

L'équation de Schrödinger avec conditions aux limites Robin

Stam Nicolis¹

*Institut Denis Poisson, Université de Tours, Université d'Orléans, CNRS (UMR7013)
Parc Grandmont, Tours 37200, France*

Résumé

On étudie les propriétés de l'équation de Schrödinger, lorsque l'on impose des conditions aux limites Robin. On se concentre plus particulièrement au cas où le terme de réaction est de la forme $\beta(x)\phi(x, t)$ et l'on montre comment l'équation de diffusion, dans ce cas, peut être transformée en équation de Schrödinger en temps imaginaire. Ici on fait le chemin inverse et l'on discute similarités et différences.

1 Introduction

intro

On cherche à résoudre l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \beta \phi \quad (1) \quad \text{diffusio}$$

pour $x \in [0, L]$. On doit imposer une condition initiale et des conditions aux limites.

— *Conditions initiales :*

$$\phi(x, 0) = F(x) \quad (2) \quad \text{initcond}$$

— *Conditions aux limites :*

$$\phi(0, t) + \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}(0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \phi(L, t) + \gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}(L, t) = 0 \quad (3) \quad \text{Robinbc}$$

où γ est une constante, qui a, nécessairement, les dimensions d'une longueur. Les conditions (3) ^{Robinbc} s'appellent les conditions aux limites (homogènes) de Robin.

On peut se rendre compte que la solution de ce problème est, en fait, identique à la solution de l'équation d'onde, en présence de la dispersion, car le membre de droite de l'équation de Schrödinger (I) ^{diffusion} est le même que celle de l'équation d'ondes.

Concrètement, on écrit l'éq. (I) ^{diffusion} comme

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi + \frac{\beta}{\hbar} \phi \quad (4) \quad \text{schroed}$$

1. E-Mail : stam.nicolis@idpoisson.fr ; stam.nicolis@lmpt.univ-tours.fr

On pose, maintenant, $u \equiv x/L$, ce qui implique que l'équation prend la forme

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\phi &= -\frac{\hbar}{2mL^2}\frac{\partial^2}{\partial u^2}\phi + \frac{\beta}{\hbar}\phi \Leftrightarrow \\ \frac{2mL^2}{\hbar}i\frac{\partial}{\partial t}\phi &= -\frac{\partial^2}{\partial u^2}\phi + \frac{2mL^2\beta}{\hbar^2}\phi \Leftrightarrow \\ -i\frac{\partial}{\partial \tau}\phi &= \frac{\partial^2}{\partial u^2}\phi - \frac{2mL^2\beta}{\hbar^2}\phi \end{aligned} \quad (5) \quad \boxed{\text{schroed1}}$$

et les conditions aux limites deviennent

$$\phi(0, t) + \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial u}(0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \phi(1, t) + \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial u}(1, t) = 0 \quad (6) \quad \boxed{\text{Robinbcu}}$$

Ainsi l'on peut se rendre compte que les conditions aux limites et le membre de droite sont identiques aux conditions aux limites et membre de droite pour l'équation d'ondes ; la seule différence est que le paramètre β , pour l'équation d'ondes, correspond au paramètre $-2mL^2\beta/\hbar^2$ ici—et c'est important qu'il est négatif !

La différence entre l'équation d'ondes et l'équation de Schrödinger est que les équations pour les coefficients sont du premier ordre dans le temps et non du second ordre ; mais il y a le facteur imaginaire, qui impose une dépendance oscillatoire dans le temps :

$$\begin{aligned} -i\frac{d}{d\tau}c_* &= \left(-\frac{2mL^2\beta}{\hbar^2} + \frac{1}{\Gamma^2}\right)c_* \\ -i\frac{d}{d\tau}c_n &= \left(-n^2\pi^2 - \frac{2mL^2\beta}{\hbar^2}\right)c_n \end{aligned} \quad (7) \quad \boxed{\text{ceqs}}$$

Les solutions de ces équations sont données par les expressions

$$\begin{aligned} c_*(\tau) &= e^{i\tau\left(-\frac{2mL^2\beta}{\hbar^2} + \frac{1}{\Gamma^2}\right)}c_*(0) \\ c_n(\tau) &= e^{-i\tau\left(n^2\pi^2 + \frac{2mL^2\beta}{\hbar^2}\right)}c_n(0) \end{aligned} \quad (8) \quad \boxed{\text{csols}}$$

où les coefficients, $c_*(0)$ et $c_n(0)$ sont déterminés par la condition initiale :

$$\begin{aligned} c_*(0) &= \int_0^1 du \phi(u, 0) f_*(u) \\ c_n(0) &= \int_0^1 du \phi(u, 0) f_n(u) \end{aligned} \quad (9) \quad \boxed{\text{coeffsze}}$$

et la solution est donnée par l'expression

$$\phi(u, \tau) = c_*(\tau)f_*(u) + \sum_{n=1}^{\infty} c_n(\tau)f_n(u) \quad (10) \quad \boxed{\text{solschro}}$$

Parmi les quantités intéressantes de point de vue physique est la densité de probabilité, $\rho(u, \tau) = |\phi(u, \tau)|^2$ et le courant, $J(u, \tau)$, défini par

$$J(u, \tau) \equiv \text{Im} \left(\phi(u, \tau) \frac{\partial \phi^\dagger}{\partial u} \right) \quad (11) \quad \boxed{\text{Jprobab}}$$

et la raison est qu'elles doivent satisfaire l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \frac{\partial J}{\partial u} = 0 \quad (12) \quad \boxed{\text{contnuit}}$$

si le système est isolé.

Exercice 1. Calculer et tracer la densité $\rho(u, \tau) = |\phi(u, \tau)|^2$, ainsi que ses valeurs aux bords, $|\phi(0, \tau)|^2$ et $|\phi(1, \tau)|^2$.

Exercice 2. La relation de continuité est-elle satisfaite pour les conditions aux limites Robin ? Comparer le calcul analytique avec les résultats numériques.

Exercice 3. Si l'on prend comme condition initiale,

$$\phi(u, 0) = \frac{e^{-\frac{(u-0.5)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \quad (13) \quad \boxed{\text{initcond}}$$

le mouvement du paquet d'onde est-il périodique ?