PHYS-H-200 Physique quantique et statistique
Chapitre 3: l'équation de Schrödinger

Jean-Marc Sparenberg
Université Libre de Bruxelles

2011-2012

1. Équations d’ondes libres : lumière/matière
2. Équation de Schrödinger d’une particule dans un puits potentiel

Électromagnétisme : formulation relativiste

- Unification électricité et magnétisme en relativité restreinte : quadrivecteur potentiel $A \equiv \left(\frac{V}{c}, \vec{A}\right)$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} V - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

- « Quadrigradient » ou dérivée covariante $\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \vec{\nabla}\right)$
  « Quadrilaplacien » ou d'Alembertien $\square \equiv \nabla^2$

$$\square = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \vec{\nabla}\right) \circ \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \vec{\nabla}\right) = \frac{\partial^2}{c^2\partial t^2} - \Delta = \epsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

- Équations d'ondes $\square \vec{B} = 0$, $\left[\epsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] \vec{B} = 0$
  - invariantes relativistes ⇒ invariance c dans le vide
  - vectorielles (idem pour $\vec{E}$) et réelles
  - linéaires ⇒ combinaison linéaire de solutions = solution
  - aux dérivées partielles ⇒ résolution par transformée de Fourier (phaseurs), $\vec{k}$ = nombre d'onde, ω = fréquence angulaire/pulsation

$$\vec{B}_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \mathrm{Re}\left[\underline{\vec{B}_0} e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)}\right]$$

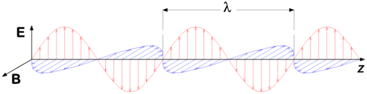
Électromagnétisme : ondes planes et paquets d'ondes

- Transformée Fourier : $\frac{\partial}{\partial t} \to \times(-i\omega)$, $\vec{\nabla} \to \times\left(i\vec{k}\right)$
  équation dérivées partielles → équation algébrique (rel. dispersion)

$$\Box\vec{B} = 0 \quad \to \quad -\frac{\omega^2}{c^2} + k^2 = 0 \iff \omega(k) = kc \iff \nu = \frac{c}{\lambda}$$

- Solutions particulières (séparables, factorisables) : ondes planes infinies, monochromatiques, vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega(k)}{k} = c$

$$\vec{B}_{\vec{k}}\left(\vec{r}, t\right) = \mathrm{Re}\left[\underline{\vec{B}_0}\left(\vec{k}\right) e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - kct\right)}\right]$$



[Citizendium]

- Solution générale : paquet d'onde = combili ondes planes localisé, polychromatique, vitesse de groupe $v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} = c$

$$\vec{B}\left(\vec{r}, t\right) = \int d\vec{k}\, \vec{B}_{\vec{k}}\left(\vec{r}, t\right) = \mathrm{Re}\left[\int d\vec{k}\, \underline{B_0}\left(\vec{k}\right) e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - kct\right)}\right]$$

- Dans le vide, pas de dispersion (rel. disp. linéaire) : $v_g = v_\varphi = c$

Équations d'onde d'une particule libre

- Particule libre : dans le vide, aucune interaction extérieure
- Masse nulle : photon $\leftrightarrow$ onde électromagnétique
  énergie-impulsion $\Longleftrightarrow$ relation dispersion $\Longleftrightarrow$ équation d'onde

$$E^2 - p^2c^2 = 0 \Longleftrightarrow \omega^2 - k^2c^2 = 0 \Longleftrightarrow \Box\vec{B}(\vec{r},t) = 0$$

  $\Rightarrow$ suggère la règle de correspondance $E \to i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla}$
- Masse non nulle relativiste : équation d'onde de Klein-Gordon (1927)

$$E^2 - p^2c^2 = m^2c^4 \Longleftrightarrow -\hbar^2\Box\psi(\vec{r},t) = m^2c^2\psi(\vec{r},t)$$

- Masse non nulle non relativiste : équation de Schrödinger (1925)

$$E \approx \frac{p^2}{2m} \Longleftrightarrow i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t)$$

  - zéro des énergies = énergie de masse
  - équation linéaire et complexe, ψ = fonction d'onde
  - premier ordre en $t \Rightarrow$ généralisation relativiste par Dirac (1928)
    $\Rightarrow$ spin 1/2 de l'électron, prédiction antimatière

Équation de Schrödinger : ondes planes

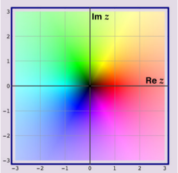
- Solutions particulières séparables $\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)}$

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) \quad \Rightarrow \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

  relation de dispersion non linéaire

- Interprétation de l'onde plane
  - fonction complexe $\Rightarrow$ représentation module (intensité) et phase (couleur)
  - direction propagation fronts d'onde : $\vec{k}$
  - vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$

  $\Rightarrow$ mouvement rectiligne uniforme

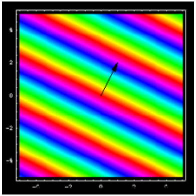


- Exemple 1 dimension $\psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$

  Fronts d'onde se déplacent comme ($\omega > 0$)

$$kx - \omega t = \pm|k|x - \omega t = \text{constante}$$

  - $k > 0$: vers la droite
  - $k < 0$: vers la gauche



[Visual Quantum Mechanics]

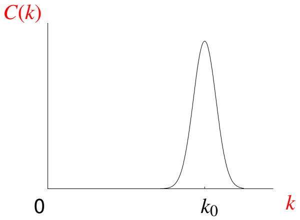
Équation de Schrödinger : paquets d'ondes

- Solution générale (une dimension) : combinaison linéaire des ψ_k

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k)\, e^{i[kx-\omega(k)t]}\, dk$$

  - $C(k)$ = fonction complexe arbitraire
  - Exemple : paquet d'ondes gaussien

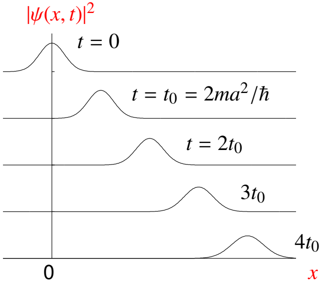
$$C(k) \propto e^{-a^2(k-k_0)^2}$$



- Relation dispersion non linéaire
  - vitesse de groupe (vitesse particule ?)

$$v_g(k) = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \left(= \frac{p}{m}\right)$$

  - vitesse de phase dépend de k
    $\Rightarrow$ étalement du paquet d'ondes
    (premier problème d'interprétation)



Particule dans un puits de potentiel

- Mécanique classique non relativiste : $E = T + V(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = H$ où $H(\vec{r},\vec{p})$ = fonction hamiltonienne
- Règle de correspondance (cf ondes libres) : $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla}$
- Équation de Schrödinger

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t) \end{aligned}$$

- Énergie cinétique : opérateur différentiel $T = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
- Énergie potentielle : opérateur multiplicatif $V(\vec{r})$
- Énergie totale : opérateur hamiltonien $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$
- Zones interdites : $V(\vec{r}) = \infty \Rightarrow$ conditions aux limites $\psi(\vec{r},t) = 0, \forall t$
  $\Rightarrow$ diffraction et séparation du paquet d'ondes
  (deuxième problème interprétation)

Équation de Schrödinger stationnaire

- Potentiel V indépendant du temps $\Rightarrow$ séparation des variables :

  on pose $\psi(\vec{r}, t) = \chi(t)\varphi(\vec{r})$ dans $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi$

$$\begin{aligned} i\hbar\, \varphi(\vec{r})\, \frac{d}{dt}\chi(t) &= \chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r}) \\ \Rightarrow \quad \underbrace{i\hbar\, \frac{1}{\chi(t)}\, \frac{d\chi(t)}{dt}}_{\text{dépend de } t} &= \underbrace{\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r})\right]}_{\text{dépend de } \vec{r}} \equiv E \end{aligned}$$

- Constante de séparation E = énergie de la particule (cf ondes planes)

  $\Rightarrow$ dépendance temporelle $i\hbar\, \frac{d\chi}{dt} = E\chi \quad \Rightarrow \quad \chi(t) = \chi(0)e^{-iEt/\hbar}$
- Dépendance spatiale : équation de Schrödinger stationnaire (indépendante du temps) $\Rightarrow$ solution stationnaire $\varphi(\vec{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}), \qquad H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

  (cf modes propres de vibration d'une corde)
- Solutions particulières séparables (une énergie) $\quad \psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\varphi(\vec{r})$

  $\Rightarrow$ solution générale : combinaison linéaire (plusieurs énergies)