3. Equation de Schrödinger

a. Enoncé de l'équation

Généralisant l'approche de De Broglie, l'équation de Schrödinger est établie en 1925. La Mécanique Quantique à proprement parler possèdes désormais ses bases théoriques. L'équation de Schrödinger est valable pour des particules possédant une masse, et non-relativistes. L'équation de Schrödinger *indépendante du temps* a pour expression :

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

Cette équation a pour inconnue ψ, la fonction d'onde associée à la particule, que l'on peut voir comme la fonction qui « contient » l'information sur l'état de la particule. Elle permet de trouver la forme des solutions ψ de la fonction d'onde dans le cas étudié, et de trouver les valeurs de l'énergie E accessibles, c'est-à-dire les niveaux quantifiés d'énergie[1].

Dans les exercices, la résolution de l'équation de Schrödinger nous donnera accès aux différents niveaux d'énergie, ainsi qu'aux fonctions d'onde associées à la particule occupant chacun de ces niveaux d'énergie.

$\mathcal{H}$ désigne l'opérateur hamiltonien, qui, dans ce contexte a pour expression :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$$

$\hbar$ est la constante de Planck, m la masse de la particule.

Δ désigne l'opérateur laplacien scalaire, liées aux dérivées partielles secondes de la fonction scalaire à laquelle il s'applique.

Opérateur laplacien scalaire en coordonnées cartésiennes :

$$1D : \Delta = \frac{d^2}{dx^2} \;;\quad 3D : \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

V désigne quant à lui le potentiel auquel est soumis la particule. Concrètement, dans les exercices de ce chapitre, celui-ci vaudra 0 là où l'on veut autoriser à aller, et $+\infty$ là où l'on veut l'en interdire. On parlera de « barrière/frontière de potentiel ».

Au bilan, l'équation de Schrödinger appliquée à la fonction d'onde ψ s'exprime :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi$$

b. Densité de probabilité de présence

Comme dit plus haut, la fonction d'onde ψ associée à la particule contient l'information sur l'état de celle-ci. Elle dépend notamment d'un ou plusieurs entiers appelés « nombres quantiques » permettant d'indexer les niveaux d'énergie successifs, comme dans le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène.

[1] On parle d'équation aux valeurs propres de l'opérateur $\mathcal{H}$.

La Mécanique Quantique repose sur un principe probabiliste : la particule ne possède pas une localisations précise, ni de trajectoire. Elle a une densité de probabilité de présence dans tout l'espace.

Si l'on veut calculer la densité de probabilité de présence de la particule, il s'agit de la fonction $|\psi|^2$.

En intégrant cette fonction sur un certain domaine de l'espace, l'on obtient la probabilité d'y trouver la particule. Par exemple, en 1D, la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[a, b]$ vaut :

$$\int_a^b |\psi(x)|^2 \mathrm{dx}$$

Enfin, la particule se trouvant bien quelque part dans l'espace, l'on a la propriété ci-dessous (en1D), appelée *condition de normalisation* de la fonction d'onde ψ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{dx} \ = 1$$

Remarque : si l'on sait par exemple que la fonction d'onde est nulle sur]-∞ ;0] (par exemple si la particule ne peut pas s'y trouver en raison d'une barrière de potentiel infini), cette condition devient :

$$\int_0^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \ = 1$$