

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

A Relations de Planck-Einstein et de de Broglie	1
B Dynamique du corpuscule	2
C Fonction d'onde associée	2
C.1 Onde sinusoïdale	2
C.2 Période spatiale	3
C.3 Période temporelle	4
C.4 Oscillateur harmonique	5
C.5 Fonction d'onde	5
D Notation complexe	6
E L'onde plane harmonique	7
F Le paquet d'ondes	8
G Vitesse de groupe	9
H Dynamique du paquet d'ondes	10
I Annexes	11
I.1 Équation de propagation	11
I.2 Notation complexe	12
I.3 Paquet d'ondes	13
I.4 Vitesse de phase	14

A 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 \mathbf{p} , et ondulatoires, la pulsation ω et le vecteur d'onde \mathbf{k} ,

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

où $\hbar \stackrel{\text{def}}{=} h/(2\pi)$ est le quantum d'action h appelé constante de Planck, divisée par 2π , avec :

$$h \stackrel{\text{def}}{=} 6,626\,070\,15 \times 10^{-34} \text{ J/s}$$

C'est la présence du quantum d'action 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.

Ces relations nous amènent à supposer que ce que nous appellerons un quanton peut être modélisé soit par un corpuscule, soit par une onde. Cependant, des expériences récentes sur l'interféromètre de Franson montrent qu'en fait ces deux modèles ne suffisent pas à modéliser un quanton¹.

B 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),

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

dans laquelle il faut remplacer chaque force \mathbf{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 \mathbf{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 potentielle². Nous avons alors

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

où $\mathbf{p}^2/(2m)$ est l'énergie cinétique, et $V(\mathbf{r}, t)$ 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.

C Fonction d'onde associée

C.1 Onde sinusoïdale

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

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

D'après l'annexe I.1 p. 11, 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 représentation de la fonction

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

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

C FONCTION D'ONDE ASSOCIÉE

donne l'illusion d'une propagation de l'onde selon l'axe des abscisses positifs à la *vitesse de phase* v_φ de l'onde. Ce sont en fait des points qui oscillent verticalement indépendamment les uns des autres, aucune information n'est transmise d'un point à l'autre.

L'amplitude de ψ (sa valeur à un instant donné) est comprise entre 1 et -1 . Pour supprimer cette limitation dans notre modèle d'onde périodique, nous introduisons *l'amplitude maximale* ψ_{max} du mouvement :

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

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_φ est un paramètre sans dimension. Pour leur donner une dimension physique nous introduisons le *nombre d'onde* k homogène à l'inverse d'une longueur pour que x puisse être une longueur. L'équation qui modélise l'onde périodique devient :

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

En posant ω la *pulsation* ou *fréquence angulaire* de l'onde tel que,

$$v_\varphi \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\omega}{k}$$

l'équation s'écrit :

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

Pour que ψ reste une sinusoïde, k et ω , et donc v_φ , doivent être des constantes dans l'espace et dans le temps. Puisqu'il n'y a pas de raison pour qu'à l'origine des temps et de l'espace $\psi(0, 0)$ soit égale à ψ_{max} , nous introduisons la constante φ_0 telle que

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

où

$$\varphi = kx - \omega t + \varphi_0$$

est la *phase* du mouvement sinusoïdal, φ_0 est la phase à l'origine des temps et de l'espace.

C.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

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

où la période spatiale de l'onde

$$\lambda \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi/k$$

s'appelle la *longueur d'onde*.

C.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

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

où la période temporelle de l'onde est appelée simplement *période* de l'onde :

$$T \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi/\omega$$

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

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

où

$$\sigma \stackrel{\text{def}}{=} 1/\lambda$$

est la *fréquence spatiale* de l'onde, et où la fréquence temporelle de l'onde est appelée simplement *fréquence* de l'onde :

$$\nu \stackrel{\text{def}}{=} 1/T$$

En résumé, pour la partie spatiale nous avons :

$$\begin{cases} k = 2\pi/\lambda = 2\pi\sigma \\ \lambda = 2\pi/k = 1/\sigma \\ \sigma = 1/\lambda = k/(2\pi) \end{cases}$$

On mesure alors la longueur d'onde λ ou la fréquence spatiale σ et l'on calcule k . Pour la partie temporelle :

$$\begin{cases} \omega = 2\pi/T = 2\pi\nu \\ T = 2\pi/\omega = 1/\nu \\ \nu = 1/T = \omega/(2\pi) \end{cases}$$

On mesure la période T ou la fréquence ν et l'on calcule ω . Le passage entre les parties spatiale et temporelle se fait par les relations :

$$\begin{cases} \omega = kv_\varphi = 2\pi v_\varphi/\lambda = 2\pi\sigma v_\varphi \\ k = \omega/v_\varphi = 2\pi/(Tv_\varphi) = 2\pi\nu/v_\varphi \end{cases}$$

C.4 Oscillateur harmonique

Considérons un oscillateur harmonique libre à un degré de liberté, par exemple une masse 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 ψ est l'élongation x . Le modèle de force de rappel du ressort, $-kx\mathbf{i}$, dérive de l'énergie potentielle $\frac{1}{2}kx^2$:

$$-kx\mathbf{i} = -\mathbf{grad} \left(\frac{1}{2}kx^2 \right)$$

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 :

$$E = \frac{1}{2}kx_{max}^2$$

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

C.5 Fonction d'onde

Pour faire le lien entre les représentations corpusculaire et ondulatoire, nous associons l'énergie de l'onde ψ , c'est à dire le carré de son amplitude maximale ψ_{max} , à la probabilité de présence du corpuscule. ψ 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 maximale ψ_{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 $t_0 = 0$,

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

D FONCTION D'ONDE ASSOCIÉE

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

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad \frac{p}{\hbar} x_n = \frac{\pi}{2} + n\pi$$
$$x_n = \frac{h}{2p} + \frac{nh}{p}$$

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 $p' = p - mv$, et les points pour lesquels la fonction d'onde est nulle sont tels que :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad \frac{p'}{\hbar} x_n = \frac{\pi}{2} + n\pi$$
$$x_n = \frac{h}{2p'} + \frac{nh}{p'}$$
$$= \frac{h}{2(p - mv)} + \frac{nh}{p - mv}$$

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

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

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

D Notation complexe

Nous tirons 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 effectuons donc le passage

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

et nous ne conservons que la partie réelle du résultat. Cette méthode est justifiée en annexe I.2. En supposant nulle la phase à l'origine, le modèle d'onde périodique (3) p. 3 s'écrit

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

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 :

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

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

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

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

E NOTATION COMPLEXE

ψ 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 :

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

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 ψ_{max} aux points d'abscisses x_n tels que :

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

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

$$\begin{aligned}\forall n \in \mathbb{Z}, \quad \frac{p'}{\hbar} x_n &= 2\pi n \\ x_n &= \frac{2n\hbar}{p - mv}\end{aligned}$$

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

$$x_{n+1} - x_n = \frac{2\hbar}{p - mv}$$

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

E L'onde plane harmonique

Considérons 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 défini comme un plan dans lequel la pression est égale en tout point de ce plan.

Soit O le centre d'un repère, et soit P un point quelconque de ce plan d'onde. Appelons \mathbf{r} le rayon vecteur \mathbf{OP} , et \mathbf{s} le vecteur vitesse unitaire de direction et de sens celui de la propagation du plan d'onde :

$$\mathbf{s} = \mathbf{v} / \|\mathbf{v}\|$$

Le plan d'onde est défini par l'ensemble des points P tels qu'à un instant t fixé :

$$\mathbf{r}(P) \cdot \mathbf{s} = D(t)$$

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

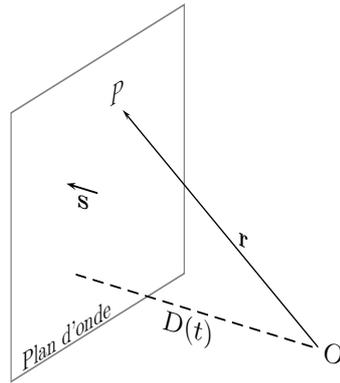


FIG 1 – Plan d'onde

Nous pouvons à présent généraliser l'équation d'onde (4) p. 6 à une onde plane :

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

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 $\mathbf{r} \cdot \mathbf{s}$ est constant, la pression ψ est constante dans l'espace, et ne dépend que du temps.

À partir du nombre d'onde défini au § C.1 p. 2, on définit le *vecteur d'onde* par

$$\mathbf{k} \stackrel{\text{def}}{=} k\mathbf{s}$$

et l'onde plane s'écrit :

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

F 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 I.3 p. 13). Grâce à une intégrale sur \mathbf{k} dans un domaine allant de $\mathbf{k}_0 - \Delta\mathbf{k}$ à $\mathbf{k}_0 + \Delta\mathbf{k}$, nous superposons une infinité d'ondes planes ayant toutes un vecteur d'onde différent :

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

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.

G Vitesse de groupe

Trouvons l'expression de la vitesse du paquet d'ondes. On suppose que ω 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. 8 devient

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

Dans un domaine autour de k_0 suffisamment petit, effectuons 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

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kx$$

et

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

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

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

où Δk est petit pour rester au voisinage de k_0 .

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

H VITESSE DE GROUPE

Nous retrouvons le terme de phase $\exp[i(k_0x - \omega_0t)]$. 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 :

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

où dv_φ/dk est la variation de v_φ 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_φ n'est pas limitée à la vitesse de la lumière (voir l'annexe I.4 p. 14).

H Dynamique du paquet d'ondes

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

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

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

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

Pour construire l'équation différentielle, dérivons la fonction d'onde par rapport au temps :

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

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

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

c'est à dire,

$$\times E \equiv \times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (7)$$

Multiplier la fonction d'onde par E est équivalent à dériver la fonction d'onde par rapport au temps et à multiplier le résultat par $i\hbar$.

De même, en dérivant la fonction d'onde par rapport à l'espace,

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

I DYNAMIQUE DU PAQUET D'ONDES

nous avons l'équivalence entre opérateurs :

$$\times \mathbf{p} \equiv \times (-i)\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$$

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

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

nous avons :

$$\times \mathbf{p}^2 \equiv \times (-)\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \tag{8}$$

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

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

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 (7) et (8) :

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

La multiplication par $V(\mathbf{r}, t)$ 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 :

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

Définition H.1. On appelle *Hamiltonien*^a et l'on note \hat{H} , l'opérateur,

$$\hat{H} \stackrel{\text{def}}{=} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}, t)$$

^a. Voir Mécanique analytique.pdf

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

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

où E est l'énergie mécanique.

I Annexes

I.1 Équation 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 de la forme :

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

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

I.2 Notation complexe

D'après la formule de De Moivre³,

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

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 $a \rightarrow a + ib$ et le retour en prenant la partie réelle du résultat. Soient a une fonction d'onde et a' une autre fonction d'onde :

I.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 $a \rightarrow a + ib$, 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.

I.2.2 Dérivée et intégrale d'une fonction d'onde

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

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

3. Voir Trigonometrie.pdf

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 :

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

I.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 :

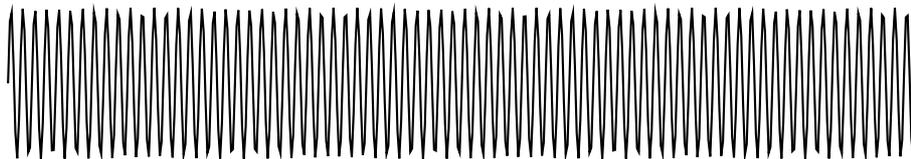


FIG 2 – $\sin 40x$

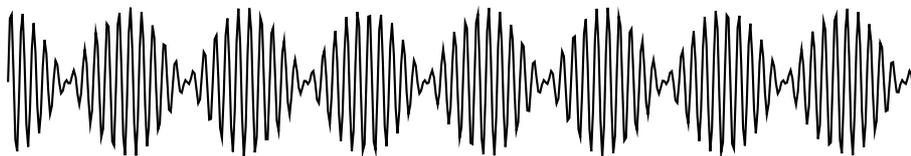


FIG 3 – $\frac{1}{2}(\sin 40x + \sin 44x)$

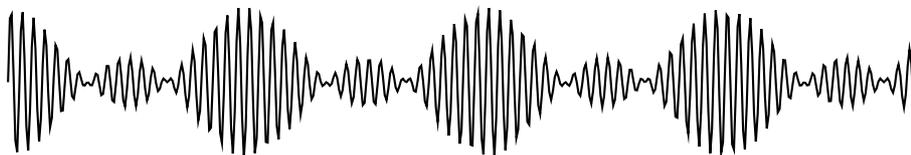


FIG 4 – $\frac{1}{3}(\sin 40x + \sin 42x + \sin 44x)$

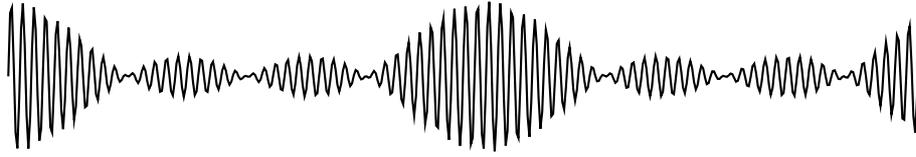


FIG 5 – $\frac{1}{4}(\sin 40x + \sin 41x + \sin 42x + \sin 43x)$



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

I.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 assujéti 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/>