

# L'équation de Schrödinger pour les (presque) nuls

En décembre 1925, dans la station de ski d'Arosa en Suisse, le physicien Erwin Schrödinger passe quelques jours avec sa maîtresse (et avec l'accord de sa femme!).

Lors d'un épisode orgasmique, il **invente** littéralement l'équation fondamentale de la Mécanique Quantique pour la mystérieuse onde  $\Psi(x,t)$  découverte en 1923 par **Louis de Broglie**.

Pour rappel, son module au carré  $|\Psi(x,t)|^2$  donne la probabilité de trouver la particule au point  $x$  à l'instant  $t$ .

Une équation d'onde classique, comme pour une vague se propageant dans l'eau, décrirait exactement le comportement d'une particule dans le temps et l'espace.

Mais l'onde quantique  $\Psi(x,t)$  ne fournit qu'une **information statistique, une probabilité**, sur la position  $x$  de la particule. Ce fut un coup de tonnerre pour la Physique et même pour la Philosophie.

L'interprétation correcte de cette onde ne fut découverte qu'en 1926 par Max Born (Nobel 1954).

A toute particule de matière de masse  $m$ , vitesse  $v$ , est associée une onde  $\Psi$  de longueur d'onde  $\lambda$

$\lambda = h/p$ ,  $h$  la constante de Planck,  $p = mv$  quantité de mouvement.

Le génie de Schrödinger fut d'utiliser dans son équation à la fois

--  $\lambda = h/p$  de de Broglie

et

--  $E = hf$  d'Einstein :  $E$  est l'énergie et  $f$  fréquence de l'onde

## ÉQUATION D'UNE ONDE

Nous allons d'abord étudier l'équation générale d'une onde plane, puis introduire les paramètres quantiques ci dessus pour aboutir, après 3 dérivations, à l'équation de Schrödinger.

Logiquement, on définit une onde **sinusoïdale** par

$$A = \sin(kx - \omega t)$$

oscillant avec une **pulsation  $\omega$** , et se déplaçant suivant l'axe des  $x$  avec une **longueur d'onde  $\lambda$** .

On considérera uniquement l'axe des  $x$  pour simplifier mais en réalité il faudrait considérer un vecteur  $\mathbf{r}(x,y,z)$  en 3D.

Pour un point fixe de la sinusoïde, le temps  $t$  étant croissant on voit que  $x$  doit nécessairement croître aussi, donc l'onde se déplace vers la droite.

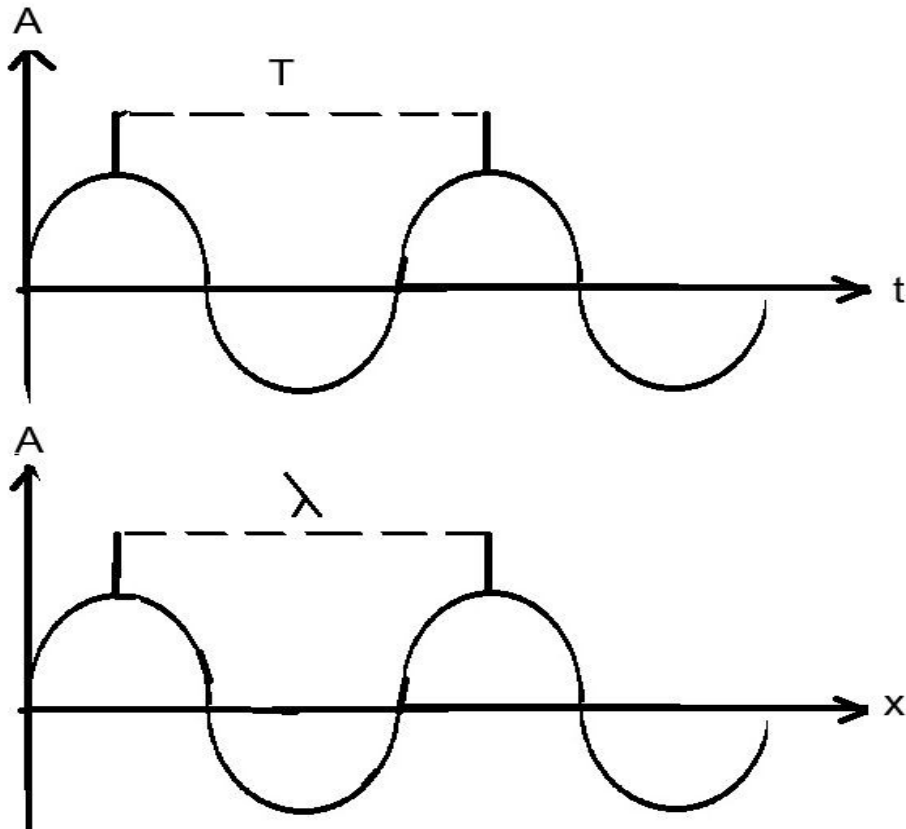
Une telle onde est doublement périodique :

**-périodique dans le temps**, de période  $T$ . Quand  $t$  augmente de  $T$  on veut retrouver la même valeur.

$$\sin(kx - \omega(t + T)) = \sin((kx - \omega t) - \omega T)$$

$$\text{ce qui entraîne } \omega T = 2\pi, \quad \omega = 2\pi/T, \quad \omega = 2\pi f$$

avec  $T$  la période,  $f = 1/T$  la fréquence et  $\omega = 2\pi f$  la pulsation.



**-périodique dans l'espace** de longueur d'onde  $\lambda$ , Quand  $x$  augmente de  $\lambda$  on veut retrouver la même valeur.

$$\sin(k(x + \lambda) - \omega t) = \sin((kx - \omega t) + k\lambda)$$

$$k\lambda = 2\pi, \quad k = 2\pi/\lambda$$

avec  $k = 2\pi/\lambda$ , le nombre d'onde.

On arrive donc à une relation liant un paramètre **purement corpusculaire**,  $p$ , à  $k$  nombre d'onde, **purement ondulatoire** :

$$\lambda = h/p = 2\pi/k \text{ d'où } p = (h/2\pi)k = \hat{h}k \quad \text{avec } \hat{h} = h/2\pi$$

$$p = \hbar k$$

Considérons maintenant l'énergie cinétique de la particule

$$(1) \quad E = m v^2/2 = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$$

et d'après la formule d'Einstein ci dessus

$$E = h f = h \omega / 2 \pi = \hbar \omega$$

$$(2) \quad E = \hbar \omega$$

## Équation de Schrödinger

Jusqu'ici un sinus a été utilisé, mais nous allons maintenant généraliser l'équation d'onde par la formule d'Euler qui rassemble sinus et cosinus dans le plan complexe

$$\cos \theta + i \sin \theta = \exp(i \theta) \quad \text{avec} \quad i^2 = -1$$

$$\Psi(x,t) = \exp i(kx - \omega t)$$

On dérive  $\Psi(x,t)$  par rapport au temps et deux fois par rapport à  $x$ , en rappelant que la dérivée de  $\exp(kx)$  par rapport à  $x$  est égale à  $k \exp(kx)$ .

<p>DERIVÉE / Temps</p> $\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i \omega e^{i(kx - \omega t)}$ $= -i \omega \Psi(x,t)$ <p>D'APRÈS (2) et (1)</p> $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{\hbar 2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}$ <p>* <math display="block">\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -i \frac{\hbar k^2}{2m} \Psi(x,t)</math></p> <p>PAR IDENTIFICATION :</p> <p>Donc <math display="block">\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{i \hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}</math></p> <p>ON X PAR <math>i \hbar</math></p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <math display="block">i \hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}</math> </div>	<p>DERIVÉE 2 FOIS / x</p> $\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i k e^{i(kx - \omega t)}$ $= i k \Psi(x,t)$ $\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = i^2 k^2 \Psi(x,t)$ $= -k^2 \Psi(x,t)$ <p>On X par <math>i \hbar k m</math></p> $\frac{i \hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{i \hbar}{2m} k^2 \Psi(x,t)$
<p>EQUATIONS de SCHRÖDINGER</p> <p>POUR UNE PARTICULE LIBRE</p>	
<p>PLUS GÉNÉRALEMENT, si LA PARTICULE EST SOUSMISE A UNE POTENTIEL <math>V(x)</math></p> $i \hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x,t)$ <p>PARFOIS NOTÉ <math display="block">i \hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x,t)</math></p> <p>AVEC <math display="block">\hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right)</math> OPERATEUR HAMILTONIEN</p> <p>* ON NOTE QUE <math>e^{i(kx - \omega t)}</math> A LA PLACE D'UN SINUS OU COSINUS PERMET DE RETROUVER <math>\Psi(x,t)</math> DANS <math>\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}</math></p>	

## INTERPRÉTATION

L'onde définie par  $\Psi(x,t)$  est une onde abstraite, dite « de probabilité ».

Il n'est pas possible d'avoir plus de précision dans la localisation d'une particule quantique.

A la question :

« Pourquoi cette onde parfaitement définie, qui suit l'équation différentielle linéaire de Schrödinger **s'effondre-t-elle soudain en un point** au moment de la mesure de la particule ? »

Cent ans plus tard, aucune réponse satisfaisante n'a encore été trouvée !

PS

Cette équation ne s'applique pas aux grandes vitesses, ne prenant pas en compte la Relativité. Il reviendra à **Paul Dirac** en 1928 d'inventer cette nouvelle équation.

Il en ressortira la découverte de la théorie du spin et des anti-particules.

Pour l'anecdote, Dirac était réputé réservé, taciturne et très peu bavard. Ses collègues de Cambridge s'en amusaient et avaient inventé une unité appelée le « dirac », qui avait la valeur "d'un mot par heure" !

\*\*\*\*\*ANNEXE pour aller plus loin\*\*\*\*\*

Et dans la pratique ? Sa résolution est en général fort complexe

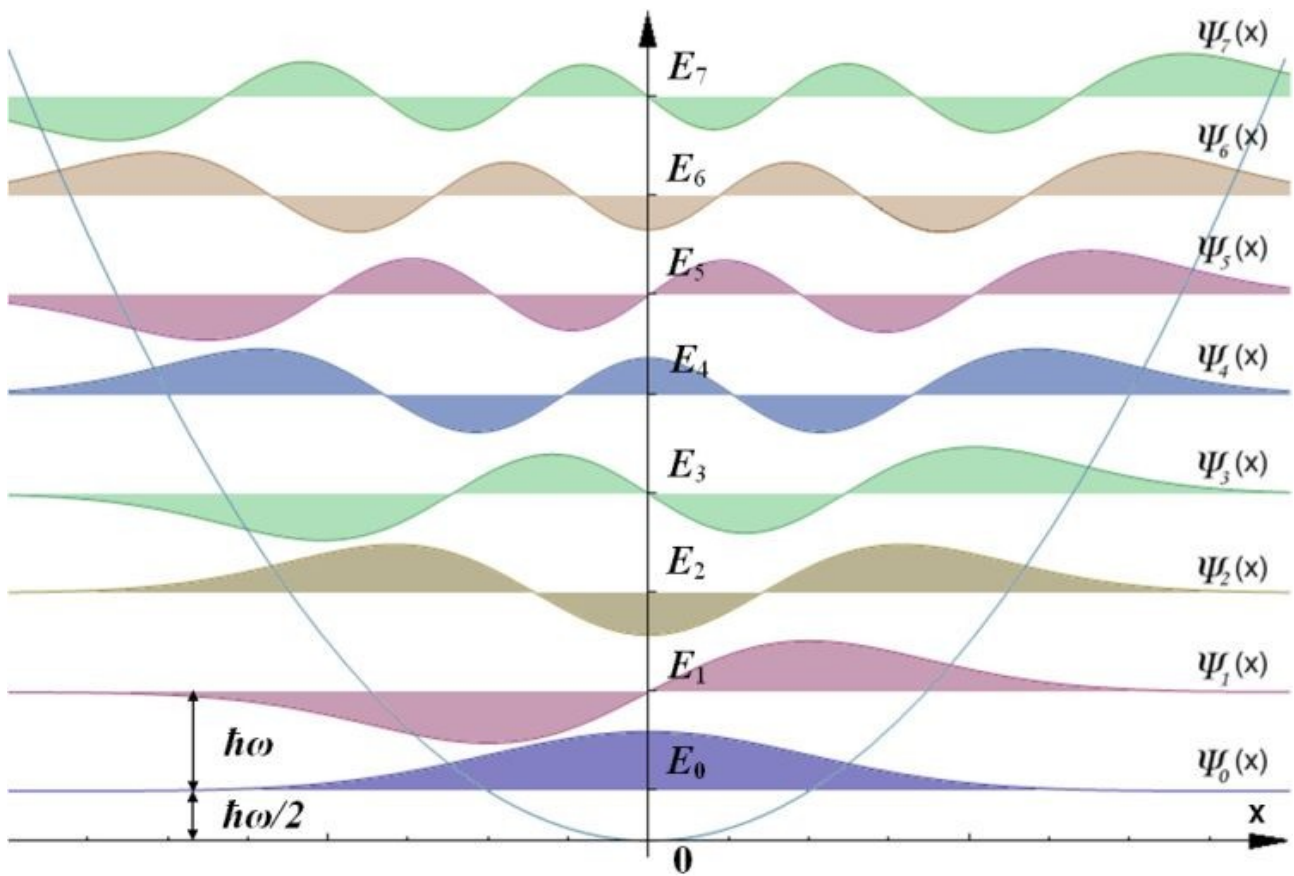
Certains modèles simples, bien que non tout à fait conformes à la réalité, peuvent être résolus analytiquement et s'avèrent très utiles :

- particule libre (potentiel nul) ;
- [oscillateur harmonique](#) quantique (potentiel quadratique, image ci dessous)
- particule se déplaçant sur un anneau ;
- particule dans un puits de potentiel rectangulaire ;
- particule dans un guide d'ondes annulaire ;
- particule dans un potentiel à symétrie sphérique ;

Dans les autres cas, il faut faire appel aux diverses techniques d'approximation :

- la [théorie des perturbations](#) fournit des expressions analytiques sous la forme de [développements asymptotiques](#) autour d'un problème non perturbé exactement soluble ;
- l'[analyse numérique](#) permet d'explorer des situations inaccessibles par la théorie de perturbation."

[https://fr.wikipedia.org/wiki/%C3%89quation\\_de\\_Schr%C3%B6dinger](https://fr.wikipedia.org/wiki/%C3%89quation_de_Schr%C3%B6dinger)



Par AllenMcC. — File:HarmOsziFunktionen.jpg, CC BY-SA 3.0,  
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=11623546>

Noter que pour les niveaux d'énergie impaires, on ne trouve JAMAIS la particule au milieu du puits !