

Mécanique Quantique

L3 - Physique 2021-2022

Paul-Antoine Hervieux
Unistra/IPCMS
hervieux@unistra.fr

3) Equation de Schrödinger et fonction d'onde

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.1 Introduction

Articles fondateurs: Erwin Schrödinger, *Annalen der Physik* **79**, (1926). Recueil de tous les articles (sept en tout) de Schrödinger traduits en français par Alexandre Proca dans: *Mémoires sur la mécanique ondulatoire*, librairie Alcan (1933) [réédition Jacques Gabay].

Cette équation est postulée. Seuls ses succès à rendre compte des résultats expérimentaux confirmeront sa validité. Il y a dix formulations (équivalentes) de la mécanique quantique:

- Formulation matricielle (Heisenberg 1925)
- Formulation en terme de fonction d'onde (Schrödinger 1926)
- Seconde quantification (Dirac 1927)
- Matrice densité (Von Neumann 1927)
- Formulation variationnelle (Jordan-Klein 1927)
- Espace des phases (Wigner 1932)
- Formulation en terme d'intégrale de chemin (Feynmann 1945)
- Onde pilote (De Broglie-Bohm 1952)
- Approche stochastique (Edward Nelson 1967)
- Hamilton-Jacobi (Leacock 1983)

Equation de Schrödinger et f.o.

- (1) Formulation matricielle (1925); Werner Heisenberg (1901-1976)



- (2) Formulation en terme de fonction d'onde (1926) ;
Ervin Schrödinger (1887-1961)



C'est elle que nous verrons !

Equation de Schrödinger et f.o.

- (3) Seconde quantification (1927); Paul-Adrien-Maurice Dirac

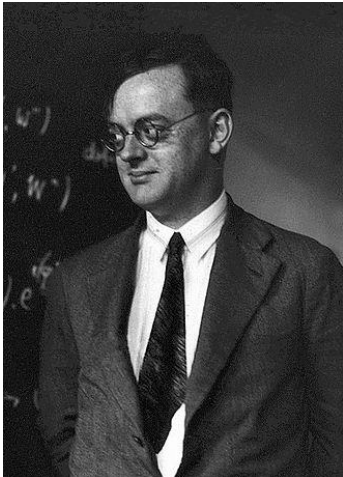


(1902-1984)

- (4) Formulation variationnelle (1927); P. Jordan- O. Klein

(1902-1980)

(1894-1977)

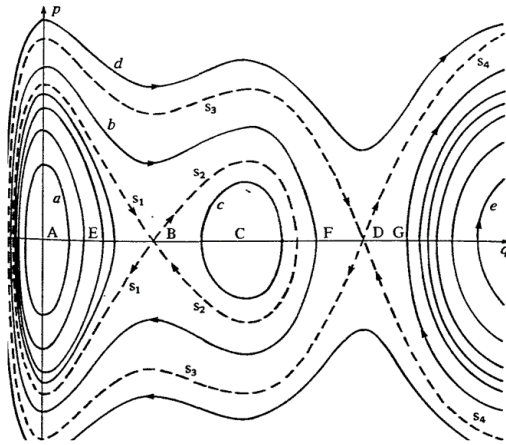


Lagrangien...

Equation de Schrödinger et f.o.

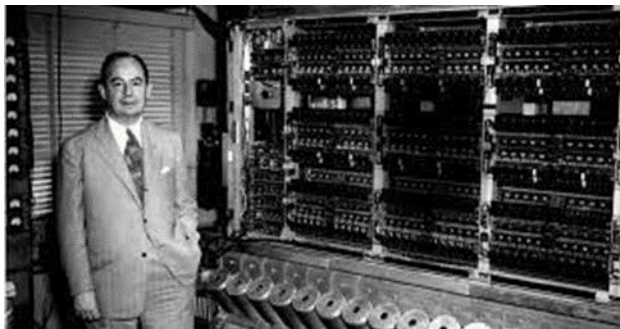
- (5) Espace des phases (1932); Eugene Wigner

Fonction de distribution de Wigner: $W(x,p)$



(1902-1995)

- (6) Matrice densité Von Neumann (1927)



(1903-1957)



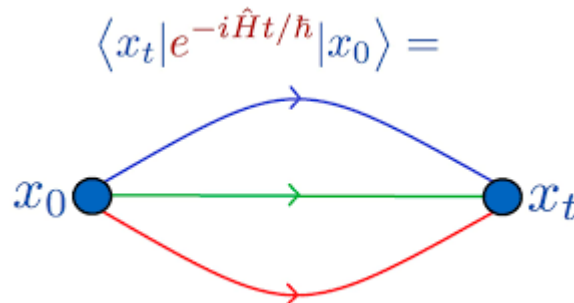
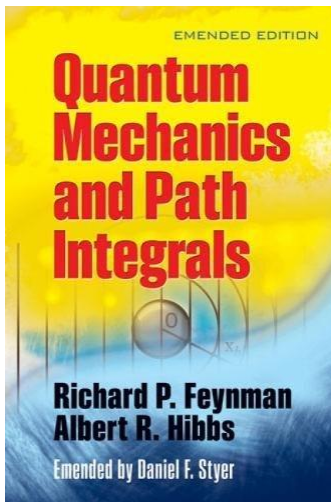
Equation de Schrödinger et f.o.

- (7) Onde pilote (Louis de Broglie (1927); David Bohm (1952))



(1917-1992)

- (8) Intégrale de chemin (1945); Richard Feynmann



(1918-1988)

Equation de Schrödinger et f.o.

➤ (9) Hamilton-Jacobi & Action-Angle (1983); Robert A. Leacock

➤ (10) Approche stochastique; Edward Nelson



(1932-2014)

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.2 Equation de Schrödinger pour une particule libre

Faute de description physique de l'onde associée à une particule, il semble que cette onde soit localisée au voisinage du corpuscule. Soit $\Psi(\vec{r}, t)$ cette onde.

Onde localisée $\Leftrightarrow$ train d'ondes ou paquet d'ondes $\Psi(\vec{r}, t) \Leftrightarrow$ superposition linéaire d'ondes planes.

Remarque: On appelle ondes de de Broglie $\Psi_0 e^{-i(Et - px)/\hbar}$. Il est important de remarquer que ces ondes n'étant pas normalisées elles ne peuvent pas représenter l'état d'une particule d'où la notion de paquet d'ondes.

Soient ω et $\vec{k}$ les fréquences angulaires et les vecteurs d'onde. On peut écrire de manière générale:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int f(\omega) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d\omega \quad (1)$$

ou $f(\omega)$ est le spectre et avec les relations de Planck-de Broglie ($E = \hbar\omega, \vec{p} = \hbar\vec{k}$) l'expression (1) devient

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int f(\omega) e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} d\omega . \quad (2)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

On a $\vec{p} : (p_x, p_y, p_z)$ et donc $\vec{p} \cdot \vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$. Soit l'opérateur différentiel laplacien en coordonnées cartésiennes $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ (svp revoir les différentes expressions de cet opérateur dans d'autres systèmes de coordonnées). On a:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi \quad (3)$$

$$\Delta \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad (4)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = \int f(\omega) \left(E - \frac{p^2}{2m}\right) e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} d\omega. \quad (5)$$

Si on suppose que la particule se déplace librement alors $E = \frac{p^2}{2m}$ et donc

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t). \quad (6)$$

C'est l'équation de Schrödinger pour une particule libre dans un état quelconque d'énergie E .

Remarque: le raisonnement ci-dessus reste valable avec $\Psi(\vec{r}, t) = \int g(\vec{k}) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d\vec{k}$ au lieu de l'expression (1). A une dimension (propagation selon une seule direction x) cela donne: $\Psi(x, t) = \int g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk$.

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.3 propagation d'un paquet d'ondes: vitesse de groupe

Pour simplifier on va faire un raisonnement à une dimension. Considérons une superposition linéaire d'ondes planes de la forme

$$h(x, t) = \int e^{-i(\omega t - kx)} g(k) dk , \quad (7)$$

où $\omega = \omega(k)$ est fonction de k (relation de dispersion e.g. $\omega = ck$ pour une onde électromagnétique dans le vide) et où $g(k)$ est choisi de telle façon que $\int |g(k)|^2 dk = \int |h(x, t)|^2 dx = 1 \forall t$. Remarque: $e^{-i(\omega t - kx)}$ est une onde progressive.

On fait l'hypothèse que l'étalement de la fonction $g(k)$ autour de son centre $k_0 = \int k |g(k)|^2 dk$ est suffisamment faible pour que le développement au premier ordre (en k autour de k_0) soit valable pour toutes les valeurs de k où $g(k)$ prend des valeurs non négligeables (car on utilise un développement en série de Taylor).

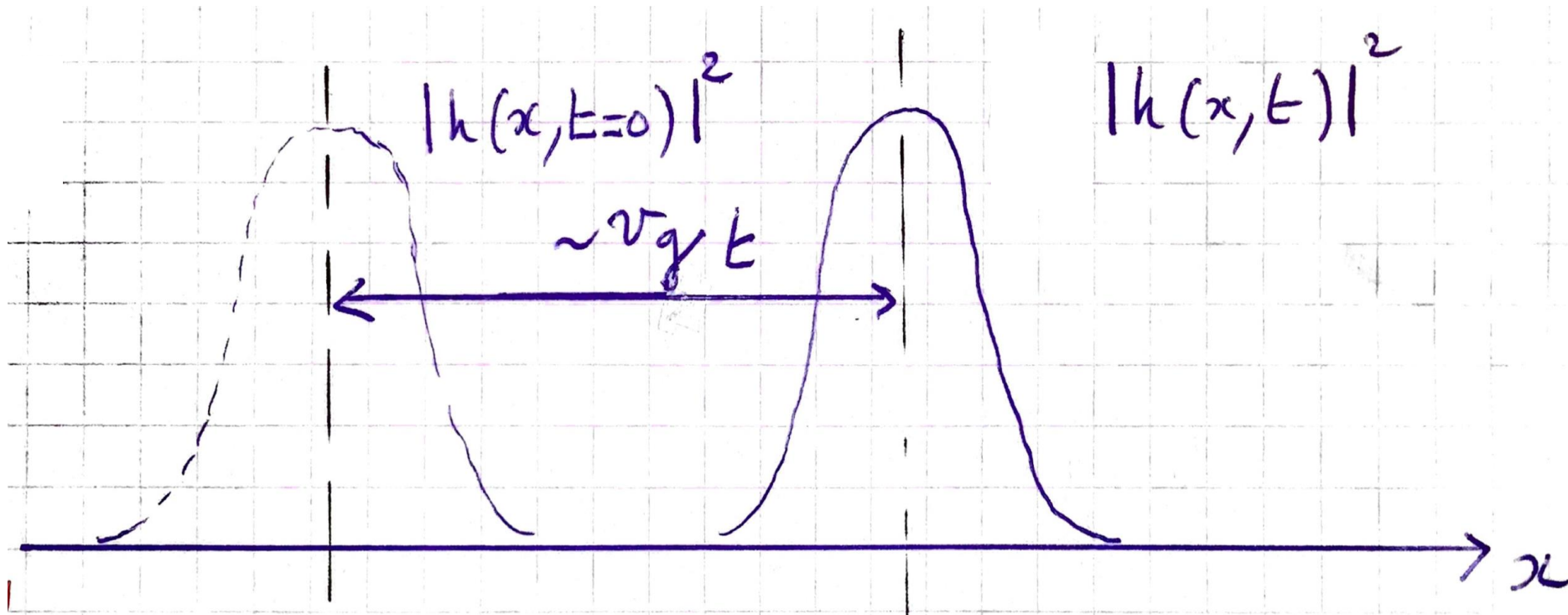
$$\omega(k) \simeq \omega_0 + v_g(k - k_0) , \quad (8)$$

avec $\omega_0 = \omega(k_0)$ et $v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}$.

En reportant (8) dans (7) on obtient:

$$h(x, t) \simeq e^{i(k_0 v_g t - \omega_0 t)} h(x - v_g t, 0) , \quad (9)$$

Equation de Schrödinger et f.o.



Très bonne illustration de la dynamique d'un paquet d'ondes gaussien à
l'adresse: <http://subaru.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/paquet.html>

Equation de Schrödinger et f.o.

d'où

$$|h(x, t)|^2 \simeq |h(x - v_g t, 0)|^2 . \quad (10)$$

Cette équation démontre que la probabilité de présence en mécanique quantique se propage le long de l'axe x à la vitesse v_g ! v_g est appelé vitesse de groupe. Cette vitesse est en générale différente de la vitesse de phase des ondes progressives monochromatiques qui forment le paquet d'ondes: $v_\varphi = \omega/|k|$.

Pour des ondes de de Broglie $\Psi_0 e^{-i(Et - px)/\hbar}$ on a $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ d'où

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \text{et} \quad \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} . \quad (11)$$

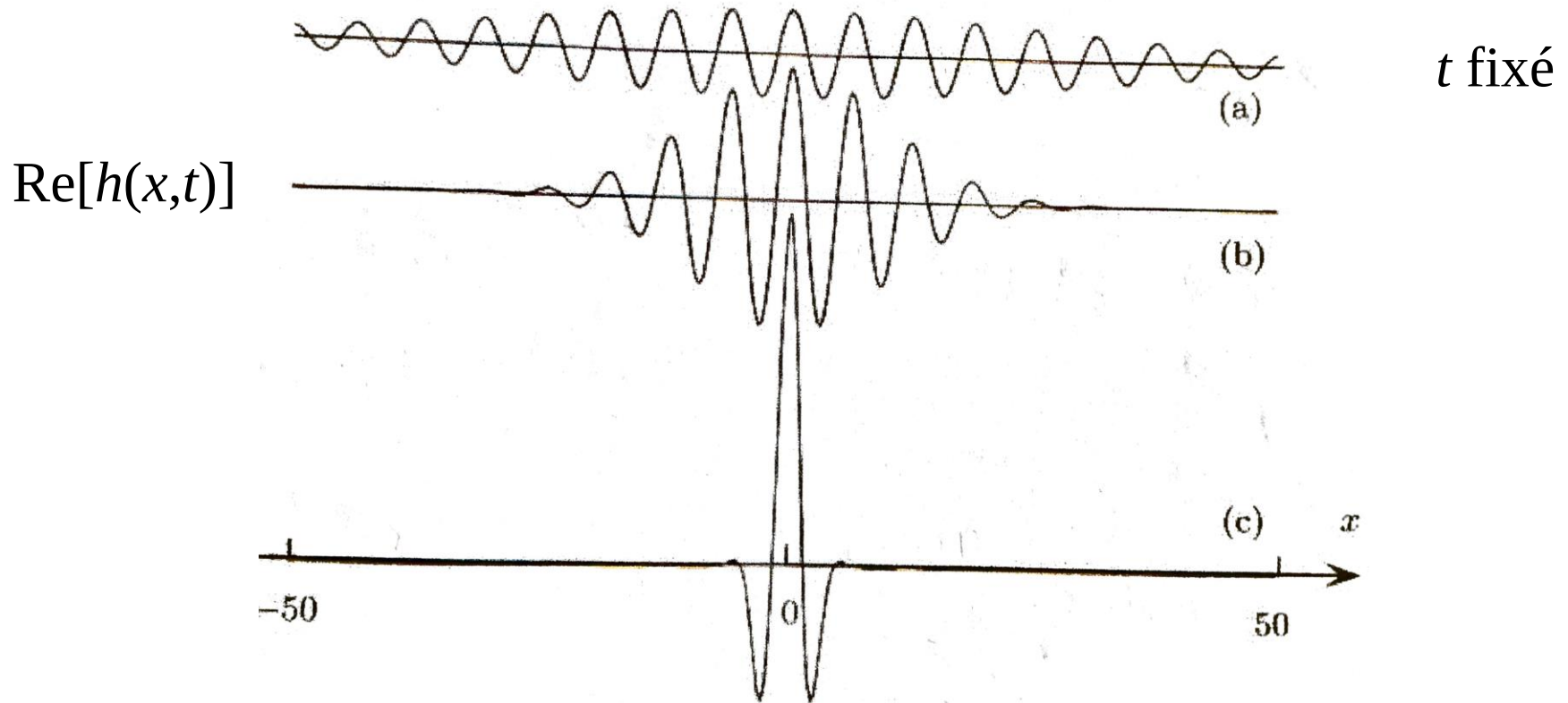
Si la largeur Δp de $|\varphi(p)|^2$ (Δk de $|g(k)|^2$) est petite devant la valeur moyenne p_0 (k_0) on a

$$v_g = p_0/m \quad \text{et} \quad p_0 = \hbar k_0 . \quad (12)$$

Ainsi la vitesse de propagation du paquet d'ondes est celle d'une particule classique d'impulsion (de quantité de mouvement) égale à la valeur moyenne du paquet d'ondes.

Un milieu dispersif est un milieu où la vitesse de phase dépend de la longueur d'onde. Par exemple si $\omega = ck$ on a $v_\varphi = c = \text{constante}$. Ainsi le vide est un milieu non-dispersif. Si $v_g = v_\varphi$ alors le milieu est non-dispersif. Pour une onde de de Broglie libre (1D) on a: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \Rightarrow \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = v_\varphi \Rightarrow$ dispersif. La vitesse de phase dépend de k , on a donc un milieu dispersif.

Equation de Schrödinger et f.o.

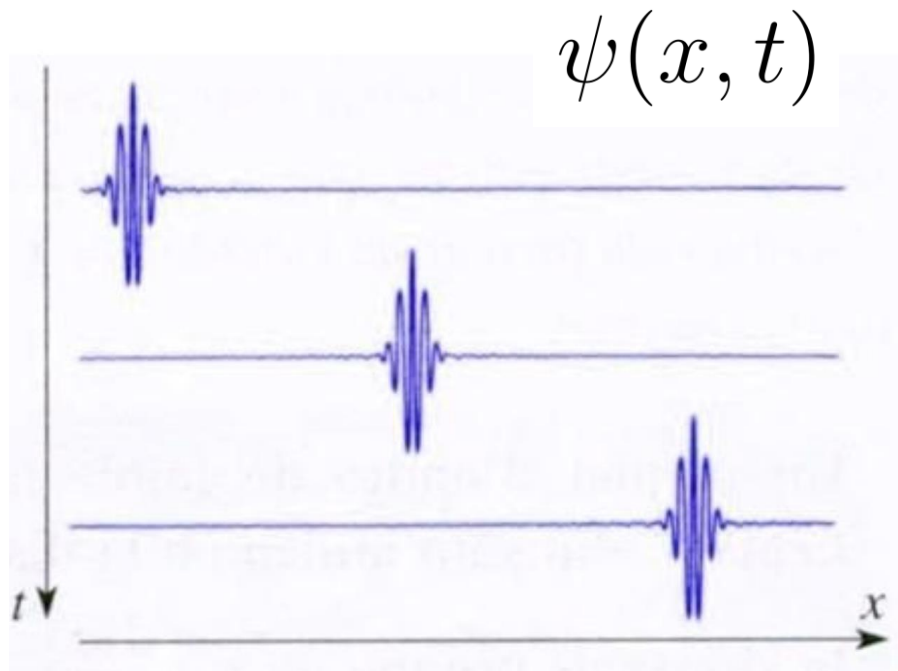


Paquet d'ondes gaussien 1D: $g(k) = \frac{1}{\sqrt{\Delta k}(2\pi)^{1/4}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4(\Delta k)^2}}$.

On a $\int g(k)g^*(k)dk = 1$. 3 cas sont considérés:

1. $\Delta k = k_0/50$ grand étalement en $x \Rightarrow$ très localisée en k .
2. $\Delta k = k_0/10$ cas intermédiaire.
3. $\Delta k = k_0/2$ onde localisée spatialement $\Rightarrow$ très étalée en k .

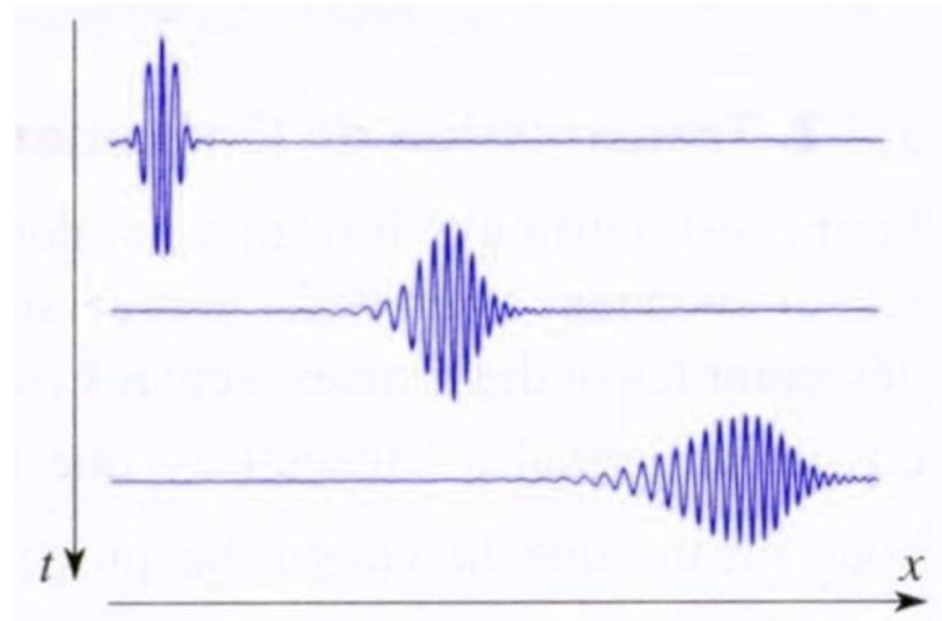
Equation de Schrödinger et f.o.



Milieu non dispersif

$$v_g = v_\varphi$$

v_φ vitesse de phase de l'onde



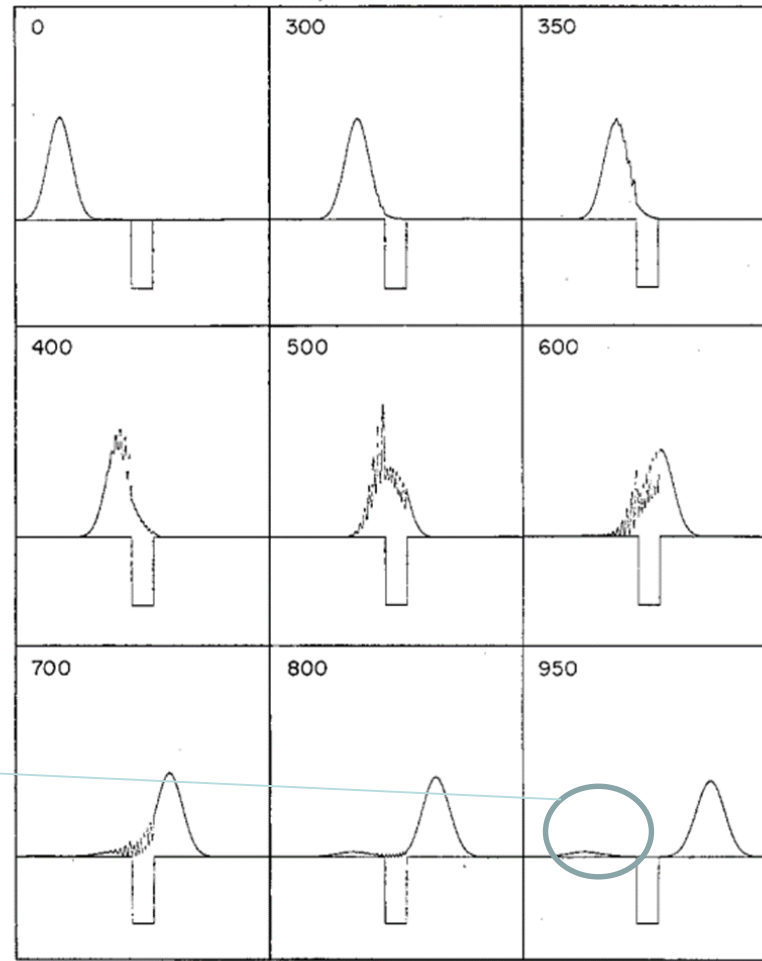
Milieu dispersif

$$v_g \neq v_\varphi$$

v_g vitesse de groupe de l'onde

Equation de Schrödinger et f.o.

Réflexion et transmission
sur un puits



Totalement non classique !

FIG. 2. Gaussian wave-packet scattering from a square well. The average energy is equal to the well depth. Numbers denote the time of each configuration in arbitrary units.

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.4 règles de correspondance

Si on compare l'équation classique

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (13)$$

avec

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) \quad (14)$$

on voit qu'à chaque grandeur classique correspond un **opérateur différentiel** agissant sur la fonction d'onde Ψ . Ainsi:

$$\left\{ \begin{array}{l} E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p}^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta \implies \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \quad (\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) \end{array} \right. \quad (15)$$

En particulier: $p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$; $p_y \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$; $p_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$.

Avec ces règles on peut à partir de l'équation classique $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ obtenir l'équation de Schrödinger (6).

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.5 Particule dans un potentiel scalaire

A l'énergie potentielle $U(\vec{r}, t)$ de la particule on fait correspondre l'opérateur $\hat{U}(\vec{r}, t)$ identique à son expression classique. On a ainsi:

$$\begin{aligned} E &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}(\vec{r}, t) \right) \Psi(\vec{r}, t) . \end{aligned} \quad (16)$$

En mécanique classique l'énergie $\frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}, t)$ s'appelle l'hamiltonien du système H . En mécanique quantique il lui correspond l'opérateur $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}$. Ainsi l'expression (16) est équivalente à

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) . \quad (17)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.6 Règles générales de formation de l'équation de Schrödinger

Pour N particules avec (x_i, y_i, z_i) les coordonnées cartésiennes de la particule i .
 $\hat{H}$ dépend de $3N$ coordonnées et de leurs impulsions respectives $(p_{x_i}, p_{y_i}, p_{z_i})$.
Classiquement on a

$$E = H(x_1, y_1, \dots, z_N; p_{x_1}, p_{y_1}, \dots, p_{z_N}, t) . \quad (18)$$

L'état dynamique du système quantique est représenté par une fonction $\Psi(x_1, y_1, \dots, z_N, t)$ définie dans l'espace à $3N$ dimensions (l'espace de configuration) et qui est solution de l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(x_1, y_1, \dots, z_N, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, y_1, \dots, z_N, t) . \quad (19)$$

3N dimensions

Remarque: L'espace des phases a $6N$ dimensions. L'équivalent de l'équation de Schrödinger s'appelle l'équation de Wigner. C'est une équation intégral-différentielle complexe.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{m} \mathbf{p} \cdot \nabla f = \frac{ie}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\lambda d\mathbf{p}' e^{\frac{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \lambda}{\hbar}} [V(\mathbf{r}_+) - V(\mathbf{r}_-)] f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t)$$

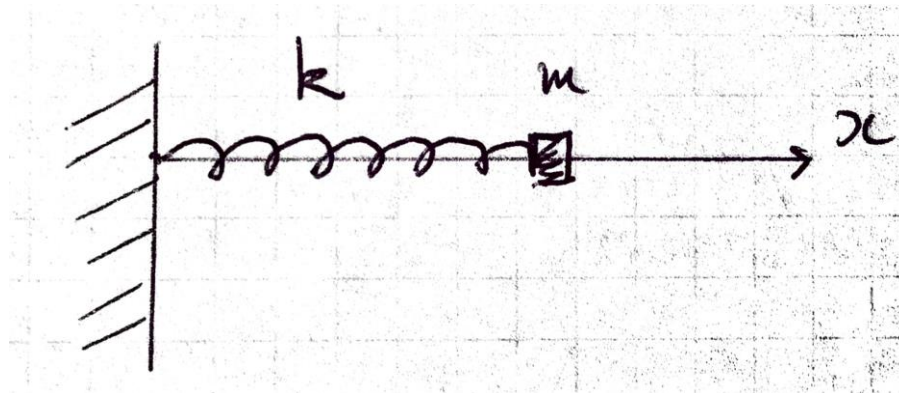
Fonction de distribution 6N dimensions

Equation de Schrödinger et f.o.

2 exemples

1) Oscillateur harmonique à 1 dimension

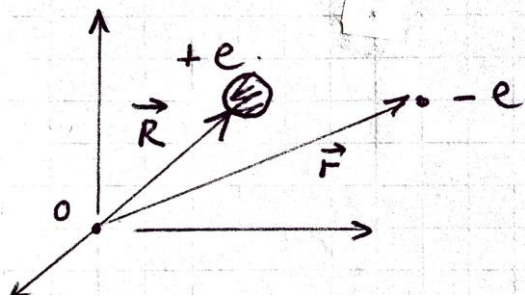
$$H(x; p_x, t) \longrightarrow H(x, p_x) = T + U = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 \right) \Psi(x, t)$$



Equation de Schrödinger et f.o.

2) L'atome d'hydrogène

Soient $\vec{R}$ le vecteur position du noyau = proton et $\vec{r}$ celui de l'électron. On a deux particules dans l'espace à trois dimensions. On a donc 6 coordonnées et 6 impulsions. Le proton a pour charge $+e$ avec ($e > 0$) et pour masse m_p et l'électron une charge $-e$ et une masse m_e . L'hamiltonien (l'opérateur hamiltonien) du système est



$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m_p} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\hat{\vec{R}} - \hat{\vec{r}}|}. \quad (21)$$

Soient Δ_R le laplacien relatif aux coordonnées de $\vec{R}$ et Δ_r le laplacien relatif aux coordonnées de $\vec{r}$. L'équation de Schrödinger a pour expression

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{R}, \vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\hat{\vec{R}} - \hat{\vec{r}}|} \right) \Psi(\vec{R}, \vec{r}, t). \quad (22)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.7 Propriétés de l'équation de Schrödinger

1. Superposition: si Ψ_1 et Ψ_2 sont des solutions de l'équation de Schrödinger alors toute combinaison linéaire de ces fonctions est également une solution de l'équation de Schrödinger (propriété de linéarité).
2. $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$ est une équation différentielle du premier ordre par rapport au temps. Cela a pour conséquence que la connaissance de Ψ à un instant donné permet de déterminer toute son évolution ultérieure (symétrique dans le renversement du temps).
3. $\Psi \in \mathbb{C}$ c'est une fonction à valeurs complexes.

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.8 Interprétation statistique et propriétés des fonctions d'onde

L'interprétation probabiliste est due à Max Born (1926). Soit $P(\vec{r}, t)$ la densité de probabilité de présence à l'instant t . On a:

$$P(\vec{r}, t) \equiv \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 . \quad (23)$$

La probabilité de trouver la particule dans un volume fini V à l'instant t est égale à:

$$P_V(t) = \int \int \int_V P(\vec{r}, t) d^3\vec{r} . \quad (24)$$

Cette égalité implique que la fonction d'onde doit être de carré sommable c'est-à-dire que l'intégrale doit être finie. En particulier on a ($\forall t$)

$$\int \int \int_{\text{sur tout l'espace}} P(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = 1 . \quad (25)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

1. La définition (23) se généralise à un nombre quelconque de particules. Par exemple pour deux particules on a: $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2$. Ainsi $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$ est la probabilité de trouver la particule 1 dans l'élément de volume $d^3\vec{r}_1$ et la particule 2 dans l'élément de volume $d^3\vec{r}_2$. On a bien évidemment

$$\int \int \int \int \int \int_{\text{sur tout l'espace}} P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = 1 \quad \forall t. \quad (26)$$

2. Particules indépendantes

Soient deux particules qui n'interagissent pas entre elles $\Rightarrow$ les probabilités des coordonnées d'une particule sont indépendantes des probabilités de l'autre on a donc:

$$P(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 \quad (27)$$

$$= |\Psi_1(\vec{r}_1, t)|^2 \times |\Psi_2(\vec{r}_2, t)|^2, \quad (28)$$

ce qui implique que $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Psi_1(\vec{r}_1, t) \times \Psi_2(\vec{r}_2, t)$.

Equation de Schrödinger et f.o.

0.1.9 Propriétés des fonctions d'onde

Coefficient de normalisation

Si $\Psi(\vec{r}, t)$ est une fonction de carré sommable non-normalisée alors

$$\int \int \int_{\text{sur tout l'espace}} N^2 |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 \vec{r} = 1, \quad (29)$$

où N est le coefficient de normalisation.

Constante de phase

Les densités de probabilité $\Psi\Psi^*$ ne sont pas affectées si l'on multiplie la fonction d'onde par $e^{i\alpha}$ ou α est un nombre réel quelconque (transformation de jauge...lois de conservation). Ainsi, les fonctions d'onde sont donc définies à un facteur de phase près $e^{i\alpha}$.

Fonction d'onde dans l'espace des impulsions

Si l'on envisage de mesurer l'impulsion de la particule, on pourra seulement définir la probabilité de trouver l'impulsion dans un certain domaine de l'espace des impulsions. On introduit la Transformée de Fourier (TF) $\phi(\vec{p}, t)$ de $\Psi(\vec{r}, t)$:

$$\phi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \int \int_{\text{sur tout l'espace}} \Psi(\vec{r}, t) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3 \vec{r}. \quad (30)$$

Il existe une correspondance biunivoque entre les fonctions d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ et leur TF grâce à la TF^{-1} (transformée de Fourier inverse).

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \int \int_{\text{sur tout l'espace}} \phi(\vec{p}, t) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3 \vec{p}. \quad (31)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

Remarques:

- a 1D on a

$$\phi(p, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx, \quad (32)$$

et

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, t) e^{ipx/\hbar} dp. \quad (33)$$

- Normalisation

En utilisant

$$\Psi^*(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \int \int_{\text{sur tout l'espace}} \phi^*(\vec{p}', t) e^{-i\vec{p}' \cdot \vec{r}/\hbar} d^3\vec{p}', \quad (34)$$

on obtient

$$\int \int \int \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \int \int \int \int d^3\vec{p} d^3\vec{p}' \phi(\vec{p}, t) \phi^*(\vec{p}', t) \times \int \int \int e^{i(\vec{p}-\vec{p}') \cdot \vec{r}/\hbar} d^3\vec{r},$$

en utilisant $\int \int \int e^{i(\vec{p}-\vec{p}') \cdot \vec{r}/\hbar} d^3\vec{r} = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}-\vec{p}')$ on obtient que $\int \int \int \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \int \int \int \phi(\vec{p}, t) \phi^*(\vec{p}, t) d^3\vec{p} = 1$. δ est la fonction delta de Dirac (théorie des distributions; Laurent Schwartz-médaille Fields en 1950). On a par définition $\int f(x) \delta(x-a) \equiv f(a)$.

$\phi(\vec{p}, t)$ est la fonction d'onde dans l'espace des impulsions.

- Nous verrons plus tard, dans le prochain chapitre, que $\Psi(\vec{r}, t)$ et $\phi(\vec{p}, t)$ constituent des réalisations équivalentes d'un même état dynamique de la particule.
- La densité de probabilité $P(\vec{p}, t)$ donnant la probabilité $P(\vec{p}, t) d^3\vec{p}$ de trouver une valeur de l'impulsion dans l'élément de volume $d^3\vec{p}$ est définie par

$$P(\vec{p}, t) = \phi^*(\vec{p}, t) \phi(\vec{p}, t) = |\phi(\vec{p}, t)|^2. \quad (35)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

Valeurs moyennes

Soit $F(\vec{r})$ une fonction quelconque des coordonnées de la particule (e.g.: $x, \vec{r}...$) on définit:

$$\langle F \rangle(t) = \int \int \int P(\vec{r}, t) F(\vec{r}) d^3 \vec{r}, \quad (36)$$

comme la valeur moyenne des mesures de $F(\vec{r})$ effectuées sur un très grand nombre de particules identiques, indépendantes les unes des autres ($\Longleftrightarrow$ un grand nombre de systèmes indépendants). Exemple: la coordonnée x de la particule est donnée par

$$\langle x \rangle(t) = \int \int \int \Psi^*(\vec{r}, t) x \Psi(\vec{r}, t) d^3 \vec{r} \quad (37)$$

La valeur moyenne $\langle G \rangle(t)$ d'une fonction $G(\vec{p})$ est définie par

$$\langle G \rangle(t) = \int \int \int \phi^*(\vec{p}, t) G(\vec{p}) \phi(\vec{p}, t) d^3 \vec{p}. \quad (38)$$

Equation de Schrödinger et f.o.

Exemple: La valeur moyenne de $G(\vec{p}) = p_x$ est

$$\langle p_x \rangle(t) = \int \int \int \phi^*(\vec{p}, t) p_x \phi(\vec{p}, t) d^3 \vec{p} \quad (39)$$

$$= -i\hbar \int \int \int \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r}, t) d^3 \vec{r} \quad (40)$$

D'après les règles de correspondance $p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

Equation de Schrödinger et f.o.

Relations d'incertitude de Heisenberg

L'extension spatiale du paquet d'ondes $\Psi(\vec{r}, t) = \int f(\omega) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d\omega$ engendre une certaine indétermination sur la position de la particule puisqu'on ne connaît pas la structure onde-particule. Si on utilise l'interprétation statistique de la fonction d'onde on peut employer les notions classiques associées à la statistique. Pour simplifier on va considérer un mouvement a 1D $\rightarrow (x, p_x)$.

Notons Δx l'écart quadratique moyen de la distribution $|\Psi(x)|^2$. On a par définition:

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sigma . \quad (41)$$

C'est l'écart type ou encore la déviation standard ou l'erreur. De même pour p_x on a

$$\Delta p_x \equiv \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle} . \quad (42)$$

Δx et Δp_x sont les fluctuations statistiques des résultats des mesures autour des valeurs moyennes $\langle x \rangle$ et $\langle p_x \rangle$. On démontrera que (1D)

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (43)$$

C'est une des relations d'incertitude ($\Longleftrightarrow$ d'indétermination) de Heisenberg (1927).

Equation de Schrödinger et f.o.

On ne pourra jamais, lors d'une mesure, attribuer simultanément une position et une impulsion rigoureusement précises à une particule quantique. A 3D on a: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, $\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$ et $\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$. On remarque que cette inégalité fait intervenir des couples de variables canoniquement conjuguées.

En physique, le principe de complémentarité formulé par Niels Bohr en 1927 est un énoncé relevant de l'interprétation de la mécanique quantique qui vise à expliquer la dualité onde-corpuscule et le principe d'indétermination de Werner Heisenberg. Il consiste à dire que les comportements corpusculaires et ondulatoires qui cohabitent dans les phénomènes quantiques, ainsi que les paires de propriétés incompatibles de par le principe d'indétermination sont en fait des aspects complémentaires d'une même réalité.

Il implique en effet qu'un "objet quantique" ne peut se présenter que sous un seul de ces deux aspects à la fois. Historiquement adopté par l'école de Copenhague, il est à présent l'un des principes fondamentaux de l'interprétation standard de la mécanique quantique.

Equation de Schrödinger et f.o.

Particule dans un état stationnaire

Pour un champ constant, tous les instants sont équivalents vis-à-vis de ce système. Ainsi $|\Psi|^2$ doit être indépendant du temps et on peut écrire $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$ d'où $\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{i\alpha t}$ avec $\alpha \in \mathbf{R}$.

Si l'hamiltonien classique ne contient pas explicitement le temps il est égal à l'énergie $H(x, p) = E$. Celle-ci, dans un état donné du système, a une valeur déterminée E_n et qui restera constante au cours du temps. Ces états sont les états stationnaires du système.

Soit $\Psi_n(\vec{r}, t)$ la fonction d'onde de l'état stationnaire n . On a $\Psi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r})e^{i\alpha_n t}$. Si on reporte dans l'équation de Schrödinger on obtient: $i\hbar\dot{\Psi}_n = \hat{H}\Psi_n = E_n\Psi \Rightarrow i\hbar \times i\alpha_n\varphi_n e^{i\alpha_n t} = E_n\varphi_n e^{i\alpha_n t}$. Ainsi $E_n = -\hbar\alpha_n \Rightarrow \alpha_n = -E_n/\hbar$.

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r})e^{-iE_n t/\hbar} . \quad (44)$$

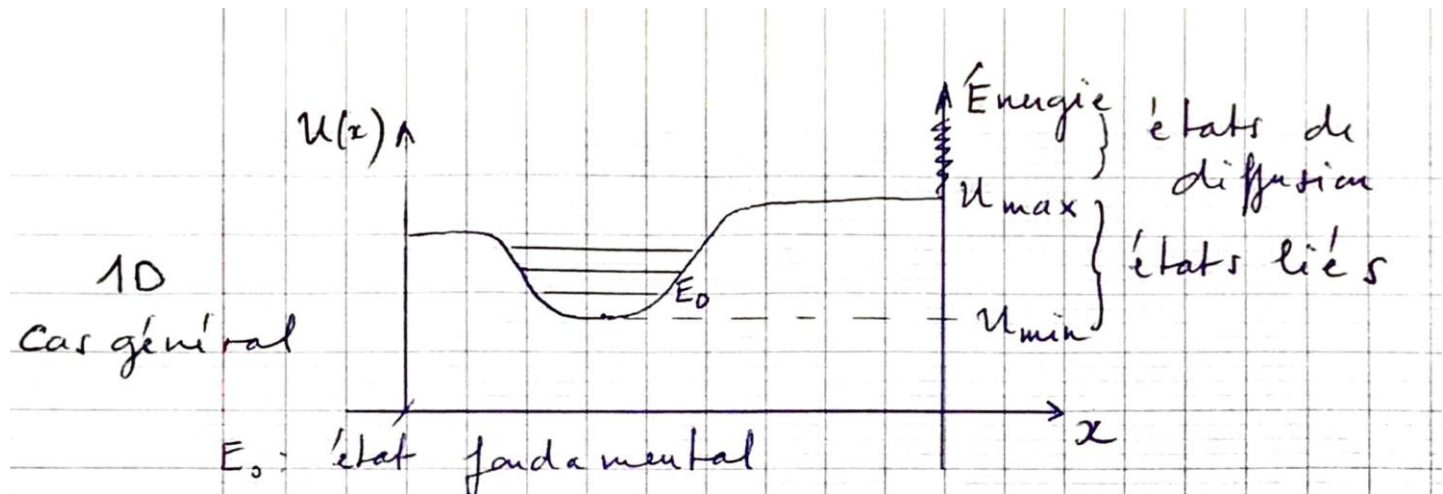
Les fonctions $\varphi_n(\vec{r})$ et les énergies E_n sont déterminées par l'équation

$$\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n . \quad (45)$$

C'est l'équation de Schrödinger des états stationnaires. Les valeurs de E peuvent former un ensemble continu ou dsicret appelé spectre. L'état stationnaire correspondant à la plus petite valeur de E est appelé l'état fondamental du système.

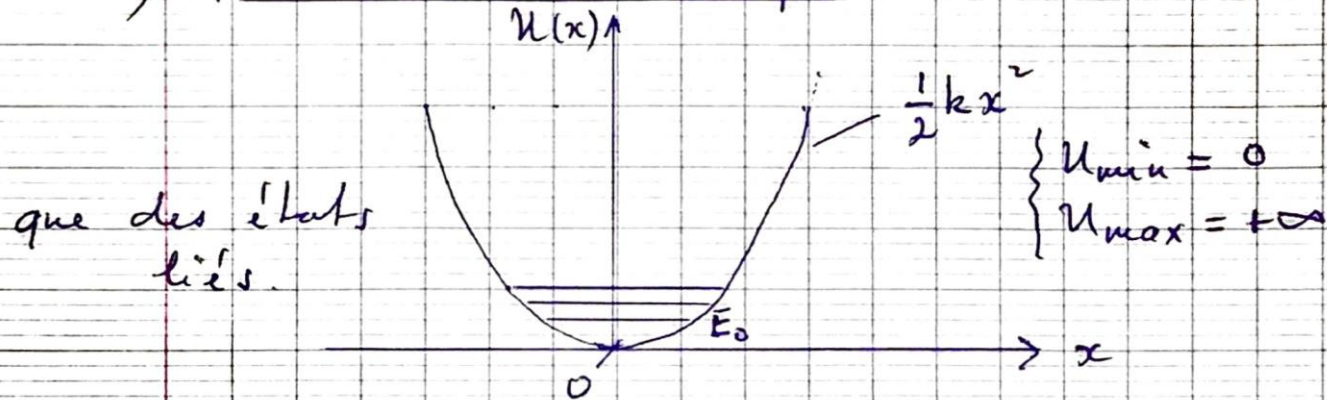
Equation de Schrödinger et f.o.

- spectre discret
 - état lié
 - déplacements limités dans l'espace. Le système ne s'éloigne pas à l'infini.
 - On a $\int |\varphi_n(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1$
 - $\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \varphi_n(\vec{r}) = 0$
- spectre continu
 - état de diffusion
 - $\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} \varphi_n(\vec{r}) \neq 0$.

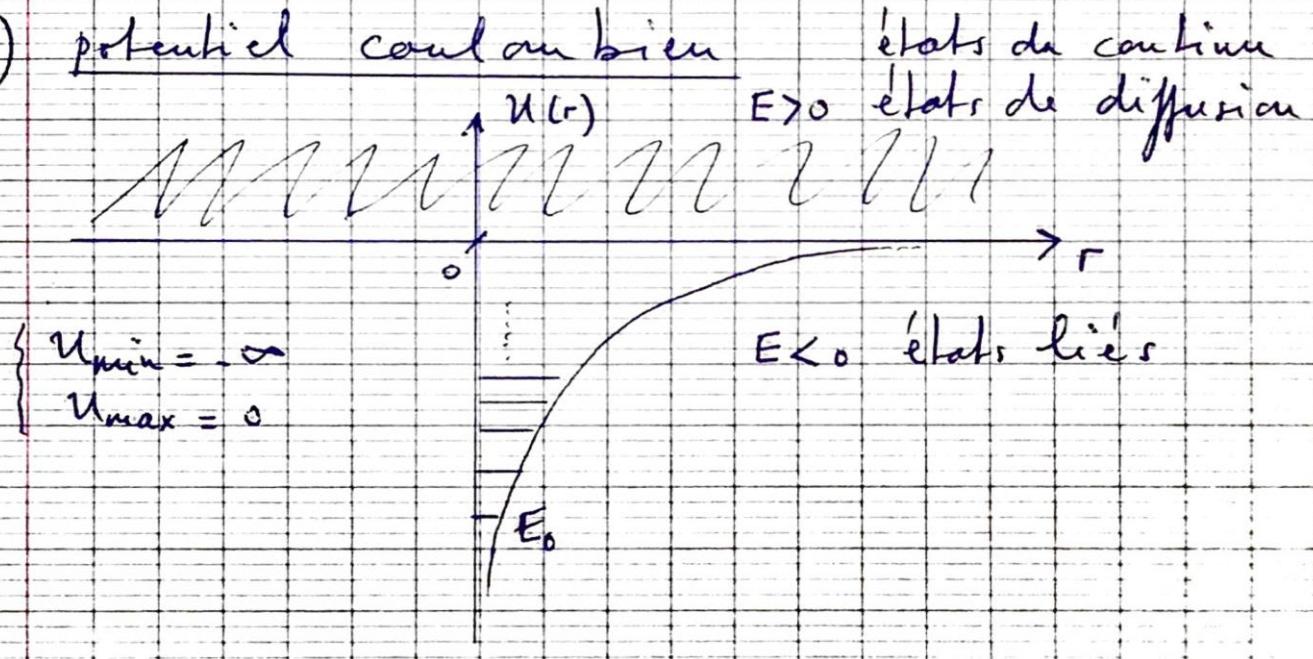


Equation de Schrödinger et f.o.

α) potentiel harmonique



β) potentiel coulombien



Equation de Schrödinger et f.o.

Densité de courant de probabilité - équation de continuité

$\Psi(\vec{r}, t)$ est solution de l'équation: $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$. L'intégrale $\int \int \int_V |\Psi|^2 d^3\vec{r}$ calculée sur un volume fini V est la probabilité de présence de la particule dans ce volume.

On a:

$$\frac{d}{dt} \int \int \int_V |\Psi|^2 d^3\vec{r} = \int \int \int_V \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) d^3\vec{r} \quad (46)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int \int \int_V \left(\Psi \hat{H}^+ \Psi^* - \Psi^* \hat{H} \Psi \right) d^3\vec{r}. \quad (47)$$

On a utilisé $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}$ et $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi \rightarrow -i\hbar\dot{\Psi}^* = \hat{H}^+ \Psi^*$. On fait l'hypothèse que le hamiltonien du système est hermitique i.e. $\hat{H}^+ = \hat{H}$ (les énergies des états stationnaires sont réelles; on verra cela en détail au prochain chapitre). On a l'égalité suivante (en utilisant $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$):

$$\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi = \vec{\nabla} \cdot \left(\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi \right). \quad (48)$$

Ainsi on obtient

$$\frac{d}{dt} \int \int \int_V |\Psi|^2 d^3\vec{r} = - \int \int \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3\vec{r}, \quad (49)$$

avec $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi \right) = \frac{1}{2m} \left(\Psi \hat{p}^+ \Psi^* + \Psi^* \hat{p} \Psi \right)$ avec $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$.

Equation de Schrödinger et f.o.

En utilisant le théorème de Stokes ($\int_M d\omega = \int_{\partial M} \omega$) on peut réécrire (49) comme

$$\frac{d}{dt} \int \int \int_V |\Psi|^2 d^3 \vec{r} = - \int \int_S \vec{j} \cdot d^2 \vec{s}. \quad (50)$$

Cette relation est facile à démontrer à 1D. À 3D il faut utiliser les règles sur les opérateurs différentiels. $\vec{j}$ est le vecteur densité de courant de probabilité = densité de probabilité que la particule traverse cette surface dans l'unité de temps. On a finalement l'équation de continuité sous sa forme locale (on oublie les intégrations):

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0. \quad (51)$$

Remarquons l'analogie avec l'équation de continuité obtenue à partir des équations de Maxwell: $\dot{\rho}(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$ où ρ est la densité de charge et $\vec{j}$ la densité de courant électrique. Cette analogie a sûrement inspiré David Bohm pour établir son interprétation de la mécanique quantique.

