Equation de Schrödinger

$$E = h\nu$$
$$= \hbar\omega \quad \text{avec} \quad \hbar := \frac{h}{2\pi}$$

(relation de Planck-Einstein)

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{avec } \vec{k} : \text{vecteur d'onde}$$
$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$
$$= \frac{h}{p}$$

(relation de de Broglie)

Equation d'onde : $\left(\frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \Delta\right)A = 0$

avec A, une onde plane : $A = A_0\, e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{x})}$

nous trouvons la pulsation ω et le vecteur d'onde $\vec{k}$

$$\omega = \frac{i}{A}\left(\partial_t A\right) \qquad \vec{k} = \frac{-i}{A}\left(\vec{\nabla} A\right)$$

$$\omega^2 = \frac{1}{A}\left(\partial_t^2 A\right) \qquad k^2 = \frac{-1}{A}\Delta A$$

On trouve par les relations de Planck-Einstein :

$$E = \frac{i\hbar}{\psi}\partial_t\psi \qquad \vec{p} = \frac{-i\hbar}{\psi}\vec{\nabla}\psi$$

$$E^2 = \frac{\hbar^2}{\psi}\partial_t^2\psi \qquad p^2 = \frac{-\hbar^2}{\psi}\Delta\psi$$

Rappelons pour une particule relativiste :

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2 \qquad \text{(formule d'Einstein)}$$

On trouve alors:

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \phi + c^2\hbar^2 \Delta \phi - c^4 m^2 \phi = 0$$ (éq. de Klein - Gordon)

Dans le cas d'une particule non relativiste dans un pot de potentiel:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r},t)$$

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\vec{r},t)\psi = \hat{H}\psi$$ (éq. de Schrödinger)

- éq. linéaire satisfaisant les relations de Planck-Einstein et de de Broglie
- l'opérateur $\hat{H}$ est Hermitien cela garantit; la conservation de la probabilité, des valeurs propres réelles et des vecteurs propres constituant une base de l'espace.

Particule libre sans potentiel:

$$i\hbar \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi$$

$$\psi(\vec{r},t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})}$$ avec $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$\rightarrow E = \frac{p^2}{2m}$

Solution générale de l'équation:

$$\psi(\vec{r},t) = \int d^3k \; g(\vec{k}) \frac{e^{-i\omega t + \vec{k}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}}$$

où $g(\vec{k})$ = transformée de Fourier de $\psi(\vec{r},t=0)$

Interprétation probabiliste :

$\psi(\vec{r},t)$, solution de l'éq. de Schrödinger

En normalisant : $\displaystyle\int d\vec{r}\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1$

Définissons $\rho(\vec{r},t) := |\psi(\vec{r},t)|^2$ la densité de probabilité

$$\partial_t \rho(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) = 0 \qquad \text{(éq. de continuité)}$$

avec $\vec{J}$ le courant de probabilité

Rappelons que ψ est complexe et que donc $\rho = \bar{\psi}\psi$

$$i\hbar\,\partial_t\rho = \left(i\hbar\,\partial_t\bar{\psi}\right)\psi + \left(i\hbar\,\partial_t\psi\right)\bar{\psi}$$
$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\bar{\psi}(\Delta\psi) - \psi(\Delta\bar{\psi})\right)$$

Sachant : $\displaystyle -i\hbar\,\partial_t\bar{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\psi} + V\bar{\psi}$

$$\partial_t\rho + \frac{\hbar}{2mi}\left(\bar{\psi}(\Delta\psi) - \psi(\Delta\bar{\psi})\right) = 0$$
$$\Leftrightarrow \partial_t\rho + \frac{\hbar}{2mi}\vec{\nabla}\cdot\left(\bar{\psi}(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\bar{\psi})\right) = 0$$

on trouve : $\displaystyle \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\bar{\psi}(\vec{\nabla}\psi) - \psi(\vec{\nabla}\bar{\psi})\right)$
$$= \frac{1}{m}\,\mathrm{Im}\left[\hbar\,\bar{\psi}(\vec{\nabla}\psi)\right]$$

$$\partial_t\int d^3r\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = \int d^3r\,\partial_t\rho(\vec{r},t)$$
$$= -\int d^3r\,\vec{\nabla}\cdot\vec{J} = -\int d^2\vec{r}\cdot\vec{J} = 0$$

(si ψ s'annule à l'infini)