Équation de Schrödinger pour une particule libre

PC Lycée Dupuy de Lôme

Il s'agit de traduire ici la dynamique de la fonction d'onde Quelques principes permettent de construire l'équation

- Elle doit être linéaire *(Principe de superposition)*
- Elle doit être d'ordre 1 par rapport au temps *(La connaissance de l'état initiale suffit à décrire l'évolution ultérieure)*
- Elle doit se confondre avec la théorie classique dans le domaine de validité commun

Équation de Schrödinger

La fonction d'onde Ψ d'un quanton pour un système unidimensionnel vérifie l'équation

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

En mécanique quantique les fonctions d'onde seront toujours des expressions complexes que l'on notera par abus d'écriture $\Psi(x,t)$ et non $\underline{\Psi}(x,t)$

Quanton libre

Un quanton est libre s'il n'est soumis à aucun champ de force.

Le potentiel $V(x)$ sera alors constant. On le choisira nul.

✍ **L'énergie d'un quanton libre est** $E = \frac{1}{2}.m.v^2$

On propose une solution sous la forme : $\Psi(x,t) = e^{i(k.x-\omega.t)}$

La relation de dispersion s'écrit alors $k = \sqrt{\dfrac{2.m.\omega}{\hbar}}$, qui peut également s'écrire $k = \dfrac{\sqrt{2.m.E}}{\hbar}$

Onde de de Broglie

On associe à tout quanton libre une onde plane "pilote" de longueur d'onde dite de de Broglie

$$\Psi(x,t) = e^{i(k.x-\omega.t)} \quad \texttt{avec} \quad \lambda_{dB} = \frac{h}{p}$$

- Cette onde a une quantité de mouvement complètement définie. On a donc aucune information sur sa position.
- La vitesse de l'onde est $v_\varphi = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{v}{2}$. Elle ne peut donc pas être

La forme complète de la solution correspondra à une combinaison linéaire des solutions possibles

Onde associée à un quanton libre

A un quanton libre sont associés des états *stationnaires* pour une énergie E correspondant à une forme générale des solutions

$$\Psi(x,t) = \left[A_1.e^{i.k.x} + A_2.e^{-i.k.x}\right].e^{\frac{-i.E.t}{\hbar}} = \varphi(x).e^{\frac{-i.E.t}{\hbar}}$$

Les états ne sont pas quantifiés pour une particule libre

On associe à un quanton la fonction d'onde

$$\Psi(x,t) = \Psi_0.e^{i.(p.x-E.t)/\hbar}$$

A quel type d'énergie sont associés les opérateurs appliquée à Ψ

- $i.\hbar.\dfrac{\partial}{\partial t}\times$
- $-\dfrac{\hbar^2}{2.m}.\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\times$
- $V(x,t)\times$

Potentiel quantique

Le potentiel $V(x)$ dans l'équation de Scrödinger correspond en fait à une énergie que l'on pourrait nommer énergie potentielle...

On associe à un quanton la fonction d'onde

$$\Psi(x,t) = \Psi_0.e^{i.(p.x-E.t)/\hbar}$$

A quel type d'énergie sont associés les opérateurs appliquée à Ψ

- $i.\hbar.\dfrac{\partial}{\partial t}\times$ associé à l'énergie totale
- $-\dfrac{\hbar^2}{2.m}.\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\times$ associé à l'énergie cinétique
- $V(x,t)\times$ associé à l'énergie potentielle

Potentiel quantique

Le potentiel $V(x)$ dans l'équation de Scrödinger correspond en fait à une énergie que l'on pourrait nommer énergie potentielle...

Que retient-on des études précédentes :

- **Interférences d'un faisceau d'électrons :** Il n'est pas possible de prévoir avec certitude la trajectoire d'une particule. La position et la vitesse d'une particule ne peuvent être déterminées simultanément avec précision.
- **OPPH pilote associée à une particule :** l'hypothèse d'une OPPH implique une répartition dans tout l'espace de la particule. La connaissance exacte de p implique donc l'incertitude totale sur la position de la particule.

Inégalité d'Heisenberg

L'incertitude sur la position Δx ainsi que l'incertitude sur la quantité de mouvement Δp (ou sur le nombre d'onde Δk sont reliés par l'inégalité :

$$\Delta x . \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2} \quad \texttt{ou} \quad \Delta x . \Delta k \geqslant \frac{1}{2}$$

Vitesse de groupe

La vitesse de groupe $v_g = \dfrac{d\omega}{dk}$ d'un paquet d'onde associé à un quanton s'identifie à la vitesse de ce quanton.

✍ $$\varphi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(p).e^{i\frac{(p.x-E(p).t)}{\hbar}}.dp$$

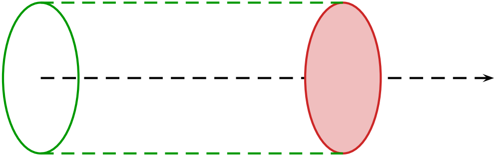
En effet, en dynamique non relativiste :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\,(\hbar.\omega)}{d\,(\hbar.k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{2.\frac{1}{2}.m.2.v.dv}{m.dv} = v$$

Densité de courant de probabilité

On définit la densité de courant de probabilité $\overrightarrow{J}$ comme la probabilité qu'une particule traverse une surface unitaire pendant 1 seconde.

Bilan sur une durée dt :



- a probabilité de trouver la particule dans le volume $v_g.dt.S$ s'écrit $d\mathcal{P} = |\Psi|^2 .S.v_g.dt$ or $v_g = \dfrac{k.\hbar}{m}$
- la probabilité que cette particule traverse la section s'écrit en fonction de $\overrightarrow{J}$: $d\mathcal{P} = \iint_S \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{dS}.dt$

Densité de courant de probabilité

On définit la densité de courant de probabilité $\overrightarrow{J}$ comme la probabilité qu'une particule traverse une surface unitaire pendant 1 seconde.

- a probabilité de trouver la particule dans le volume $v_g.dt.S$ s'écrit $d\mathcal{P} = |\Psi|^2 .S.v_g.dt$ or $v_g = \dfrac{k.\hbar}{m}$
- la probabilité que cette particule traverse la section s'écrit en fonction de $\overrightarrow{J}$: $d\mathcal{P} = \iint_S \overrightarrow{J} \cdot \overrightarrow{dS}.dt$

Vecteur densité de courant de probabilité

✍ $$\overrightarrow{J} = |\Psi(x,t)|^2 . \frac{\hbar.\overrightarrow{k}}{m}$$

Considérons l'onde de de Broglie $\Psi(x,t) = \varphi_0.e^{i(k.x-\omega.t)}$

Alors $\overrightarrow{J} = \varphi_0^2.\dfrac{\hbar.\overrightarrow{k}}{m} = C^{te}$. Il s'agit donc d'un état stationnaire pour lequel le courant de probabilité sera indépendant du temps.

Forme générale d'une solution stationnaire

$$\Psi(x,t) = \varphi(x).e^{\frac{-i.E.t}{\hbar}}$$