Équation de Schrödinger

Mécanique Quantique

Hossein Rahimzadeh

8/31/2008

Équation de Schrödinger

Équation de Schrödinger :

$$\hat{H}\left|\Psi\right\rangle = \hat{E}\left|\Psi\right\rangle$$

Où,

- $\left|\Psi\right\rangle$: La fonction d'onde d'un système
- $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$: L'opérateur Hamiltonien du système
- $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$: L'opérateur d'énergie

En une dimension :

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

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

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

Soit $\psi'(x,t)$ une solution particulière de cette équation, par la méthode de séparation des variables on pose :

$$\psi'(x,t) = u(x)T(t)$$

On dérive :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\psi'(x,t) = T(t)\dfrac{d^2}{dx^2}u(x) \\ \dfrac{\partial}{\partial t}\psi'(x,t) = u(x)\dfrac{d}{dt}T(t) \end{cases}$$

On substitut dans l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}T(t)\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)T(t) = i\hbar u(x)\frac{d}{dt}T(t)$$

On divise par $\psi'(x,t) = u(x)T(t)$:

$$\frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)\right] = \frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t)$$

Les termes de chaque côté de cette équation doivent être constante.

$$\underbrace{\frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)\right]}_{cte=E} = \underbrace{\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t)}_{cte=E}$$

Le terme à droite :

$$\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{d}{dt}T(t) = E \Rightarrow \frac{dT(t)}{T(t)} = -\frac{iE}{\hbar}dt \Rightarrow T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Le terme à gauche :

$$\frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x)\right] = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$$

C'est l'équation de Schrödinger indépendante du temps en une dimension.

C'est une équation aux valeurs propres car :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]u(x)=Eu(x)\text{, ou }\hat{H}u(x)=Eu(x)$$

Solution

- Les fonctions propres : $u_n(x)$ on le trouve par résolution d'une Équation différentiel.
- Les valeurs propres E_n on les détermine par les conditions frontières.
- La solution : $\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n u_n(x)$
- On trouve C_n :

$$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n u_n(x)$$

On multiplie par $u_m^*(x)$:

$$u_m^*(x)\psi(x)=u_m^*(x)\sum_{n=1}^{\infty}C_n u_n(x)$$

On intègre :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx u_m^*(x)\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}dx u_m^*(x)\sum_{n=1}^{\infty}C_n u_n(x)$$

$$=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\int_{-\infty}^{+\infty}dx u_m^*(x)u_n(x)$$

$$=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\delta_{mn}$$

Alors :

$$\boxed{C_n=\int_{-\infty}^{+\infty}dx u_n^*(x)\psi(x)}$$

Ou bien :

$C_n = \left(u_n(x), \psi(x)\right)$

Donc :

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x) \quad où \quad C_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx u_n^*(x)\psi(x)$$

Et dans le temps :

$$\boxed{\psi(x,t) = \psi(x)T(t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad où \quad C_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx u_n^*(x)\psi(x)}$$

Signification physique de C_n

- La valeur moyenne de l'opérateur $\hat{H}$

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)\hat{H}\psi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)\hat{H}\sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)\sum_{n=1}^{\infty} C_n \hat{H} u_n(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x)\sum_{n=1}^{\infty} C_n E_n u_n(x)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} C_n E_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) u_n(x)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} C_n E_n \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx u_n^*(x)\psi(x)}_{C_n} \right]^*$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} C_n E_n C_n^*$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left|C_n\right|^2$$

Donc,

$$\boxed{\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left|C_n\right|^2}$$

- Les fonctions d'onde sont normales :

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \sum_{n=1}^{\infty} C_n u_n(x) = 1$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} C_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) u_n(x) = 1$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} C_n \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx u_n^*(x) \psi(x)}_{C_n} \right]^* = 1$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} C_n C_n^* = 1$$

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty} \left|C_n\right|^2 = 1}$$

Analogie :

Probabilité	Mécanique quantique
$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xP(x)dx$	$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \lvert C_n \rvert^2$
$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1$	$\sum_{n=1}^{\infty} \lvert C_n \rvert^2 = 1$

Alors, $\lvert C_n \rvert^2$ est la probabilité qu'une mesure de l'énergie de l'état $\psi(x)$ donne E_n :

$$\boxed{P(E_n) = \lvert C_n \rvert^2}$$

Ex :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-\frac{i5t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x)e^{-\frac{i3t}{\hbar}} + \frac{1}{2}\psi_3(x)e^{-\frac{i2t}{\hbar}}$$

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \lvert C_n \rvert^2 = 5\times\frac{1}{4} + 3\times\frac{1}{2} + 2\times\frac{1}{4} = \frac{13}{4}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \lvert C_n \rvert^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} = 1$$

La probabilité qu'une mesure de l'énergie de l'état $\psi(x)$ donne $E_1 = 5$ est :

$$P(E_1) = \lvert C_1 \rvert^2 = \frac{1}{4}$$

La probabilité qu'une mesure de l'énergie de l'état $\psi(x)$ donne $E_2 = 3$ est :

$$P(E_2) = |C_2|^2 = \frac{1}{2}$$

La probabilité qu'une mesure de l'énergie de l'état $\psi(x)$ donne $E_3 = 2$ est :

$$P(E_3) = |C_3|^2 = \frac{1}{4}$$

Deux possibilités pour équation de Schrödinger indépendante du temps

$E > V_0$	$E < V_0$
$\hat{H}u(x) = Eu(x)$	$\hat{H}u(x) = Eu(x)$
$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x)$	$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x)$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}u(x) = 0$	$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}u(x) = 0$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + k^2u(x) = 0$ où $k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$	$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - q^2u(x) = 0$ où $q^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$
$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ Où $k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$	$u(x) = Ae^{qx} + Be^{-qx}$ Où $q^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$
$u(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ Où $k^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$	$u(x) = A\sinh(qx) + B\cosh(qx)$ Où $q^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$
Oscillent	Exponentielle