Généralités sur l'équation de Schrödinger.

I Continuité de la fonction d'onde

Si $V(x)$ est borné, alors la fonction d'onde est continue à dérivée continue, là où φ est borné.

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\,\psi$$

On aura l'équation indépendante du temps :

$$E\,\varphi(x) = -\frac{1}{2m} \cdot \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\,\varphi(x).$$

Nous aurons :

$$E\int_a^b \varphi(x)\,dx = -\frac{1}{2m}\Big(\varphi'(b) - \varphi'(a)\Big) + \int_a^b V(x)\,\varphi(x)\,dx$$

Si $b \to a$, alors : $E\int_a^b \varphi(x)\,dx \to 0$ et $\int_a^b V(x)\,\varphi(x)\,dx \to 0$

d'où $\varphi'(b) \to \varphi'(a)$.

Donc la dérivée est continue, donc la fonction est continue également.

II Généralisation à trois dimensions.

Nous avons :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{R}) \qquad \text{et} \quad [P_i, R_j] = -i\,\delta_{ij}\,I$$

$\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ et $\psi(\vec{r}, t) \in \mathcal{H}$

Réalisation : $\left|\begin{array}{l} \vec{R} = \times\,\vec{r} \\ \vec{P} = -i\,\vec{\nabla}. \end{array}\right.$

Donc on aura : $\quad H = -\frac{1}{2m}\,\Delta. + V(\vec{r})$

c'est à dire l'équation locale :

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\,\Delta\psi + V(\vec{r})\,\psi$$

Normalisation :

$$\iiint d^3r\,|\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

III Courant de probabilité.

Nous avons la densité de probabilité :

$$\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$$

et $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = \bar{\psi}\dfrac{\partial \psi}{\partial t} + \dfrac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}\psi$

donc $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = \bar{\psi}\left(\dfrac{i}{2m}\Delta\psi - iV\psi\right) + \left(-\dfrac{i}{2m}\Delta\bar{\psi} + iV\bar{\psi}\right)\psi$

d'où $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = -\dfrac{i}{2m}\left(\Delta\bar{\psi}.\psi - \bar{\psi}\Delta\psi\right)$.

Nous pouvons écrire cette expression :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{2m}\,\vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\bar{\psi}.\psi - \bar{\psi}.\vec{\nabla}\psi\right)$$

c'est à dire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{j} = 0 \quad \text{avec : } \vec{j} = \frac{i}{2m}\left(\vec{\nabla}\bar{\psi}.\psi - \bar{\psi}.\vec{\nabla}\psi\right).$$

Nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho(\vec{r},t)\,d^3r = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t}\,d^3r = -\int_V \vec{\nabla}.\vec{j}\,d^3r$$

donc $$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho(\vec{r},t)\,d^3r = -\int_{S(V)} \vec{j}.d^2\vec{r}$$

d'où $$\frac{\partial}{\partial t}\,\text{Proba.}(V) = -\text{flux}_{S(V)}(\vec{j})$$

$\vec{j}$ est une densité de courant de probabilité, la probabilité obéit à une équation de continuité locale.

IV L'équation de Schrödinger pour le potentiel "δ"

Nous avons : $V(x) = c\,\delta(x)$ $\quad ([\delta] = L^{-1})$

et : $E\varphi(x) = -\dfrac{1}{2m}\dfrac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + c\,\delta(x)\varphi(x)$

donc :

$$E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)\,dx = -\frac{1}{2m}\left(\varphi'(\varepsilon) - \varphi'(-\varepsilon)\right) + c\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x).\varphi(x)\,dx.$$

On pose $\varphi(0) = \displaystyle\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x)\,\varphi(x)\,dx$.

Quand $\varepsilon \to 0$, et si φ est bornée, alors : $E\displaystyle\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)\,dx \to 0$

La dérivée est donc continue.

$$\varphi'(0_+) - \varphi'(0_-) = 2mC\varphi(0) \quad \text{(condition de discontinuité)}$$

1) Etats liés.

Nous avons : $C = -D$ donc $V(x) = -D\,\delta(x)$ $(D > 0)$

d'où : $E\varphi(x) = -\dfrac{1}{2m}\dfrac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + (\ldots\ldots)$

Si $E < 0$, alors :

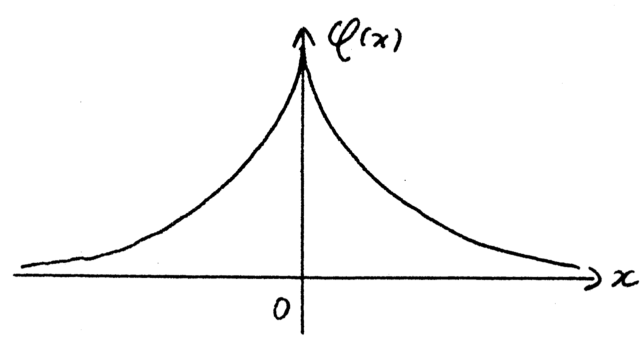
$$E = \frac{K^2}{2m} \Rightarrow K^2\varphi = \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}$$

donc $\varphi = Ae^{Kx} + Be^{-Kx}$ (impossible pour un quantum libre)

$$\begin{cases} x < 0 \Rightarrow \varphi(x) = Ae^{+Kx} \\ x > 0 \Rightarrow \varphi(x) = Be^{-Kx} \end{cases}$$

Continuité de $\varphi \Rightarrow A = B$, donc :

$$\begin{cases} x < 0 \Rightarrow \varphi(x) = Ae^{+Kx} \\ x > 0 \Rightarrow \varphi(x) = Ae^{-Kx} \end{cases}$$



2) Condition de discontinuité.

Nous avons : $-KA - (KA) = -2mDA$

donc $K_0 = mD \Rightarrow$ 1 seule valeur de l'énergie :

$$E_0 = -\frac{1}{2}mD^2$$

où D caractérise "l'intensité" du puits δ.

Calculons ΔX et Δp.

Nous avons :

$$\begin{cases} (\Delta X)^2 = \langle X^2\rangle - \cancel{\langle X\rangle^2} \\ (\Delta P)^2 = \langle P^2\rangle - \langle P\rangle^2 \end{cases}$$

$\varphi(x) = Ae^{-K|x|}$ et $2A^2\displaystyle\int_0^{+\infty} e^{-2Kx}\,dx = 1$ (Normalisation)

donc : $1 = 2A^2 \cdot \dfrac{1}{2K} \Rightarrow A = \sqrt{K}$ et alors $\varphi(x) = \sqrt{K}\,e^{-K|x|}$

Nous aurons:

* $\langle P^2 \rangle = \langle \varphi | P^2 | \varphi \rangle = (\varphi, P^2 \varphi) = (P\varphi, P\varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi'(x)|^2 dx$

donc $\langle P^2 \rangle = 2 \int_0^{+\infty} |\sqrt{K} . K e^{-Kx}|^2 dx$

d'où $\langle P^2 \rangle = 2 K^3 \int_0^{+\infty} e^{-2Kx} dx$

c'est à dire: $\langle P^2 \rangle = K^2$

* $\langle X^2 \rangle = \dfrac{1}{2K^2}$

Nous avons donc:

$$\begin{cases} \Delta P = K \\ \Delta X = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \cdot \dfrac{1}{K} \end{cases}$$

d'où:

$$\Delta P . \Delta X = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \left(\text{et } \Delta P . \Delta X > \frac{1}{2} \right)$$

Quand α augmente, $|E_0|$ diminue et Δx de même.

Plus le système est lié plus il est confiné.