Chapitre II
Fonction d'onde, équation de Schrödinger

Plan :

I. Fonction d'onde

II. Postulats de la mécanique quantique

III. Equation de Schrödinger

IV. Application :

1) Effet Tunnel

2) Fonctions d'ondes de l'atome d'hydrogène

A. Zellagui-Tabbi

I. *Fonction d'onde*

Par suite de l'existence du principe d'incertitude de Heisenberg, où la position et la quantité de mouvement ne peuvent être mesurées simultanément avec une totale précision, la notion de trajectoire n'a donc plus de sens.
L'état dynamique est caractérisé de façon différente en mécanique quantique.
Grâce à l'hypothèse de de Broglie « associer un phénomène ondulatoire à une particule matérielle », on décrit son état dynamique par une fonction d'onde : $\Psi(\vec{r},t)$, où $\vec{r}$ est le vecteur position, on obtient donc $\Psi(\vec{r},t) = cste.e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega.t)}$ et $\vec{r}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

II. *Postulats de la mécanique quantique*

1) L'état dynamique d'une particule est caractérisé par une infinité de fonctions d'onde définies à une constante près c'est-à-dire $\Psi(\vec{r},t)$ et $\lambda\Psi(\vec{r},t)$ décrivent le même état.

2) Si $\Psi_1(\vec{r},t)$ et $\Psi_2(\vec{r},t)$ sont deux fonctions qui décrivent deux états différents, alors la combinaison linéaire : $\lambda_1\Psi_1(\vec{r},t)+\lambda_2\Psi_2(\vec{r},t)$ est une fonction d'onde d'un état dynamique possible, c'est le principe de superposition.

3) La probabilité élémentaire de trouver la particule dans un état décrit par $\Psi(\vec{r})$ dans un volume dτ autour d'un point $\vec{r}$ est : $dP = |\Psi(\vec{r})^2|.d\tau$, où $|\Psi(\vec{r})^2|$ est la densité de probabilité. A savoir que : La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace est égale à 1.

$$P = \iiint_{espace} |\Psi(\vec{r})^2|.d\tau = 1$$

Remarque :

Une variable dynamique A : énergie ou quantité de mouvement, ayant une valeur a_1 dans l'état Ψ_1 et a_2 dans l'état Ψ_2, alors a_1 et a_2 sont appelés valeurs propres, Ψ_1, Ψ_2 les états propres.

III. *Equation de Schrödinger*

On cherche à déterminer les états propres et les valeurs propres des différents systèmes, et l'équation qui permet de déterminer la fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$ est l'équation de Schrödinger.

1) Equation de Schrödinger indépendante du temps

Soit une particule de masse m, ayant une énergie potentielle E_p et une énergie cinétique Ec, son énergie totale est :

$$E = E_c + E_p = \frac{p^2}{2.m} + E_p \text{, où } p = m.v$$

On cherche des fonctions d'onde de la forme :

$$\Psi(x,y,z,t) = \Psi(x,y,z).e^{-i\omega.t}$$

L'équation de propagation de Ψ à la vitesse de phase $v_\varphi = \omega / k$ est :

$$\boxed{\Delta\Psi - \frac{1}{v_\varphi^{\,2}}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0}$$

En remplaçant : $\frac{\partial^2}{\partial t^2} = -\omega^2$, $v_\varphi^2 = \frac{\omega^2}{k^2}$, $p^2 = \hbar k^2$, $E = E_c + E_p$, $E_c = \frac{p^2}{2.m}$

On obtient finalement :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + E_p\Psi = E\Psi}$$

Cette dernière équation représente l'équation aux valeurs propres où les inconnues sont la fonction d'onde Ψ et l'énergie totale E. A savoir que le potentiel V et donc l'énergie potentielle E_p de la particule sont connus.

On pose : **l'opérateur Hamiltonien** H par :

$$\boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + E_p}$$

Ce qui permet de réécrire l'équation comme :

$$\boxed{H\Psi = E\Psi}$$

Cette équation permet de déterminer le spectre de l'énergie de la particule et les états stationnaires correspondants.

2) *Equation de Schrödinger dépendante du temps*

Dans le cas général on a le potentiel dans lequel se trouve la particule qui dépend des variables de l'espace (x,y,z) et la variable du temps t.

En utilisant : $E = \hbar\omega$ et $\dfrac{\partial}{\partial t} = -i\omega$, $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + E_p\Psi = i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}$

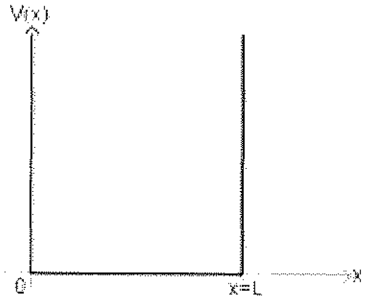
Equation de Schrödinger dépendante du temps qui a été confirmée après l'accord entre les fonctions d'onde calculées et les observations expérimentales.

IV. Applications

1) Particule dans un puits de potentiel rectangulaire

Ce potentiel est décrit par :

$E_p(x) \to \infty$ pour x = 0 et x = a ; $E_p(x) = 0$ pour 0 < x < L



L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + (E - E_p(x))\Psi = 0$$

En fonction du nombre d'onde k , cette dernière équation devient :

$$\Psi'' + k^2\Psi = 0$$

De solution générale :

$\Psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$: Fonction d'onde stationnaire

En utilisant les conditions aux limites :

$$\Psi(0) = 0 \text{ et } \Psi(L) = 0$$

On trouve donc :

$$\text{B} = 0 \text{ et } \text{A.sin(L)} = 0$$

Ce qui donne :

$$k.L = n\pi \text{, d'où : } \Psi(x) = A\sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

L'énergie devient :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \text{Avec } k^2 = \frac{n^2\pi^2}{L^2}$$

Finalement, on obtient : $\begin{cases} \Psi_n(x) = A.\sin(\frac{n\pi}{L}x) \\ E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}.n^2 \end{cases}$

<u>Calcul de la constante A</u>

On a la probabilité de trouver la particule entre x = 0 et x = a est égale à 1

$$\int_0^a |\Psi_n(x)|^2.dx = 1$$

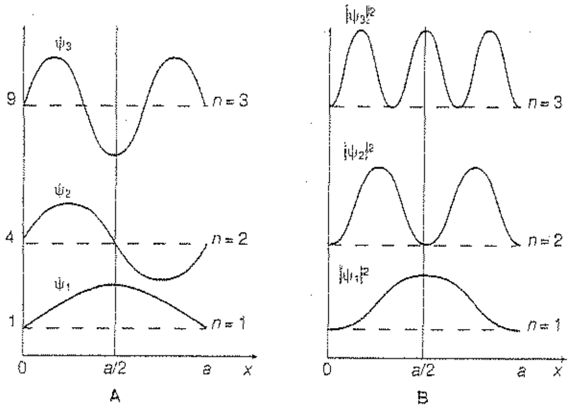
Ce qui donne :

$$A^2.L/2 = 1 \quad \text{et } A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

D'où :

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}.\sin(\frac{n\pi}{L}x)}$$

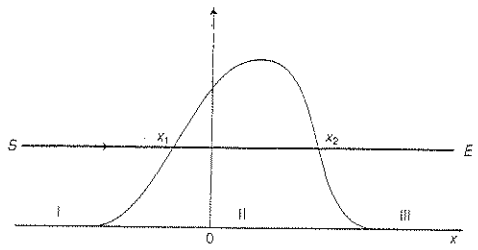
Les solutions de E_n et $\Psi_n(x)$ sont les suivantes :



A : les trois premiers niveaux et les fonctions d'onde associées pour une particule dans un puits infiniment profond. L'unité d'énergie est ε = h²/8ma².
B : les densités de probabilités associées.

2) *Effet tunnel*

On considère une barrière de potentiel V(x) et une source de particules S située à $-\infty$ telle que les particules arrivent vers la droite avec une énergie cinétique : $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



Particules d'énergie E arrivant sur une barrière de potentiel.

Aux points x_1 et x_2, on a $E = E_p$, ce qui donne $E_c = 0$.

Interprétation

1) En mécanique classique

Si $E < (E_p)_{max}$

Toutes les particules ont leur vitesse qui s'annule au contact avec la barrière de potentiel car en ce point on a $E = E_p$ d'où $E_c = 0$

Les particules sont donc réfléchies vers la source avec la même vitesse.

Si $E > (E_p)_{max}$

Les particules sont ralenties par la barrière et sont par la suite accélérées vers la région III

2- En mécanique quantique

Dans les régions I et III, $E_p(x) = 0$ car $V = 0$

$$\text{D'où : } \Delta\Psi + k^2\Psi = 0$$

De solutions $\begin{cases} \Psi_I = A.e^{ikx} + B.e^{-ikx} \\ \Psi_{III} = A'.e^{ikx} + B'.e^{-ikx} \end{cases}$

Avec B' = 0 car les particules ne peuvent se déplacer vers les $x < 0$ dans la région III.

On choisit A'=1, ainsi A et B seront déterminés en faisant le raccord des solutions d'une région à l'autre

$$\Psi_1(x) = \underset{\text{Incid}}{Ae^{ikx}} + \underset{\text{reflech}}{Be^{-ikx}}$$

L'existence des solutions A et B montre que dans la région I, on a à la fois des particules incidentes, et des particules réfléchies

On définit T et R les coefficients de transmission et de réflexion par

$$\begin{cases} R = \left|\dfrac{B}{A}\right|^2 \\ T = 1 - R \end{cases}$$

On trouve T ≠ 0, il existe donc une transmission : c'est l'effet Tunnel, effet qui joue un rôle important dans les semi-conducteurs, et la radioactivité

Conclusion

Si $E < E_{pmax}$, la particule peut franchir la barrière de potentiel et traverse une région d'énergie cinétique négative, c'est un des aspects spectaculaires de la mécanique quantique.