# ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

OLIVIER CASTÉRA

Résumé. L'équation de Schrödinger se démontre en utilisant les relations de Planck-Einstein et de De Broglie, et la conservation de l'énergie mécanique. Elle fait donc partie du domaine de la mécanique quantique non relativiste.

Table des matières



## 1 Relations de Planck-Einstein et de De Broglie

Les relations de Planck-Einstein et de De Broglie montrent l'existence d'un passage entre des notions corpusculaires, l'énergie $E$ et la quantité de mouvement $\boldsymbol{p}$, et ondulatoires, la pulsation $\omega$ et le vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$,

$$\begin{cases} E = \hbar\omega \quad \text{relation de Planck-Einstein} & \text{(1a)} \\ \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \quad \text{relation de De Broglie} & \text{(1b)} \end{cases}$$

où $\hbar \triangleq h/(2\pi)$ est la constante de Planck $h$ divisée par $2\pi$, avec :

$$h \triangleq 6{,}626\,070\,15 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$$

C'est la présence de la constante de Planck qui fait que ces relations appartiennent au domaine de la mécanique quantique. Nous verrons que l'énergie $E$ est à la fois l'énergie d'une onde et l'énergie mécanique d'un corpuscule.

*Date*: 9 décembre 2020.

Ces relations nous amènent à supposer que ce que nous appellerons un quanton peut être modélisé soit par un corpuscule, soit par une onde.

**Remarque.** Des expériences récentes sur l'interféromètre de Franson montrent qu'en fait ces deux modèles ne suffisent pas à modéliser un quanton [1].

## 2 Dynamique du corpuscule

En mécanique classique non relativiste, l'équation de la dynamique du corpuscule associé au quanton est donnée par la relation fondamentale de la dynamique (RFD),

$$\sum \boldsymbol{F} = \frac{d\boldsymbol{p}}{dt}$$

dans laquelle il faut remplacer chaque force $\boldsymbol{F}$ exercée sur le corpuscule par un modèle de force représentatif de la situation. Nous pouvons exprimer l'équation de la dynamique du corpuscule en fonction de l'énergie mécanique totale $E_m$ et de la quantité de mouvement $\boldsymbol{p}$ grâce à la conservation de l'énergie mécanique, qui est équivalente à la RFD lorsque les modèles de forces dérivent tous d'une énergie potentielle [2]. Nous avons alors

$$\boxed{E_m = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}, t)} \tag{2}$$

où $\boldsymbol{p}^2/(2m)$ est l'énergie cinétique, et $V(\boldsymbol{r}, t)$ est l'énergie potentielle dont dérive la somme des forces. Le but est de trouver une équation de la dynamique, dite équation d'onde, pour l'onde associée à ce même quanton.

## 3 Fonction d'onde associée

### 3.1 Onde sinusoïdale

Les fonctions circulaires sinus et cosinus vont nous servir à contruire un modèle d'onde sinusoïdale. Prenons la fonction cosinus :

$$f(x) = \cos x$$

D'après l'annexe 9.1 p. 10, l'argument d'une fonction quelconque doit être de la forme $(x - vt)$ pour une propagation selon les $x$ croissants avec une vitesse $v$ :

$$f(x, t) = f(x - vt)$$

La repésentation de la fonction

$$\psi(x, t) = \cos(x - v_\varphi t)$$

donne l'illusion d'une propagation de l'onde selon l'axe des abscisses positifs à la *vitesse de phase* $v_\varphi$ de l'onde. Ce sont en fait des points qui oscillent verticalement indépendamment les uns des autres, aucune information ne passant d'un point à l'autre.

La valeur de $\psi$ est comprise entre 1 et $-1$. Pour supprimer cette limitation dans notre modèle d'onde périodique, nous introduisons $\psi_{max}$, l'*amplitude* du mouvement qui est alors sa valeur maximale :

$$\psi(x, t) = \psi_{max} \cos(x - v_\varphi t)$$

1. Valerio Scarani *Initiation à la physique quantique.* Vuibert, 2003.
2. Voir Mecanique classique.pdf

L'argument de toute fonction doit être sans dimension sinon la valeur de la fonction dépendrait de l'unité choisie (par exemple mètre ou pied). Par conséquent $x$ et $t$ sont ici deux variables sans dimension, et $v_\varphi$ est un paramètre sans dimension. Pour leur donner une dimension physique nous introduisons le *nombre d'onde* $k$. L'équation qui modélise l'onde périodique devient :

$$\psi(x,t) = \psi_{max}\cos[k(x - v_\varphi t)]$$

Nous voyons que le nombre d'onde doit être homogène à l'inverse d'une longueur pour que $x$ puisse être une longueur. En posant $\omega$ la *pulsation* ou *fréquence angulaire* de l'onde tel que,

$$v_\varphi \triangleq \frac{\omega}{k}$$

l'équation s'écrit :

$$\psi(x,t) = \psi_{max}\cos(kx - \omega t)$$

Pour que $\psi$ reste une sinusoïde, $k$ et $\omega$, et donc $v_\varphi$, doivent être des constantes dans l'espace et dans le temps.

Comme il n'y a pas de raison pour que $\psi(x = 0, t = 0)$ soit égale à $\psi_{max}$, nous introduisons la constante $\varphi_0$ :

$$\psi(x,t) = \psi_{max}\cos(kx - \omega t + \varphi_0) \tag{3}$$

$\varphi = kx - \omega t + \varphi_0$ est la *phase* du mouvement sinusoïdal, $\varphi_0$ est la phase à l'origine des temps et de l'espace.

## 3.2 Période spatiale

$\psi(x,t)$ étant une fonction cosinus, elle est périodique dans l'espace,

$$\begin{aligned}\psi_{max}\cos(kx - \omega t) &= \psi_{max}\cos(kx - \omega t + 2\pi)\\ &= \psi_{max}\cos[k(x + 2\pi/k) - \omega t]\end{aligned}$$

si bien que :

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \psi\left(x + 2\pi/k, t\right)\\ &= \psi\left(x + \lambda, t\right)\end{aligned}$$

où la période spatiale de l'onde $\lambda \triangleq 2\pi/k$ s'appelle la *longueur d'onde.*

## 3.3 Période temporelle

De la même façon, $\psi(x,t)$ est périodique dans le temps,

$$\begin{aligned}\psi_{max}\cos(kx - \omega t) &= \psi_{max}\cos(kx - \omega t + 2\pi)\\ &= \psi_{max}\cos[kx - \omega(t + 2\pi/\omega)]\end{aligned}$$

si bien que :

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \psi\left(x, t + 2\pi/\omega\right)\\ &= \psi\left(x, t + T\right)\end{aligned}$$

où la période temporelle de l'onde $T \triangleq 2\pi/\omega$ est appelée simplement *période* de l'onde.

Nous pouvons écrire l'équation de l'onde (3) p. 3 sous la forme :

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \psi_{max}\cos(kx - \omega t + \varphi_0)\\ &= \psi_{max}\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x - \frac{2\pi}{T}t + \varphi_0\right)\\ &= \psi_{max}\cos\left[2\pi\left(\sigma x - \nu t + \varphi_0\right)\right]\end{aligned}$$

où $\sigma \triangleq 1/\lambda$ est la *fréquence spatiale* de l'onde, et où la fréquence temporelle de l'onde $\nu \triangleq 1/T$ est appelée simplement *fréquence* de l'onde.

En résumé, pour la partie spatiale nous avons :

$$k = 2\pi/\lambda = 2\pi\sigma$$
$$\lambda = 2\pi/k = 1/\sigma$$
$$\sigma = 1/\lambda = k/(2\pi)$$

On mesure alors la longueur d'onde $\lambda$ ou la fréquence spatiale $\sigma$ et l'on calcule $k$. Pour la partie temporelle,

$$\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$$
$$T = 2\pi/\omega = 1/\nu$$
$$\nu = 1/T = \omega/(2\pi)$$

On mesure la période $T$ ou la fréquence $\nu$ et l'on calcule $\omega$. Le passage entre les parties spatiale et temporelle se fait par la relation :

$$\omega = kv_\varphi = 2\pi v_\varphi/\lambda = 2\pi\sigma v_\varphi$$
$$k = \omega/v_\varphi = 2\pi/(Tv_\varphi) = 2\pi\nu/v_\varphi$$

### 3.4 Oscillateur harmonique

Considérons un oscillateur harmonique libre à un degré de liberté, par exemple une masse $m$ attachée à un ressort de raideur k constante, qui oscille dans la partie linéaire du ressort. L'équation horaire de la masse

$$x(t) = x_{max}\cos(\omega t + \varphi_0)$$

est du type de l'équation (3), où la fonction $\psi$ est l'élongation $x$. Le modèle de force de rappel du ressort $-\mathrm{k}x$ dérive de l'énergie potentielle $\frac{1}{2}\mathrm{k}x^2$. L'énergie mécanique $E$ est la somme de l'énergie potentielle et cinétique, cette dernière étant nulle à l'élongation maximale $x_{max}$, nous avons :

$$E = \tfrac{1}{2}\mathrm{k}x_{max}^2$$

L'énergie mécanique est donc proportionnelle au carré de l'amplitude du mouvement de la masse.

### 3.5 Fonction d'onde

Pour faire le lien entre les représentations corpusculaire et ondulatoire, nous associons l'énergie de l'onde $\psi$, c'est à dire le carré de son amplitude $\psi_{max}$, à la probabilité de présence du corpuscule. $\psi$ est alors appelée *fonction d'onde associée* au corpuscule. En un point donné la probabilité de présence est nulle, il faut intégrer sur un domaine de l'espace pour obtenir une valeur non nulle. Le carré de l'amplitude $\psi_{max}$ de l'onde associée est donc la densité volumique de probabilité de présence du corpuscule,

$$\psi_{max}^2 = \frac{dP}{dv}$$

si bien que la probabilité de présence du corpuscule dans le volume $V$ s'écrit :

$$P(V) = \int_V \psi_{max}^2\, dv$$

Lorsqu'on l'intègre sur tout le volume que peut occuper le quanton, la probabilité de présence de celui-ci doit être égale à un :

$$\int_{V_{total}} \psi_{max}^2\, dv = 1$$

Nous allons voir que la fonction cosinus ne peut servir de fonction d'onde associée. Soit la fonction d'onde donnée par la relation (3) :

$$\psi(x,t) = \psi_{max}\cos(kx - \omega t)$$

Avec la relation (1b) de De Broglie, nous avons :

$$\psi(x,t) = \psi_{max}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x - \omega t\right)$$

A l'instant $t_0 = 0$,

$$\psi(x,t_0) = \psi_{max}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)$$

la fonction d'onde s'annule aux points d'abscisse $x_n$ tels que,

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{Z}, \qquad \frac{p}{\hbar}x_n &= \frac{\pi}{2} + n\pi \\ x_n &= \frac{h}{2p} + \frac{nh}{p} \end{aligned}$$

et la distance entre deux points pour lesquels la fonction d'onde est nulle s'écrit :

$$x_{n+1} - x_n = \frac{h}{p}$$

Or si l'observateur est dans un référentiel animé d'une vitesse v, l'impulsion du quanton devient $p' = p - m\mathrm{v}$, et les points pour lesquels la fonction d'onde est nulle sont tels que :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{Z}, \qquad \frac{p'}{\hbar}x_n &= \frac{\pi}{2} + n\pi \\ x_n &= \frac{h}{2p'} + \frac{nh}{p'} \\ &= \frac{h}{2(p - m\mathrm{v})} + \frac{nh}{p - m\mathrm{v}} \end{aligned}$$

La distance entre deux points pour lesquels la fonction d'onde est nulle s'écrit :

$$x_{n+1} - x_n = \frac{h}{p - m\mathrm{v}}$$

Ceci est impossible car la distance entre deux points est un invariant en physique non relativiste.

## 4 Notation complexe

Nous allons tirer avantage de la notation complexe pour les fonctions circulaires. Il est plus simple de différentier ou d'intégrer la fonction exponentielle car elle ne change pas de forme. Nous effectuerons donc le passage,

$$\cos(kx - \omega t) \to e^{i(kx-\omega t)}$$

et nous ne devrions conserver que la partie réelle du résultat. Cette méthode est justifiée en annexe 9.2. En supposant nulle la phase à l'origine, le modèle d'onde périodique (3) p. 3 s'écrit alors :

$$\psi(x,t) = \psi_{max}e^{i(kx-\omega t)} \tag{4}$$

et nous avons :

$$\|\psi(x,t)\|^2 = \psi_{max}^2$$

C'est donc maintenant le carré du module de l'onde associée qui représente la densité volumique de probabilité de présence du quanton :

$$\|\psi(x,t)\|^2 = \frac{dP}{dv}$$

$$\boxed{P(V) = \int_V \|\psi(x,t)\|^2 \, dv}$$

Lorsque l'on intègre le module carré de $\psi$ sur tout le volume que peut occuper le quanton, la probabilité de présence de celui-ci doit être égale à un.

$$\int_{V_{total}} \|\psi(x,t)\|^2 \, dv = 1$$

$\psi$ est appelée amplitude de densité de probabilité de présence du quanton. Le problème rencontré avec la fonction d'onde cosinus reste présent avec la forme complexe associée :

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= \psi_{max} e^{i(kx-\omega t)} \\ &= \psi_{max} e^{i(\frac{P}{\hbar}x-\omega t)} \end{aligned}$$

A l'instant $t_0 = 0$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi(x,t_0) = \psi_{max} e^{i\frac{P}{\hbar}x}$$

Elle ne s'annule en aucun point mais elle vaut $\psi_{max}$ au points d'abscisse $x_n$ tels que :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{Z}, \qquad \frac{p}{\hbar} x_n &= 2\pi n \\ x_n &= \frac{2nh}{p} \end{aligned}$$

Si l'observateur est dans un référentiel animé d'une vitesse v, l'impulsion du quanton devient $p' = p - m\mathrm{v}$, et les points pour lesquels la fonction d'onde vaut $\psi_{max}$ sont tels que :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{Z}, \qquad \frac{p'}{\hbar} x_n &= 2\pi n \\ x_n &= \frac{2nh}{p - m\mathrm{v}} \end{aligned}$$

La distance entre deux points pour lesquels la fonction d'onde vaut $\psi_{max}$ s'écrit,

$$x_{n+1} - x_n = \frac{2h}{p - m\mathrm{v}}$$

ce qui est impossible, elle ne peut dépendre de la vitesse de l'observateur.

## 5 L'onde plane

Considérons par exemple un gaz contenu dans une enceinte parallélépipédique. Si l'une des parois de l'enceinte oscille parallèlement à elle-même, une onde plane de pression est créée dans le gaz. Un plan d'onde est alors défini comme un plan dans lequel la pression est constante en tous les points de ce plan.

Soit $O$ le centre d'un repère, et soit $P$ un point quelconque de ce plan d'onde. Appelons $\boldsymbol{r}$ le rayon vecteur $\boldsymbol{OP}$, et $\boldsymbol{s}$ le vecteur unitaire de direction et de sens celui de la propagation du plan d'onde. Le plan d'onde est défini par l'ensemble des points $P$ tels que, à un instant $t$ fixé,

$$\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{s} = C(t)$$

projection de $\boldsymbol{r}$ sur $\boldsymbol{s}$, où $C(t)$ est la distance du point $O$ au plan d'onde à l'instant $t$, comme indiqué sur la figure 1.

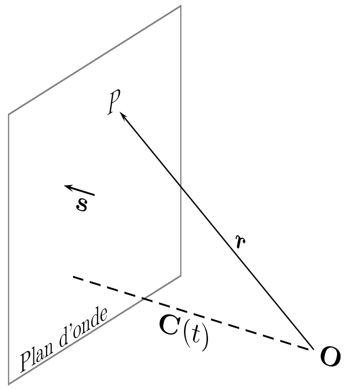


FIG 1. Plan d'onde

Nous pouvons maintenant généraliser à une onde plane, l'équation d'onde (4) p. 5 :

$$\psi(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{s},t)=\psi_{max}e^{i(k\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{s}-\omega t)}$$

Pour l'exemple du gaz confiné, nous pouvons vérifier que lorsque l'on se situe dans le plan d'onde, c'est à dire lorsque le produit scalaire $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{s}$ est constant, la pression $\psi$ est constante dans l'espace, et ne dépend que du temps.

À partir du nombre d'onde défini au paragraphe 3.1 p. 2, on définit le *vecteur d'onde* $\boldsymbol{k}\triangleq k\boldsymbol{s}$. L'onde plane s'écrit :

$$\boxed{\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi_{max}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}}\tag{5}$$

## 6 Le paquet d'ondes

Le modèle le plus simple d'onde plane périodique est donnée par l'équation (5). Sa fréquence $\nu=\omega/(2\pi)$ étant constante cette onde est dite *monochromatique* (l'onde n'a qu'une fréquence, donc qu'une couleur). Cette onde est modélisée par une fonction cosinus réelle plus une fonction sinus imaginaire, toutes les deux ayant une extension spatiale infinie. Il est par conséquent impossible de lui associer une particule localisée dans l'espace, d'extension spatiale finie, et de plus nous avons vu qu'elle ne peut constituer une fonction d'onde associée. En additionnant plusieurs ondes planes monochromatiques de fréquences voisines (ou de nombres d'onde voisins puisque $k=2\pi\nu/v_\varphi$) on observe le phénomène de battement. Des maxima d'amplitude apparaissent aux endroits où ces ondes interfèrent de façon constructive, et des minima d'amplitude aux endroits où elles interfèrent de façon destructive. Plus l'on superpose d'ondes, plus les maxima s'espacent et forment des « paquets d'ondes », et plus l'amplitude entre les maxima tend vers zéro (voir l'annexe 9.3). Grâce à une intégrale sur $\boldsymbol{k}$, nous pouvons superposer une infinité d'ondes planes (ayant donc toutes un vecteur d'onde différent) :

$$\boxed{\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi_{max}\int_{\boldsymbol{k}_0-\Delta\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{k}_0+\Delta\boldsymbol{k}}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}d\boldsymbol{k}}\tag{6}$$

Il n'existe alors plus qu'un seul paquet d'ondes, les autres étant renvoyés à l'infini. Ce paquet d'ondes sera notre modèle ondulatoire du quanton.

## 7 Vitesse de groupe

Trouvons l'expression de la vitesse du paquet d'ondes. On suppose que $\omega$ varie en fonction de $k$, non pas pour une même onde puisque ce sont des constantes, mais lorsque l'on passe d'une onde à l'autre dans le paquet d'ondes. Lorsque c'est le cas

$$\omega = \omega(k)$$

et le milieu est dit *dispersif*. La fonction d'onde associée au quanton (6) p. 7 devient

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi_{max} \int_{\boldsymbol{k}_0 - \Delta \boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{k}_0 + \Delta \boldsymbol{k}} e^{i[\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega(k) t]} d\boldsymbol{k}$$

et nous pouvons effectuer le développement limité à l'ordre un de la pulsation au voisinage de $k_0$ :

$$\begin{aligned}
\omega(k) &= \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k - k_0) \\
&= \omega_0 + \frac{d\omega}{dk} k - \frac{d\omega}{dk} k_0
\end{aligned}$$

Pour une propagation de l'onde selon l'axe des abscisses $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} = kx$ :

$$\begin{aligned}
kx - \omega t &= kx - \omega_0 t - \frac{d\omega}{dk} k t + \frac{d\omega}{dk} k_0 t \\
&= k_0 x - \omega_0 t - \left( \frac{d\omega}{dk} t - x \right) (k - k_0)
\end{aligned}$$

La fonction d'onde associée au quanton s'écrit alors

$$\psi(x, t) = \psi_{max} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{i\left[k_0 x - \omega_0 t - \left(\frac{d\omega}{dk} t - x\right)(k - k_0)\right]} dk$$

où $\Delta k$ est petit pour rester au voisinage de $k_0$.

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \psi_{max} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)(k - k_0)} d(k - k_0) \\
&= \psi_{max} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \left[ \frac{e^{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)(k - k_0)}}{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)} \right]_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \\
&= \psi_{max} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \times \frac{e^{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)\Delta k} - e^{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)\Delta k}}{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)} \\
&= \psi_{max} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \times \frac{2i \sin\left[\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)\Delta k\right]}{i\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)} \\
&= 2\psi_{max} \Delta k \frac{\sin\left[\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)\Delta k\right]}{\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)\Delta k} \times e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \\
&= 2\psi_{max} \Delta k \operatorname{sinc}\left[\left(x - \frac{d\omega}{dk} t\right)\Delta k\right] \times e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}
\end{aligned}$$

Nous retrouvons le terme de phase $\exp[i(k_0 x - \omega_0 t)]$. Les autres termes forme l'amplitude de l'onde. La variation d'amplitude se propage à la vitesse :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

appelée *vitesse de groupe*. Nous avons alors :

$$\begin{aligned}
v_g &= \frac{d(k v_\varphi)}{dk} \\
&= v_\varphi + k \frac{dv_\varphi}{dk}
\end{aligned}$$

où $dv_\varphi/dk$ est la variation de $v_\varphi$ en fonction de $k$ lorsque l'on passe d'une onde à une autre.

La vitesse de groupe est limitée à la vitesse de la lumière car c'est la vitesse maximale du quanton lorsqu'il est modélisé par un corpuscule. Par contre, chaque onde monochromatique servant à la construction du paquet d'ondes, prise individuellement, ne modélise rien de physique, c'est pourquoi leur vitesse de phase $v_\varphi$ n'est pas limitée à la vitesse de la lumière (voir l'annexe 9.4).

## 8 Dynamique du paquet d'ondes

Dans le cas général, l'amplitude $\psi_{max}$ de chaque onde est une fonction $f(\boldsymbol{k})$ du vecteur d'onde, nous avons comme fonction d'onde associée au quanton :

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \int_{\boldsymbol{k}_0-\Delta\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{k}_0+\Delta\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k}) e^{i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega(k)t]} d\boldsymbol{k}$$

Nous cherchons l'équation d'onde dont est solution la fonction d'onde $\psi(\boldsymbol{r},t)$. En se servant des relations de passage (1) p. 1, on réécrit la fonction d'onde avec les variables $E = \hbar\omega$ et $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$, ce qui la fait passer dans le domaine de la mécanique quantique en introduisant la constante de Planck :

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k}$$

Pour construire l'équation différentielle, on dérive la fonction d'onde $\psi(\boldsymbol{r},t)$ par rapport au temps :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k} = -i\,\frac{E}{\hbar}\int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k}$$

Nous voyons que nous avons l'équivalence suivante entre les opérateurs,

$$\frac{\partial}{\partial t} \qquad \leftrightarrow \qquad \times(-i)\frac{E}{\hbar}$$

c'est à dire,

$$\times E \qquad \leftrightarrow \qquad \times i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} \tag{7}$$

Multiplier la fonction d'onde $\psi(\boldsymbol{r},t)$ par $E$ est équivalent à dériver la fonction d'onde $\psi(\boldsymbol{r},t)$ par rapport au temps et à multiplier le résultat par $i\hbar$.

De même, en dérivant la fonction d'onde $\psi(\boldsymbol{r},t)$ par rapport à l'espace,

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k} = i\,\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}\int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k}$$

nous avons l'équivalence entre opérateurs,

$$\times\boldsymbol{p} \qquad \leftrightarrow \qquad \times(-i)\hbar\,\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}$$

En dérivant une seconde fois par rapport à l'espace,

$$\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}\int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k} = -\frac{\boldsymbol{p}^2}{\hbar^2}\int f(\boldsymbol{k}) e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} d\boldsymbol{k}$$

nous avons,

$$\times\boldsymbol{p}^2 \qquad \leftrightarrow \qquad \times(-)\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2} \tag{8}$$

Maintenant que nous avons ces équivalences entre opérateurs, multiplions chaque membre de l'équation de conservation de l'énergie (2) par $\psi(\boldsymbol{r},t)$ :

$$E_m\psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\,\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\,\psi(\boldsymbol{r},t)$$

Nous supposons l'égalité entre l'énergie mécanique $E_m$ du corpuscule, et l'énergie $E$ de l'onde qui lui est associée, et nous remplaçons les opérateurs par leurs équivalents donnés par (7) et (8) :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\boldsymbol{r},t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}\,\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\,\psi(\boldsymbol{r},t)$$

La multiplication par $V(\boldsymbol{r},t)$ étant aussi un opérateur, on regroupe les deux opérateurs du membre de droite pour n'en former qu'un seul, et l'on obtient l'équation de Schrödinger :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\boldsymbol{r},t) = \left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2} + V(\boldsymbol{r},t)\right]\psi(\boldsymbol{r},t)}$$

**Définition 8.1.** On appelle *Hamiltonien*[3] et l'on note $\hat{H}$, l'opérateur,

$$\hat{H} \triangleq -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2} + V(\boldsymbol{r},t)$$

si bien que l'équation de Schrödinger s'écrit aussi,

$$\boxed{\hat{H}\,[\psi(\boldsymbol{r},t)] = E\,\psi(\boldsymbol{r},t)}$$

où $E$ est l'énergie mécanique.

# 9 Annexes

## 9.1 Equation de propagation

Soit $\psi = f(x)$ une fonction quelconque de $x$. Si $a$ est une constante positive, $\psi = f(x-a)$ représente la même fonction translatée de $a$ dans le sens des $x$ croissants puisque la valeur $f(0)$ qui était en $x = 0$ se retrouve en $x = a$. Faisons maintenant intervenir le temps $t$ pour décrire une « impulsion » qui se propage sans déformation à la vitesse $v$ selon l'axe des $x$ croissants. Elle est représentée par une fonction des variables $x$ et $t$,

$$f(x,t) = f(x - vt)$$

$f(x+vt)$ représente bien sûr une propagation selon les $x$ décroissants.

## 9.2 Notation complexe

D'après la formule de De Moivre[4],

$$e^{i(kx-\omega t)} = \cos(kx-\omega t) + i\sin(kx-\omega t)$$

soit :

$$\cos(kx-\omega t) = \mathcal{R}e\{e^{i(kx-\omega t)}\}$$
$$\sin(kx-\omega t) = \mathcal{I}m\{e^{i(kx-\omega t)}\}$$

En notant $a$ la partie réelle, et $b$ la partie imaginaire, nous devons justifier le passage $a \to a+ib$ et le retour en prenant la partie réelle du résultat. Soient $a$ une fonction d'onde et $a'$ une autre fonction d'onde :

3. Voir Mecanique analytique.pdf
4. Voir Trigonometrie.pdf

*9.2.1 Addition de deux fonctions d'onde*

Lors de l'addition complexe de deux nombres complexes $a + ib$ et $a' + ib'$, les parties réelles s'additionnent, ainsi que les parties imaginaires, si bien que la somme des parties réelles est égale à la partie réelle de la somme :

$$\begin{aligned} a + a' &= \mathcal{R}e\{(a + a') + i(b + b')\} \\ &= \mathcal{R}e\{(a + ib) + (a' + ib')\} \end{aligned}$$

De même pour les parties imaginaires :

$$\begin{aligned} b + b' &= \mathcal{I}m\{(a + a') + i(b + b')\} \\ &= \mathcal{I}m\{(a + ib) + (a' + ib')\} \end{aligned}$$

Autrement dit, nous pouvons effectuer le passage $a \to a+ib$, additionner, puis prendre la partie réelle du résultat.

**Remarque.** Il n'existe pas de formule pour la multiplication complexe :

$$a \times a' \neq \mathcal{R}e\{(a + ib) \times (a' + ib')\}$$

mais nous n'aurons pas besoin de multiplier des fonctions d'onde.

*9.2.2 Dérivée et intégrale d'une fonction d'onde*

Si $a$, $b$, $a'$, et $b'$ sont des fontions du paramètre $t$, alors la dérivée de la partie réelle est égale à la partie réelle de la dérivée :

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= \mathcal{R}e\left\{\frac{da}{dt} + i\frac{db}{dt}\right\} \\ &= \mathcal{R}e\left\{\frac{d}{dt}(a + ib)\right\} \end{aligned}$$

De même pour l'intégration :

$$\begin{aligned} \int adt &= \mathcal{R}e\left\{\int adt + i\int bdt\right\} \\ &= \mathcal{R}e\left\{\int (a + ib)dt\right\} \end{aligned}$$

En résumé, nous avons montré que pour additionner des mouvements sinusoïdaux, nous pouvons additionner des exponentielles :

$$\begin{aligned} \cos(k_1x - \omega_1t) + \cos(k_2x - \omega_2t) &= \mathcal{R}e\{e^{i(k_1x-\omega_1t)}\} + \mathcal{R}e\{e^{i(k_2x-\omega_2t)}\} \\ &= \mathcal{R}e\{e^{i(k_1x-\omega_1t)} + e^{i(k_2x-\omega_2t)}\} \end{aligned}$$

De même nous différentierons et intégrerons des exponentielles :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\cos(kx - \omega t) &= \frac{d}{dt}\mathcal{R}e\{e^{i(kx-\omega t)}\} \\ &= \mathcal{R}e\left\{\frac{d}{dt}e^{i(kx-\omega t)}\right\} \\ \int \cos(kx - \omega t)dt &= \int \mathcal{R}e\{e^{i(kx-\omega t)}\}dt \\ &= \mathcal{R}e\left\{\int e^{i(kx-\omega t)}dt\right\} \end{aligned}$$

### 9.3 Paquet d'ondes

Les figures suivantes montrent la formation des paquets d'ondes isolés à mesure que l'on additionne des fonctions sinus de fréquences proches :

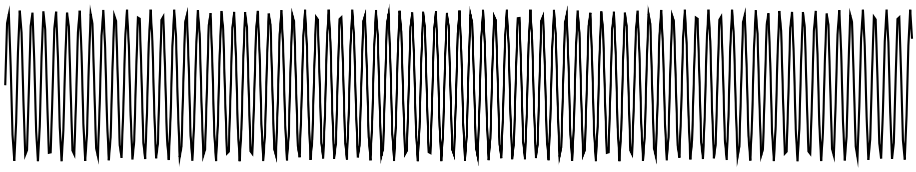

FIG 2. $\sin 40x$

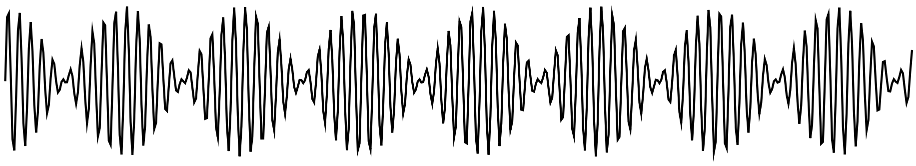

FIG 3. $\frac{1}{2}(\sin 40x + \sin 44x)$

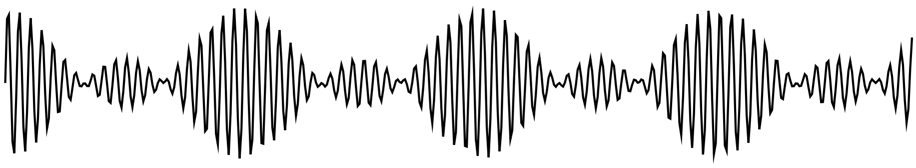

FIG 4. $\frac{1}{3}(\sin 40x + \sin 42x + \sin 44x)$

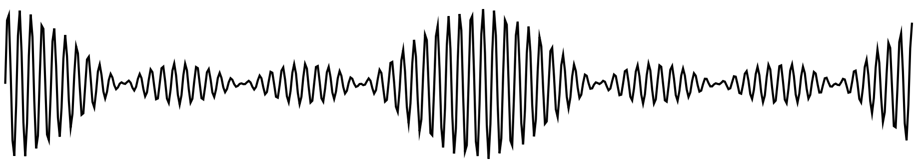

FIG 5. $\frac{1}{4}(\sin 40x + \sin 41x + \sin 42x + \sin 43x)$

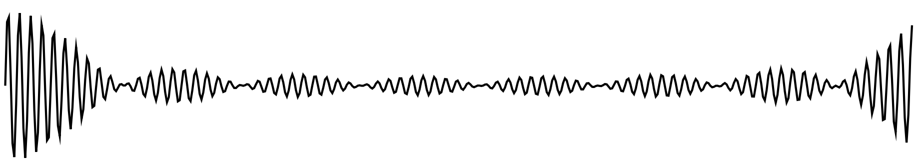

FIG 6. $\frac{1}{8}(\sin 40x + \sin 40.5x + \sin 41x + \sin 41.5x + \sin 42x + \sin 42.5x + \sin 43x + \sin 43.5x)$

## 9.4 Vitesse de phase

Certains phénomènes donnent l'illusion de se propager plus vite que la vitesse de la lumière. Par exemple un chenillard constitué par un ensemble de diodes alignées qui s'allument les unes après les autres. Si on allume toutes les diodes en même temps la vitesse apparente de propagation (fictive) du signal est infinie. Cela est possible parce que l'allumage d'une diode n'est pas assujetti à l'allumage de la diode précédente, il n'y a pas transport d'information d'une diode à la suivante, ni propagation d'un quelconque signal. De même une ola dans un stade pourrait théoriquement dépasser la vitesse de la lumière si chaque personne décidait de se lever à un instant précis, sans se soucier de ce que font les personnes sur ses côtés. Il n'y aurait alors pas de transport d'information (d'une personne à l'autre). Si toutes les personnes se lèvent en même temps la vitesse de la ola est infinie. Un dernier exemple est donné par le déferlement d'une vague. Si la vague casse en une fois, la vitesse de déferlement est infinie.

Dans notre modèle, l'onde monochromatique ne transporte pas d'information, contrairement au paquet d'ondes. Sa vitesse n'est pas limitée à celle de la lumière.

*Email address*: `o.castera@free.fr`
*URL*: `http://o.castera.free.fr/`