

LA SÉPARATION DES VARIABLES AU SERVICE DE L'ÉQUATION DE...  
... SCHRÖDINGER !

complément au DS3 : CHIMIE NORD 86

\* En mécanique quantique, à une particule de masse  $m$ , évoluant dans un espace unidimensionnel (pour simplifier!), soumise à un potentiel scalaire indépendant du temps  $V(x)$ , on associe une fonction d'onde  $\Psi$  qui doit vérifier l'équation de SCHRÖDINGER: (Erwin SCHRÖDINGER, autrichien, 1887-1961)

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

où  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ,  $h$  étant la constante de PLANCK.

Le module de cette fonction d'onde joue un rôle très important, car on représente, grâce à lui, la probabilité de présence de la particule dans le segment  $[a,b]$  au temps  $t$  par  $P_{a,b}(t) = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx$ .  
En particulier, puisque'il est certain qu'elle ne quitte pas l'axe  $Ox$ ,  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$ . (P)

\* La méthode de séparation des variables consiste à rechercher les solutions de la forme  $\Psi(x,t) = y(x)z(t)$  (\*)

$\Psi$  du type (\*) est solution de (S)  $\Leftrightarrow i\hbar y(x)z'(t) = [-\frac{\hbar^2}{2m} y''(x) + V(x)y(x)] z(t)$

$$\Leftrightarrow \exists \omega; \begin{cases} i\hbar z'(t) = \hbar \omega z(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} y''(x) + V(x)y(x) = \hbar \omega y(x) \end{cases} \quad (\text{constante écrite: } \hbar \omega)$$

$$\Leftrightarrow \exists \omega; \begin{cases} z(t) = A e^{-i\omega t} \\ y''(x) - \frac{2m}{\hbar^2} V(x)y(x) = -\frac{2m\omega}{\hbar} y(x) \end{cases}$$

Faisons "un peu de ménage" en posant  $U(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} V(x)$ ,  $\lambda = -\frac{2m\omega}{\hbar}$ , et remarquons qu'on ne restreint rien à choisir  $A = 1$ , la constante pouvant être incorporée à  $y$ :

$$(S) \text{ a une solution } \Psi(x,t) = y(x)z(t); \begin{matrix} y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ z: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \end{matrix} \Leftrightarrow \begin{cases} \Psi(x,t) = e^{-i\omega t} y(x) \\ y''(x) - U(x)y(x) = \lambda y(x) \end{cases} \quad (S')$$

En outre  $|\Psi(x,t)|^2 = y^2(x)$ , et donc (P)  $\Leftrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} y^2(x) dx = 1$ .

Les solutions de ce type sont dites solutions stationnaires de (S), parce que  $|\Psi|^2$  est indépendant du temps.

On reconnaît donc là la position du problème Chimie NORD 86 !

\* Un mot maintenant sur sa solution :

la fonction  $U$  choisie est le modèle d'un puits de potentiel. Un potentiel

physique est toujours continu, mais une telle fonction est une excellente

schématisation de brusques variations du potentiel sur des distances très courtes; or, c'est précisément dans ces cas que les physiciens ont découvert que le modèle de la mécanique classique ne suffit plus, et que "les effets typiquement quantiques ne peuvent plus être négligés".

En particulier, le modèle classique prédirait  $|x| > 1 \Rightarrow \forall t, \Psi(x,t) = 0$  (la particule ne peut "s'échapper" du puits) alors qu'ici on trouvera des solutions non identiquement nulles hors de  $[-1, 1]$ : c'est le fameux "effet-tunnel" utilisé dans les semi-conducteurs.

Le fait qu'il n'y ait de solutions telles que: (P)  $\int_{-\infty}^{+\infty} y^2(x) dx = 1$  que pour certaines valeurs de  $\lambda$  est interprété comme quantification des niveaux d'énergie, le problème conduisant à n'en trouver qu'un nombre fini (ce qui est classique!), que l'on peut calculer entièrement dans ce cas simple.

Tous les calculs du problème figurent dans l'ouvrage de Claude COHEN-TANNOUDJI, où l'on peut lire:

"La marche à suivre pour déterminer les états stationnaires dans un "potentiel carré" est donc la suivante: dans toutes les régions où  $V(x)$  est constant, on écrit  $y(x)$  sous celles des deux formes [exp ou sin] qui convient; on "raccorde" ensuite ces fonctions en imposant la continuité de  $y(x)$  et  $y'(x)$  aux points où  $V(x)$  est discontinue."

