Déduire l'équation de Schrödinger à partir du quadrivecteur fréquence[1]

On associe à une particule au repos (observée depuis un référentiel immobile par rapport à la particule) une fréquence $\boldsymbol{f_0}$ qui est **proportionnelle à son énergie** de masse

$$\boldsymbol{E_0 = m_0\, c^2} \qquad \textit{énergie de la particule au repos selon la relativité restreinte}$$

En considérant les équations suivantes

$$\boldsymbol{E\ = h\ f} \qquad \textit{relation Plank} - \textit{Einstein} \ \rightarrow \ \textit{énergie d'un photon}$$

$$\boldsymbol{E = m\, c^2 = h\, f} \qquad \textit{selon l'hypothèse de de Broglie pour la particule massique}^2$$

Il en résulte que

$$\boldsymbol{f_0 = \frac{m_0\, c^2}{h}} \text{ et } \boldsymbol{m_0 = \frac{h\, f_0}{c^2}}$$

L'équation de l'oscillation s'exprime comme suit

$$\boldsymbol{\psi\, (\tau) = \ \psi_0\ \cos(2\, \pi\, f_0\, \tau)} \qquad \tau = \textit{temps propre de la particule}$$

ou écrit selon la pulsation

$$\boldsymbol{\psi\, (\tau) = \ \psi_0\ \cos(\omega_0\, \tau)}$$

Observé d'un référentiel inertiel dans lequel la particule se déplace à vitesse constante ***v*** (disons un laboratoire), le phénomène d'oscillation est perçu comme une onde progressive. Nous pouvons aussi considérer que c'est le référentiel qui se déplace à vitesse **v** par rapport à la particule.

La fréquence d'oscillation est affectée par des effets relativistes conséquence de la vitesse relative entre le référentiel de la particule et le référentiel d'observation.

Son comportement se déduit du quadrivecteur énergie-impulsion pour former le quadrivecteur fréquence.

$\underline{P} = \quad m_0\, \underline{v}$ — La quadri-quantité de mouvement est la masse multipliée par la quadri-vitesse. $\mathrm{m_0} \equiv$ masse au repos, immobile.

$$\underline{P} = \begin{pmatrix} \gamma_p\, m_0\, c \\ \gamma_p\, m_0\, v_x \\ \gamma_p\, m_0\, v_y \\ \gamma_p\, m_0\, v_z \end{pmatrix} \qquad \underline{P} = \begin{pmatrix} \cosh(\theta)_p\ \ m_0\, c \\ \cosh(\theta)_p\ \ m_0\, v_x \\ \cosh(\theta)_p\ \ m_0\, v_y \\ \cosh(\theta)_p\ \ m_0\, v_z \end{pmatrix} \qquad \underline{P} = \begin{pmatrix} \cosh(\theta)_p\ \ m_0\, c \\ \sinh\ (\theta)_p\ \ m_0\, c \end{pmatrix}$$

1. Relation de de Broglie et équation de Schrodinger : https://www.youtube.com/watch?v=l6DJOhu9CHE&t=2880s
2. Recherches sur la théorie des Quanta, Louis de Broglie, page 14 : https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00006807/document

Remplaçons "m_0" par son équivalent "$h\ f_0\ /c^2$"

$$\underline{P} = \begin{pmatrix} \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ c \\ \sinh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ c \end{pmatrix} \qquad \underline{P} = \begin{pmatrix} \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ c \\ \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ \mathbf{v}_x \\ \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ \mathbf{v}_y \\ \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ \mathbf{v}_z \end{pmatrix} \qquad \underline{P} = \begin{pmatrix} \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ c \\ \cosh(\theta)_p\ hf_0/c^2\ \vec{\mathbf{v}} \end{pmatrix}$$

La formule de la relativité restreinte « $c^2\ \Delta\ t^2 - (dx^2 + dy^2 + dz^2)$ = constante » étant de type hyperbolique, nous pouvons appliquer la trigonométrie hyperbolique aux phénomènes de la relativité restreinte. Le graphique suivant est représentatif des effets relativistes sur l'oscillation associée à la particule.

E en Hz (E= h f avec h=1) $\quad$ $\vec{\mathbf{P}}$ en Hz/(m/s) (h=1) $\quad$ $\mathbf{f_0} = m_0\, c^2/h$ $\quad$ $\boldsymbol{\theta}$ **=** atanh (v/c)

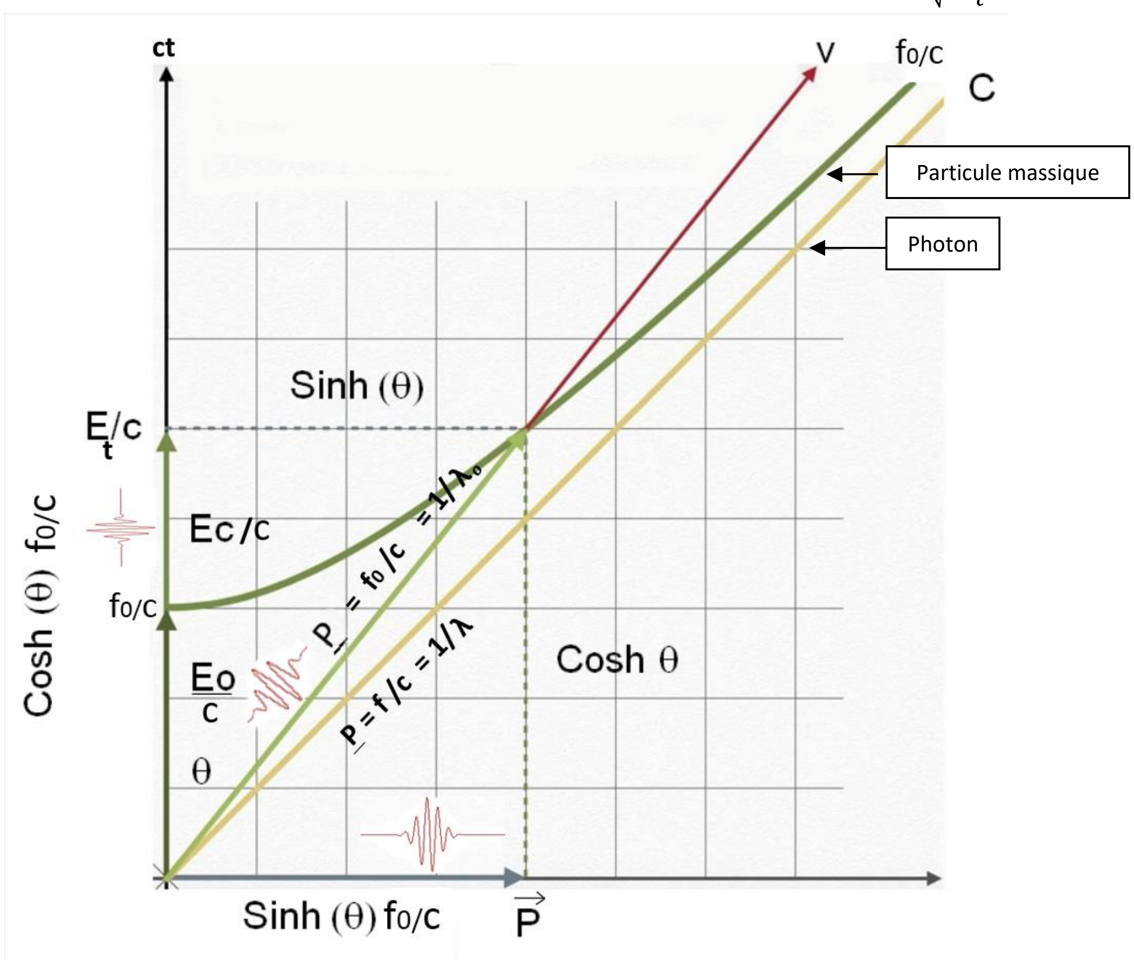
$\mathbf{E_0\ /c} = f_0/c = 1\ /\ \lambda_0$ (particule immobile)

$\mathbf{E_0} = f_0 = c\ /\ \lambda_0$

$\mathbf{E_t\ /c} = \mathbf{f_t\ /c} = \cosh(\theta)_p\ f_0/c$ (énergie totale de la particule)

$\mathbf{E_t} = \mathbf{f_t} = \cosh(\theta)_p\ f_0$

$\mathbf{f_t\ /\ f_0} = \cosh(\theta)_p = \gamma_p = \mathbf{t\ /\ \tau} = \dfrac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{1} - \frac{v^2}{c^2}}}$



$\vec{\mathbf{P}} = \sinh(\theta)_p\ f_0/c$ $\vec{\mathbf{P}} = \sinh(\text{atanh}(v/c)) * f_0/c$

$\vec{\mathbf{P}} = \cosh(\theta)_p\ f_0/c\ \vec{\mathbf{v}}/c$

$\vec{\mathbf{P}} = f_t/c\ \vec{\mathbf{v}}/c = f_t\ \vec{\mathbf{v}}/c^2 = E_t\ \vec{\mathbf{v}}/c^2$

$\vec{\mathbf{P}} = \cosh(\theta)_p\ 1/\lambda_0\ \vec{\mathbf{v}}/c = 1/\lambda_{db}$ $\lambda_{db} = c/\sinh(\theta)_p\ f_0$

$\mathbf{E_{cinétique}} = E_t - E_0 = f_c = f_t - f_0 = \cosh(\theta)\ f_0 - f_0 = f_0\ (\cosh(\theta) - 1)$ $\mathbf{E_c} = f_0 * ((\cosh(\text{atanh}(v/c))) - 1)$

$\boldsymbol{E_{cinétique}} = f_c = f_0\left(\frac{t}{\tau} - 1\right)$ $\boldsymbol{\theta} = \text{acosh}((f_c/f_0) + 1)$

Nous constatons facilement qu'une augmentation de vitesse se répercute par une augmentation de fréquence (diminution de la longueur d'onde).

Énergie = Hz nombre de cycles / seconde **Impulsion = 1/λ nombre de cycles / mètre**

f_0 = fréquence proportionnelle à l'énergie de masse

f_t = fréquence en fonction de l'énergie totale de la particule

λ_0 la longueur de Compton est en fait cette longueur d'onde

λ_{db} la longueur de de Broglie est en fait cette longueur d'onde

Déterminons un vecteur d'onde k en fonction λ_{db}

$$k_{db} = \frac{2\pi}{\lambda_{db}}$$

Nous avons tout en main pour déterminer l'équation de l'onde progressive associée à la particule en mouvement

Pour simplifier, nous allons prendre en compte qu'une dimension spatiale

$$\omega_t = 2\pi\ f_t = 2\pi\cosh(\theta)\ f_0$$

$$\boldsymbol{\psi\ (x,t) = \psi_0\ \cos(\ k_{db}\, x - \omega_t\ t)}$$

$$\boldsymbol{\psi\ (x,t) = \psi_0\ \cos(k_{db}\, x\ -\ 2\,\pi\cosh(\theta)\ f_0\ t\,)}$$

$$\frac{1}{\lambda_{db}} = \cosh(\theta)\, f_0\, \frac{v}{c^2}$$

$$k_{db} = \frac{2\pi}{\lambda_{db}} = 2\pi\, f_t\, \frac{v}{c^2}$$

En intégrant ces relations dans l'équation d'onde, nous obtenons

$$\psi\,(x,t) = \psi_0\, \cos\left(2\,\pi\, f_t\, \frac{v}{c^2}\, x - 2\,\pi\, f_t\, t\right)$$

$$\boxed{\boldsymbol{\psi\,(x,t) = \psi_0\, \cos\left(2\,\pi\, f_t\, \left(\frac{v}{c^2}\, x - t\right)\right)}}$$

<u>Équation du mouvement</u>

À partir de

$$\psi\,(x,t) = \psi_0\, \cos\left(2\,\pi\, f_t\, \left(\frac{v}{c^2}\, x - t\right)\right)$$

comment évolue ψ en fonction des coordonnées d'espace, donc en fonction de x ? ψ est une onde plane qui se déplace.

Une onde plane est solution d'une équation de propagation

$$\boldsymbol{\left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) - \left(\frac{1}{u^2}\right)\left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial t^2}\right) = 0}$$

$\boldsymbol{u}$ représente la vitesse de propagation de l'onde. À quoi est égal u ?

De l'équation de l'onde de base

$$\psi\,(x,t) = \psi_0\, \cos\left(2\,\pi\, f_t\, \left(\frac{v}{c^2}\, x - t\right)\right)$$

Nous observons que

$$\frac{v}{c^2}\ est\ l'inverse\ \ d'une\ vitesse$$

Nous posons que $\dfrac{c^2}{v} = u$

$$\boldsymbol{\psi}\,(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{\psi_0}\ \mathbf{cos}\left(\mathbf{2}\,\boldsymbol{\pi}\,\boldsymbol{f_t}\,\left(\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{u}}\right) - \boldsymbol{t}\right)\right)$$

Pour la suite, nous dérivons l'équation d'onde $\psi\,(x,t)$ comme suit

$$\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial^2\,\psi_0\,\cos\left(\,2\,\pi\,f_t\,\left(\left(\frac{x}{u}\right) - t\right)\right)}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial t^2} = \left(-2^2\,\pi^2\,f_t^2\,\right)\,\psi(x,t)$$

alors

$$\left(\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial x^2}\right) - \left(\frac{1}{u^2}\right)\left(\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial t^2}\right) = 0$$

devient

$$\left(\frac{\boldsymbol{\partial}^2\,\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})}{\boldsymbol{\partial x}^2}\right) - \left(\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{u}^2}\right)\left(\left(-\mathbf{2}^2\,\boldsymbol{\pi}^2\,\boldsymbol{f}_{\boldsymbol{t}}^2\,\right)\,\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})\right) = \mathbf{0}$$

$$\left(\frac{\boldsymbol{\partial}^2\,\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})}{\boldsymbol{\partial x}^2}\right) + \left(\mathbf{4}\,\boldsymbol{\pi}^2\left(\frac{\boldsymbol{f}_{\boldsymbol{t}}^2}{\boldsymbol{u}^2}\right)\,\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t})\,\right) = \mathbf{0}$$

$$\left(\frac{f_t^2}{u^2}\right)\quad est\ le\ terme\ de\ propagation\ de\ l'onde$$

$$\frac{f_t}{u} = f_t\,\frac{v}{c^2} = \frac{1}{\lambda_{db}} = \frac{m_r\,v}{h}\quad selon\ la\ relation\ de\ de\ Broglie \rightarrow\ \lambda_{db} = \left(\frac{h}{p}\right)$$

$$m_r \equiv masse\ relativiste$$

Ce qui implique que

$$\left(\frac{f_t^2}{u^2}\right) = \left(\frac{m_r^2\ v^2}{h^2}\right)$$

Introduisons cette expression dans l'équation de propagation

$$\boldsymbol{\left(\frac{\partial^2\ \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(4\ \pi^2 \left(\frac{m_r^2 v^2}{h^2}\right)\ \psi(x,t)\right) = 0}$$

$$\boldsymbol{m_r = \frac{m_0}{\left(\sqrt{1 - \left(\frac{v^2}{c^2}\right)}\right)}}$$

Alors

$$\boldsymbol{\left(\frac{\partial^2\ \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(4\ \pi^2 \left(\frac{m_0^2 v^2}{h^2\left(1 - \left(\frac{v^2}{c^2}\right)\right)}\right)\ \psi(x,t)\right) = 0}$$

<u>Dans les limites des vitesses non relativistes : v << c</u>

$$\boldsymbol{m_r \simeq m_0}$$

$$\left(\frac{\partial^2\ \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(4\ \pi^2 \left(\frac{m_0^2\ v^2}{h^2}\right)\ \psi(x,t)\right) = 0$$

Nous développons $m_0^2\ v^2$

$$m_0^2\ v^2 = m_0\ m_0 v^2$$

En sachant que

$$E_{cinétique} = \left(\frac{1}{2}\right) m_0 v^2 \quad => \; 2\,E_c = m_0 v^2 \qquad\qquad \text{Équation non relativiste}$$

Nous obtenons

$$\boldsymbol{m_0^2\, v^2} = m_0\, m_0 v^2 = \boldsymbol{m_0\, 2\, E_c}$$

$$\left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{8\,\pi^2\, m_0\, E_c}{h^2}\right)\ \psi(x,t)\ = 0$$

Nous appliquons une transformation

$$en\ multipliant\ par\ \left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\, m_0}\right)$$

$$\boldsymbol{\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\, m_0}\right)\ \left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + E_c\ \psi(x,t) = 0}$$

Appliquons une autre transformation, en sachant que

$$E_t = E_c + E_p \;=>\; E_c = E_t - E_p$$

Opérons un changement de variables

$$\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\, m_0}\right) \left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + (E_t - E_p)\ \psi(x,t) = 0$$

Nous distribuons

$$\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\, m_0}\right) \left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + E_t\, \psi(x,t) - E_p\, \psi(x,t) = 0$$

Nous multiplions tout par -1

$$-\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\, m_0}\right) \left(\frac{\partial^2\, \psi(x,t)}{\partial x^2}\right) - E_t\, \psi(x,t) + E_p\, \psi(x,t) = 0$$

Nous isolons $E_t\ \psi(x,t)$

$$\boxed{-\left(\frac{\boldsymbol{h^2}}{\boldsymbol{8\,\pi^2\,m_0}}\right)\left(\frac{\boldsymbol{\partial^2\,\psi(x,t)}}{\boldsymbol{\partial x^2}}\right)+\boldsymbol{E_p\,\psi(x,t)}=\boldsymbol{E_t\,\psi(x,t)}}$$

Nous retrouvons l'équation de Schrödinger stationnaire, équation indépendante du temps.

Il reste, maintenant, à <u>réintroduire le temps t en explicitant la dépendance temporelle</u>

Nous cherchons à exprimer l'équation de Schrödinger en fonction de la variation du temps. Nous cherchons donc une expression qui comprend une dérivée par rapport au temps.

L'équation recherchée, une fois dérivée doit aboutir à ce format d'équation

$$E_c + E_p = E_t$$

Pour simplifier, nous prenons le cas de la particule libre, aucune énergie potentielle ne l'affectant.

En partant de

$$\boldsymbol{E_t} = h\,f_t = \frac{h\,\omega_t}{2\,\pi} = \hbar\,\boldsymbol{\omega_t} \qquad \hbar \equiv \frac{h}{2\,\pi}$$

Nous obtenons

$$-\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial x^2}\right)=E_t\,\psi(x,t)$$

$$-\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial x^2}\right)=\hbar\,\omega_t\;\psi(x,t)$$

$$-\left(\frac{\boldsymbol{\hbar^2}}{\boldsymbol{2\,m_0}}\right)\left(\frac{\boldsymbol{\partial^2\,\psi(x,t)}}{\boldsymbol{\partial x^2}}\right)=\hbar\,\boldsymbol{\omega_t\,\psi(x,t)}$$

Dérivons

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,\boldsymbol{m_0}}\right)\left(\frac{\boldsymbol{\partial^2\,\psi_0\ \cos(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)}}{\boldsymbol{\partial x^2}}\right) = \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\ \ \boldsymbol{\psi(x,t)}$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,\boldsymbol{m_0}}\right)(-\boldsymbol{K_{db}})\left(\frac{\boldsymbol{\partial\ \ \psi_0\,\sin(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)}}{\boldsymbol{\partial x}}\right) = \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\ \ \boldsymbol{\psi(x,t)}$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,\boldsymbol{m_0}}\right)(-\boldsymbol{K_{db}})\ (\boldsymbol{K_{db}})\big(\boldsymbol{\psi_0\ \ \cos(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)}\big) = \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\ \ \boldsymbol{\psi(x,t)}$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,\boldsymbol{m_0}}\right)\ (\boldsymbol{K_{db}^2})\ \ \boldsymbol{\psi(x,t)} = \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\ \ \boldsymbol{\psi(x,t)}$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,\boldsymbol{m_0}}\right)\ (\boldsymbol{K_{db}^2})\ \ = \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}$$

C’est l’équation que nous voulons obtenir à la suite de l’application des dérivations de l’équation d’onde. La partie de droite étant le résultat d’une dérivée première par rapport au temps.

Dérivons l’équation d’onde par rapport au temps

$$\hbar\ \left(\frac{\boldsymbol{\partial\ \ \psi_0\ \ \cos(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)}}{\boldsymbol{\partial t}}\right) =?\ \hbar\,\boldsymbol{\omega_t\ \ \psi_0\ \ \cos(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)}$$

$$-\,\hbar\,\boldsymbol{\omega_t\ \ \psi_0\,\sin(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)} \neq \hbar\,\boldsymbol{\omega_t\ \ \ \psi_0\ \ \cos(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ \ t\,)}$$

Il n’y a pas égalité, essayons avec l’équation d’onde, mais sous la forme complexe

$$\hbar\,\frac{\big(\boldsymbol{\partial\ \ \psi_0\ \ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}}\big)}{\boldsymbol{\partial t}} =?\ \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\ \big(\boldsymbol{\psi_0\ \ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}}\big)$$

$$-\,\boldsymbol{i}\,\hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\,\big(\boldsymbol{\psi_0\ \ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}}\big) \neq \hbar\,\boldsymbol{\omega_t}\ \big(\boldsymbol{\psi_0\ \ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}}\big)$$

Le terme de gauche ne diffère que par **– i**

Nous obtenons l'égalité si nous multiplions l'équation de gauche par i

$$-\,i\,i\,\hbar\,\omega_t\left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right) = \hbar\,\omega_t\ \left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right)$$

$$\hbar\,\omega_t\left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right) = \hbar\,\omega_t\ \left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right)$$

Nous devons donc multiplier la dérivée d'une onde complexe par rapport au temps par i

$$i\,\hbar\,\frac{\left(\partial\ \psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right)}{\partial t} = \hbar\,\omega_t\ \left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right)$$

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\ \psi\ (\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t} = \hbar\,\omega_t\quad \psi\ (\mathrm{x},\mathrm{t})$$

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est

$$\boxed{-\left(\frac{h^2}{8\,\pi^2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + E_p\,\psi(x,t) = i\,\hbar\,\frac{\partial\ \psi\ (\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}}$$

L'équation d'onde d'une particule qui se déplace selon l'axe des x est donc

$$\psi(x,t) = \left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(2\,\pi\,f_t\frac{x}{u}\,-\,2\,\pi\,f_t\ t\right)}\right)$$

$$\psi(x,t) = \left(\psi_0\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t)}\right)\quad = \left(\psi_0\,\mathrm{e}^{\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)(P.\ x\,-\,E_t\ t)}\right)$$

$$\psi(x,t) = (\psi_0\ \cos(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ t)\,)\ +\ (\psi_0\,\mathrm{i}\,\sin(k_{db}\,x\ -\ \omega_t\ t)\,)$$

Remarques importantes sur l'équation de Schrödinger

- L'équation s'applique que pour les vitesses non relativistes v << c.
- C'est une équation linéaire.

Dans la mécanique ondulatoire, l'expérience nous dicte que $\psi(x,t)$ représente la probabilité de présence de la particule à l'abscisse x au temps t. [1, 2]

1. Michel van Biezen, *Physics 66.1 Quantum Mechanics – Schrodinger Equation*, https://www.youtube.com/playlist?list=PLX2gX-ftPVXXt6Ix6JWYCiv5yJYV7DO2K

2. Nicolas Hergott, Introduction à la mécanique quantique - cours 1/5 (niveau bac+2) - sur Teams
Introduction à la mécanique quantique - cours 1/5 (niveau bac+2) - sur Teams - YouTube