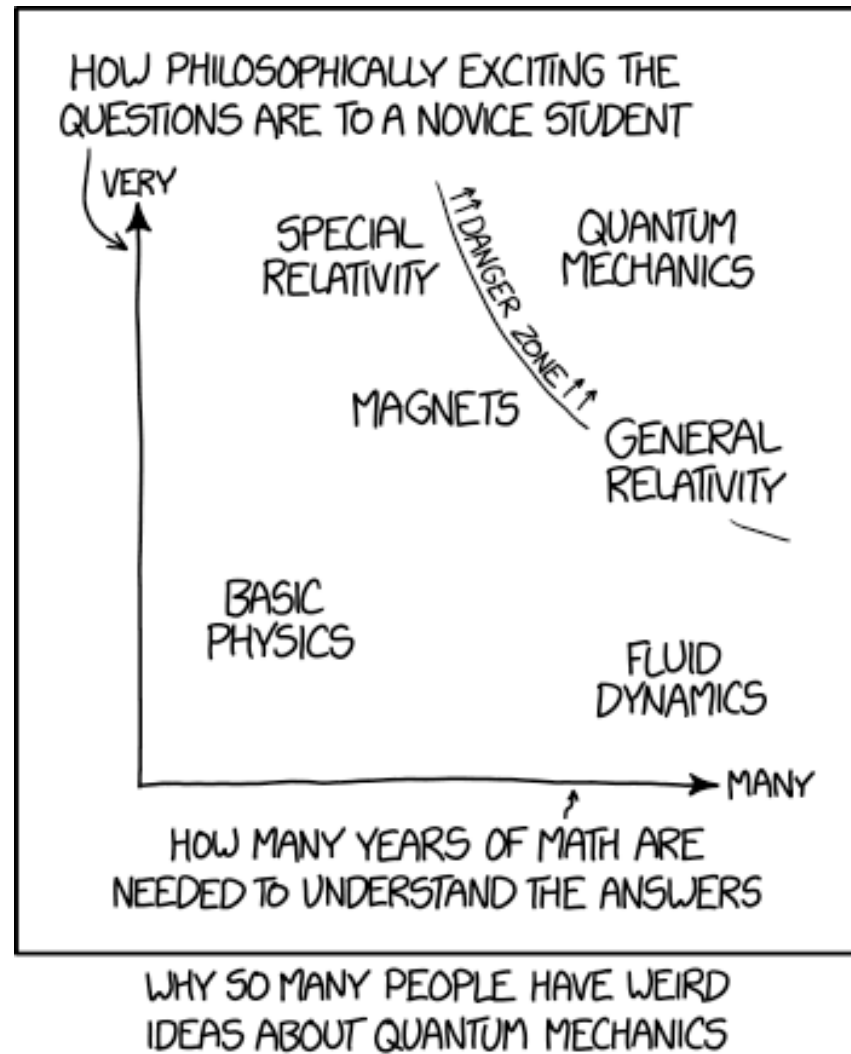
Quantum Mysticism



consciousness causes collapse
spooky
Philosophy > Physics



Interprétations de la méca Q



Présentation des différentes interprétations (en anglais)

<https://youtu.be/mqofuYCz9gs>

<https://youtu.be/XQ25E9gu4qI>

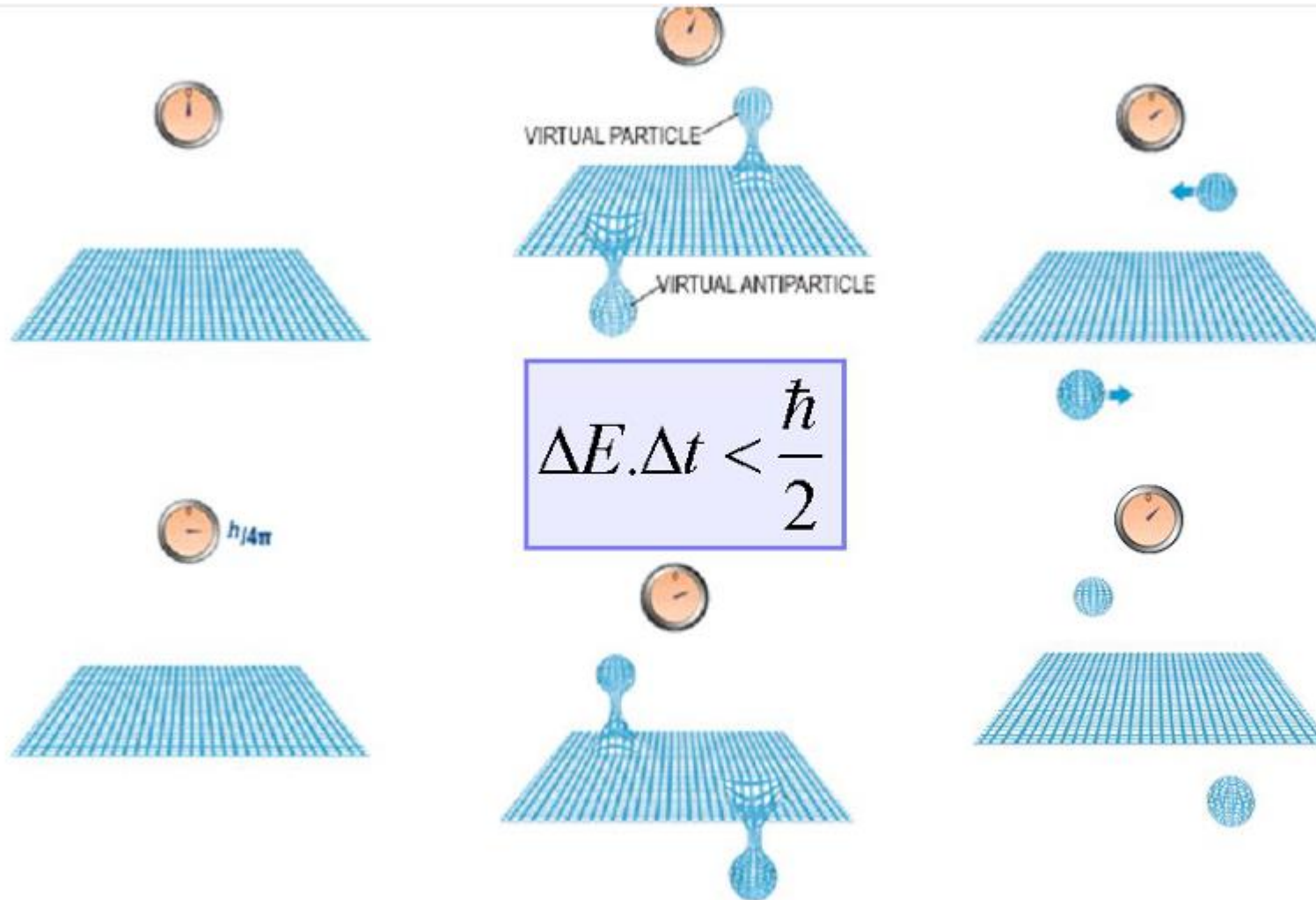
Playlist complète de PBS Space Time:

https://www.youtube.com/watch?v=wxG5KMAFi_k&list=PLsPUh22kYmNCGaVGuGfKfJl-6RdHiCjo1&ab_channel=PBSSpaceTime

Conférence d'Etienne Klein (en français)

<https://youtu.be/pXPjMSp48JY>

Une autre conséquence surprenante du principe d'indétermination d'Heisenberg



Le vide ne peut pas
être vide!

Il est rempli de

particules virtuelles

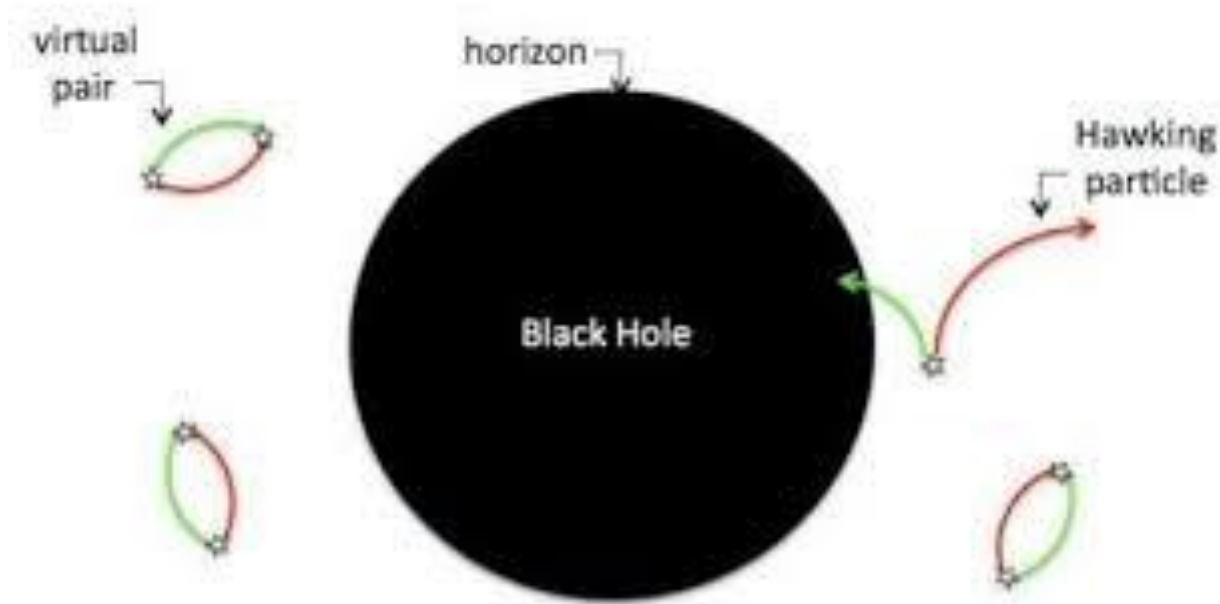
(Paires de particules et d'antiparticules
qui se créent et s'annihilent sans cesse)

Une autre conséquence surprenante du principe d'indétermination d'Heisenberg

ces

particules virtuelles

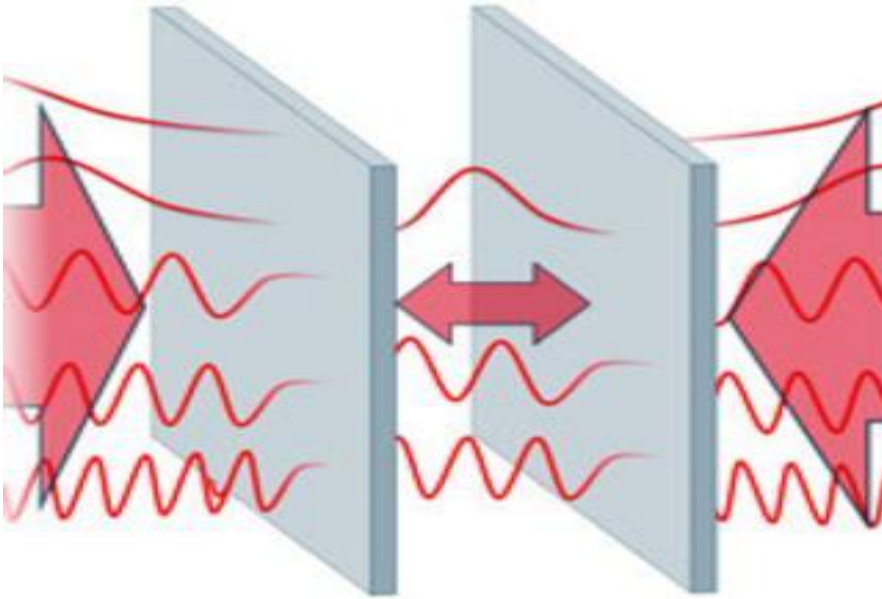
font évaporer les
trou noirs



Vision simpliste du rayonnement de Hawking autour d'un trou noir

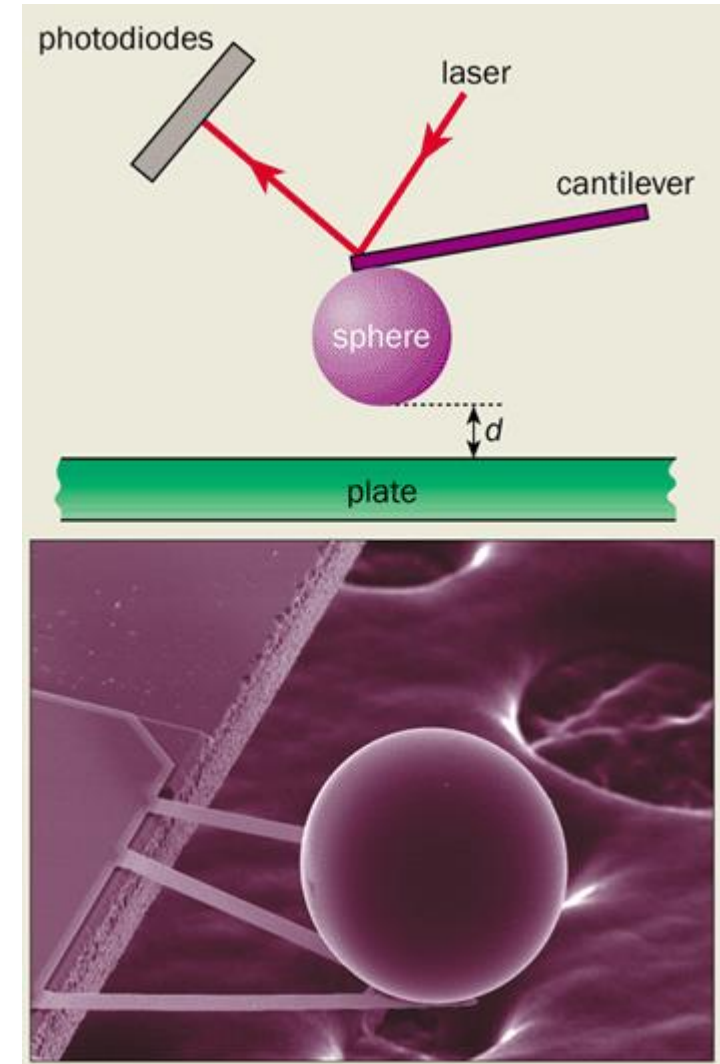


Une autre conséquence surprenante du principe d'indétermination d'Heisenberg



Effet Casimir

Force attractive entre deux plaques parallèles placées dans le vide





WEB

- 1 Comment participer ?
Connectez-vous sur www.wooclap.com/PKUUFx
- 2 Vous pouvez participer



SMS

- 1 Pas encore connecté ? Envoyez **@PKUUFx** au
06 44 60 96 62
- 2 Vous pouvez participer

Quiz à refaire à la
maison

<https://app.wooclap.com/PKUUFx>

