|  |
| --- |
| www.pfonda.com |
| Équation de Schrödinger en 3D |
| Mécanique Quantique |
|  |
| **Hossein Rahimzadeh** |
| **8/31/2008** |

Équation de Schrödinger en 3D

Équation de Schrödinger :



Où,

*  : La fonction d’onde du système en 3D
*  : L’opérateur Hamiltonien du système  
   : La masse réduite  
   : Le potentiel central (ne dépend pas des variables et)
*  : L’opérateur d’énergie

En trois dimensions :



En coordonnées sphérique :



Soit une solution particulière de cette équation, par la méthode de séparation des variables on pose :



On substitut dans l’équation de Schrödinger :





On divise par :



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



# Le terme à droite :



# Le terme à gauche :





C’est l’équation de Schrödinger indépendante du temps en trois dimensions.



Mais,



Donc,



On multiplie par  :



Par la méthode de séparation des variables on pose :



On substitut dans l’équation :





On multiplie par  :

Mais,



Donc :

 On divise par  :





On pose :



# Équation angulaire





Alors, son les fonctions propres de l’opérateur  (les harmoniques sphérique):



# Équation radiale



On multiplie par  :





On pose  :



Où  est l’énergie potentielle effective.

# Quand, équation radiale tend vers :



Et  car :









Selon le signe de on a deux cas possibles :

# Pour  :



La solution est une superposition linéaire de et.

# Pour  :



La solution est de la forme ou.

# Quand, équation radiale tend vers :



La solution est de la forme :



On substitut dans l’équation :



Donc, il faut que :



Ce qui implique que :



Mais avec la condition,



La solution sera de la forme 