Comprendre l'Équation de Schrödinger et la Mécanique Ondulatoire : Une Perspective Didactique via le Quadrivecteur Fréquences/Vecteurs d'Onde et l'Analyse Harmonique.[1]

Introduction :

Objectif pédagogique

La mécanique quantique, avec son formalisme ondulatoire, a révolutionné notre compréhension du monde microscopique. Au cœur de cette révolution se trouve l'équation de Schrödinger, pierre angulaire qui décrit l'évolution des systèmes quantiques. Cependant, sa dérivation historique est souvent perçue comme un saut conceptuel, partant de postulats qui peuvent sembler abstraits au premier abord.

Ce document propose un exercice didactique et une perspective alternative pour appréhender l'équation de Schrödinger et les concepts fondamentaux de la mécanique ondulatoire. Loin d'être une dérivation physique rigoureuse au sens strict et historique, cette démarche se veut une construction mathématique originale, conçue pour éclairer les liens profonds entre des domaines apparemment distincts de la physique : la relativité restreinte, l'analyse harmonique (notamment l'oscillateur) et la mécanique quantique elle-même.

En partant de l'hypothèse d'une particule au repos modélisée comme un oscillateur harmonique abstrait, nous explorerons comment les principes de la relativité transforment cette oscillation en une onde progressive pour une particule en mouvement. Un rôle central sera accordé au **quadrivecteur fréquences/vecteurs d'onde**, qui servira de pont conceptuel essentiel pour passer de la description relativiste de l'énergie et de l'impulsion à la formulation ondulatoire. Nous aboutirons ainsi à l'équation de Schrödinger dépendante et indépendante du temps, avant d'étendre notre réflexion aux paquets d'ondes, à l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde, au principe d'incertitude et aux harmoniques sphériques.

Cet exercice vise à fournir une intuition précieuse sur la structure mathématique de la mécanique ondulatoire, en montrant comment divers outils conceptuels peuvent converger vers une description unifiée du comportement des particules. Il est destiné à enrichir la compréhension des étudiants et des passionnés en offrant une vision complémentaire de ces phénomènes fondamentaux.

Hypothèse de travail

Nous postulons, dans le cadre de cet exercice, qu'une particule au repos peut être modélisée par un **oscillateur harmonique abstrait** de fréquence $f_o = m_o c^2/h$, où cette fréquence est directement liée à l'énergie de masse via la relation de Planck-Einstein. Cette hypothèse, purement mathématique, nous servira de point de départ pour construire une représentation ondulatoire.

Pour vous initier à la relativité, je vous invite à lire mon document sur la relativité restreinte :

https://liensphysique.science.blog/wp-content/uploads/2025/06/introduction-relativite-restreinte-rm-20250626.pdf

1. Relation de de Broglie et équation de Schrödinger : https://www.youtube.com/watch?v=l6DJOhu9CHE&t=2880s

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

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

$$\boldsymbol{E = m\, c^2 = h\, f} \qquad \textit{Postulat de de Broglie pour la particule massique}[1]$$

Il en résulte que

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

Comment écrire l'équation d'oscillation ?

En supposant la particule animée d'un mouvement d'oscillation de type oscillateur harmonique, comment peut-on écrire l'équation d'oscillation ?

Considérons le cas où la particule est immobile dans un référentiel R_1, son seul mouvement est son mouvement d'oscillation.

Si nous prenons l'oscillation comme un déplacement dans l'espace, la relativité restreinte nous dicte de considérer aussi son déplacement selon l'axe temporel.

En partant de l'équation de Minkowski

$$\boldsymbol{ds^2 = -c^2\, dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2} \qquad (1)$$

Nous pouvons la réécrire tel que

$$\boldsymbol{ds^2 = i^2\, c^2\, dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2} \qquad (2)$$

Équation mathématiquement équivalente[2]. **Le temps imaginaire est un artifice mathématique pour faciliter le traitement de la situation.** Il n'est qu'un outil de calcul et non une hypothèse physique. Nous remplaçons une rotation hyperbolique dans l'espace-temps par une rotation euclidienne complexe dans l'espace-temps plus facile à manipuler.

1. Recherches sur la théorie des Quanta, Louis de Broglie, page 14 : https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00006807/document
2. Albert Einstein, La théorie de la relativité restreinte et général (1954, ire édition, Gauthier-Villars, Paris, ISBN 2-04-002566-9), Appendice II

En tenant compte que de l'axe des « x », aucun déplacement sur les axes « y » et « z »

$$\boldsymbol{ds^2 = (icdt)^2 + dx^2} \qquad (3)$$

Ce qui est la formule de Pythagore d'un triangle rectangle ou la formule d'un cercle de rayon « ds » avec le triangle rectangle inscrit dans le cercle.

Reportons graphiquement cette relation dans un plan complexe

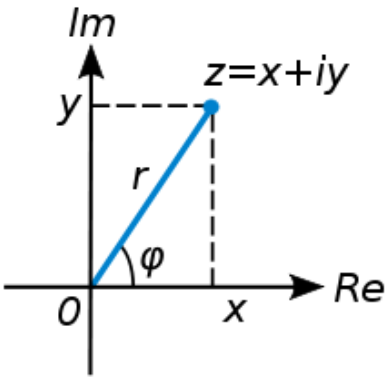


Figure 1[1]

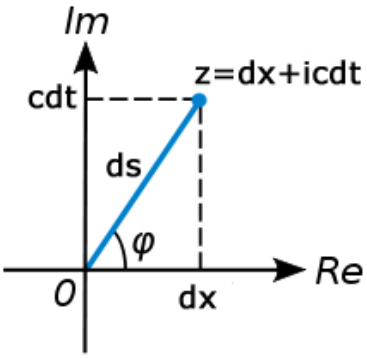
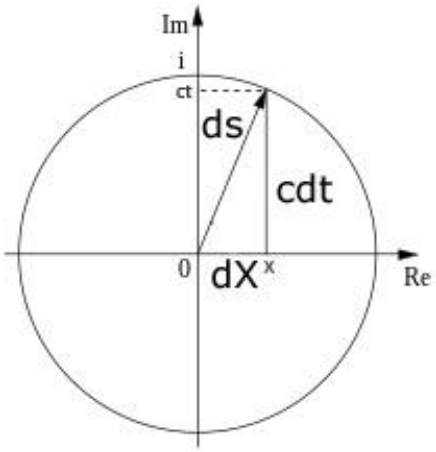


Figure 2



$$\boldsymbol{ds^2 = i^2\, c^2\, dt^2 + dx^2}$$

$$\boldsymbol{ds^2 = i^2\, (ct - 0)^2 + (x - 0)^2}$$

$$\boldsymbol{ds^2 = i^2\, (ct)^2 + x^2}$$

Figure 1 : Représentation graphique nombre du complexe $z = x + i\,y = r\,e^{i\varphi} = r\,[\cos(\varphi) + i\sin(\varphi)]$

Figure 2 : Représentation graphique du nombre complexe $z = dx + i\,cdt = ds\,e^{i\varphi} = ds\,[\cos(\varphi) + i\sin(\varphi)]$

$$\boldsymbol{\tan\varphi = ict/x = i\,c/v}$$

L'angle « imaginaire φ » ou « angle complexe » est fonction de la vitesse. φ = arctan (i c/v)

1. Nombre complexe : https://fr.wikipedia.org/wiki/Nombre_complexe#:~:text=Un%20nombre%20complexe%20z%20se,que%20i2%20%3D%20%E2%80%931.

Dans le cas d'un oscillateur harmonique, lorsque X est maximal la vitesse est nulle, le temps du référentiel R_1 est synchrone avec le temps propre de la particule. Lorsque X est au point X_0, la vitesse de la particule est maximale, le « décalage » entre le temps de R_1 et le temps propre de la particule est maximal.

Le déplacement de la particule se fait dans le continuum espace-temps, le temps étant représenté sur l'axe imaginaire « ict ». Pour tout déplacement sur l'axe des « x », en tenant compte de la vitesse, correspond un déplacement sur l'axe « ict ». Le déplacement de « ict » est déphasé de π/2 par rapport à « x ».

En considérant la particule comme un oscillateur harmonique immobile dans un référentiel R_1 et en tenant compte que de la dimension spatiale, l'oscillation de base peut être décrite avec l'équation

$$\boldsymbol{X(t) = X_{max}\ \left(\cos(2\,\pi\, f_0\, t)\right)} \quad t = temps\ du\ référenciel\ R_1$$

Pour positionner la particule dans l'espace-temps à 4 dimensions, nous devons ajouter la partie temporelle. Variation identique à « x », mais déphasée de π/2 sur l'axe imaginaire. Ce qui donne le nombre imaginaire Z.

$$\boldsymbol{Z\ (t) = X_{max}\ \left(\cos(2\,\pi\, f_0\, t) + i\, sin(2\,\pi\, f_0\, t)\right)} \quad t = temps\ du\ référenciel\ \mathrm{R_1}$$

ou écrit selon la pulsation

$$\boldsymbol{Z\ (t) = X_{max}\ \left(\cos(\omega_0\, t) + i\, \sin(\omega_0\, t)\right)} \qquad (4)$$

PARTICULE EN DÉPLACEMENT

Observé d'un référentiel inertiel dans lequel la particule se déplace à vitesse constante *v*, le phénomène d'oscillation est perçu comme une onde progressive.

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 fréquences/vecteurs d'onde.

$\underline{P} = \quad m_0\, \underline{v}$ La quadri-quantité de mouvement est la masse multipliée par la quadri-vitesse. $\mathrm{M_0} \equiv$ masse au repos, immobile.

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

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

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

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.

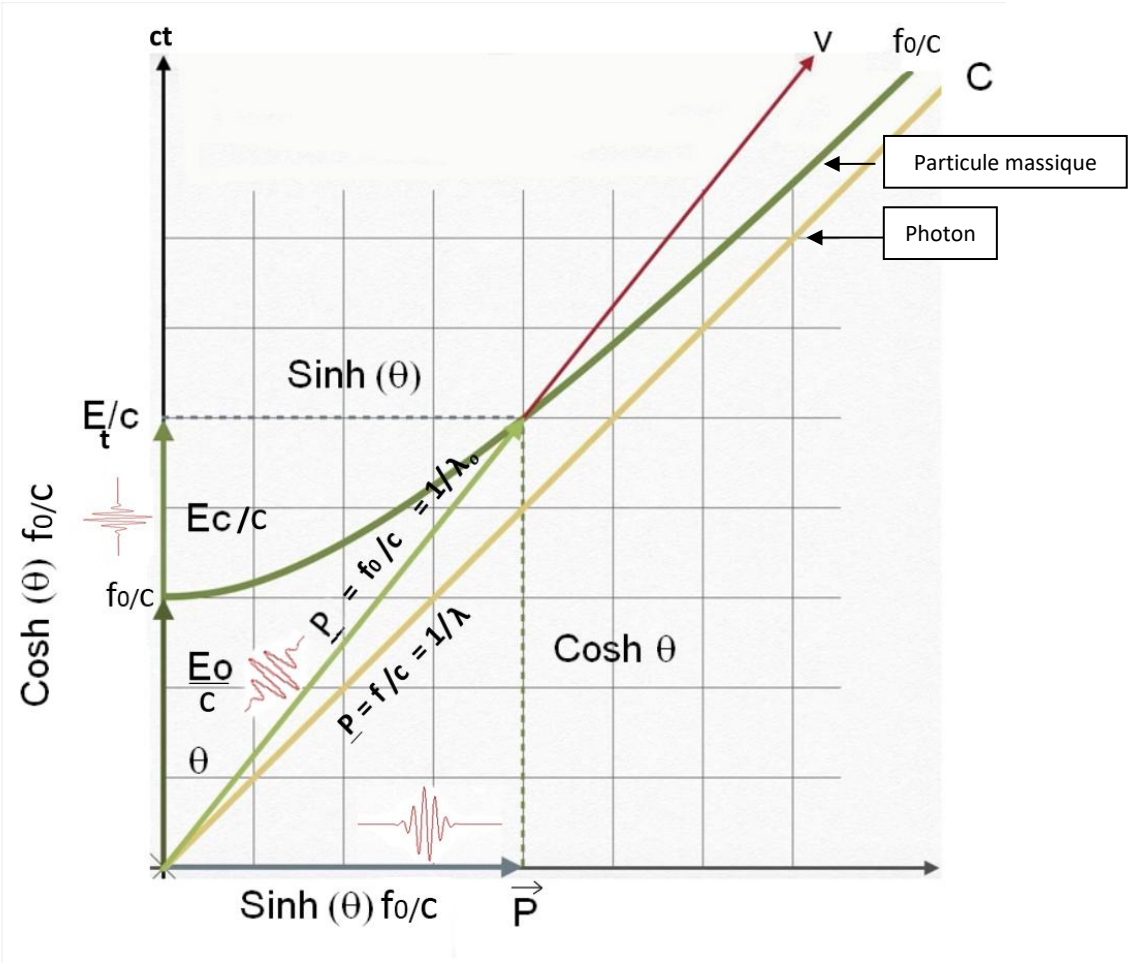
E en Hz (E= h f avec h=1) $\vec{\mathbf{P}}$ en Hz/(m/s) (h=1) $\mathbf{f_0} = m_0 c^2/h$ $\boldsymbol{\theta}$ = atanh (v/c)

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

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

$\mathbf{E_t / c} = \mathbf{f_{totale} / c} = \cosh(\theta)_p\ f_0/c$ (énergie totale de la particule) $\mathbf{E_t} = \mathbf{f_t} = \cosh(\theta)_p\ f_0$ (5)

$$\mathbf{f_t / f_0} = \cosh(\theta)_p = \gamma_p = \mathbf{t / \tau} = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \qquad (6)$$



$\vec{P}$ = sinh $(\theta)_p$ f_0/c = $\gamma_p \beta_p m_0 c$ = cosh $(\theta)_p$ $\vec{v}/c$ f_0/ c^2 c **P** = sinh(atanh($\vec{v}/c$))*f_0/c

$\vec{P}$ = cosh $(\theta)_p$ f_0/c $\vec{v}/c$ (7)

$\vec{P}$ = f_t/c $\vec{v}/c$ = f_t $\vec{v}/c^2$ = E_t $\vec{v}/c^2$ (8)

$\vec{P}$ = cosh $(\theta)_p$ $1/\lambda_0$ $\vec{v}/c$ = $1/\lambda_{dB}$ (9)

λ_{dB} = $c/$ sinh $(\theta)_p$ f_0

$E_{cinétique}$ = $E_t - E_0$ = f_c = $f_t - f_0$ = cosh (θ) f_0 - f_0 = f_0 (cosh (θ) -1) **E_c** = f_0*((cosh(atanh(v/c)))-1) (10)

$$E_{cinétique} = f_c = f_0\left(\frac{t}{\tau} - 1\right)$$

θ = acosh ((f_c/f_0)+1)

Nous pouvons faire 2 constats importants :

1. La fréquence d'oscillation de la particule en mouvement vu du référentiel R_1 est augmentée. Ceci découlant de la différence d'écoulement du temps entre le référentiel de la particule et le référentiel R_1. Déduit de (6).

   f_t = t / τ f_0 avec **t / τ** >=1

2. Le déplacement engendre un vecteur d'onde par effet relativiste. Ce vecteur d'onde dépend de la différence d'écoulement du temps entre le référentiel de la particule et le référentiel R_1 et du rapport entre la vitesse de la particule et la vitesse de la lumière.

   P = sinh $(\theta)_p$ f_0/c = cosh $(\theta)_p$ f_0/c **v**/c = **t / τ** $1/\lambda_0$ **v**/c = $1/\lambda_{dB}$

Nous remarquons facilement qu'une augmentation de vitesse se répercute par une augmentation de fréquence et une 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 au repos. **Fréquence de Compton**
f_t = fréquence en fonction de l'énergie totale de la particule
λ_0 la **longueur d'onde de Compton** est en fait cette longueur d'onde
λ_{dB} la **longueur d'onde de de Broglie** est en fait cette longueur d'onde

L'effet relativiste génère l'équivalent d'une onde progressive.

Déterminons l'équation de cette onde progressive de Ψ associée à la particule en mouvement.

Statuons que la particule se déplace selon l'axe X (cet axe X est indépendant de l'axe X de l'oscillateur harmonique).

Donc, par les effets relativistes, la fréquence f_0 est perçue augmentée et nous la notons f_t.

$$f_t = \cosh(\theta)\ f_0$$

De ce fait, la vitesse angulaire ω_0 deviens ω_t

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

Par effet purement relativiste, nous pouvons associer une longueur d'onde au phénomène oscillatoire. C'est la longueur d'onde de de Broglie.

Le vecteur d'onde k en fonction λ_{dB} est

$$k_{db} = \frac{2\pi}{\lambda_{dB}} \qquad k_{db}\ est\ en\ radian/mètre$$

Bien que la fréquence propre $\boldsymbol{f_0 = \frac{m_0\, c^2}{h}}$ ne soit pas directement observable — en raison de sa nature interne — elle constitue néanmoins la **source fondamentale** du comportement ondulatoire mesurable des particules.

En effet, dès qu'une particule est en mouvement inertiel par rapport à un référentiel, cette fréquence se **manifeste par un effet de phase relativiste**, engendrant une **onde spatiale progressive** caractérisée par la **longueur d'onde de de Broglie** :

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p}$$

Cette onde de phase — bien que ne transportant ni matière ni énergie — produit des **effets physiques mesurables**, tels que les **interférences**, la **diffraction**, ou les **motifs de Young**, observés expérimentalement avec des électrons, neutrons, atomes ou molécules. Remarque, les motifs observés expérimentalement sont la manifestation statistique de la densité de probabilité donnée par $|\boldsymbol{\Psi}|^2$, et non de la fonction d'onde elle-même (sujet que nous traiterons ultérieurement)

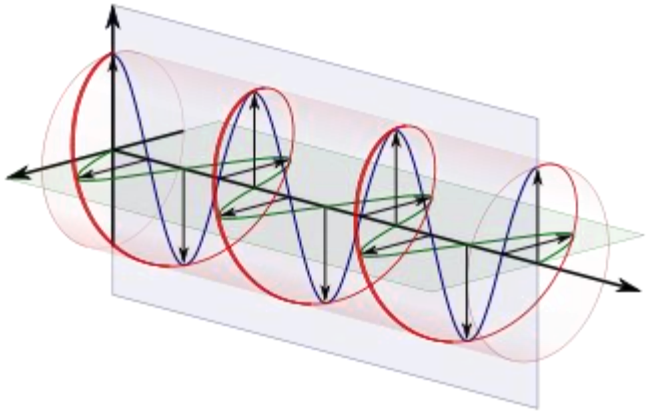
On peut donc interpréter l'onde de de Broglie comme **la projection spatiale visible de l'oscillation propre invisible $\boldsymbol{f_0}$**, transformée par la relativité restreinte. Autrement dit :

Le déplacement rend visible, sous forme d'onde, ce qui était une simple oscillation interne.

L'équation d'oscillation découlant de (4) en fonction du déplacement s'écrit

$$\boldsymbol{\Psi(x,t) = \Psi_0 \left(\cos(k_{dB}\, x - \omega_t\ t) + i \sin(k_{dB}\, x - \omega_t\ t)\right)} \qquad (11)$$

$$t = temps\ du\ référentiel\ du\ laboratoire$$



Horizontal (vert) l'axe X, vertical (bleu) l'axe du temps qui est imaginaire, en rouge la fonction d'onde résultante de la combinaison des deux paramètres. Il faut bien comprendre que l'équation d'onde découle d'une représentation mathématique abstraite de l'espace-temps, ce qui doit être pris en compte dans toute tentative d'interprétation physique.

L'équation d'oscillation (11) en fonction de f_0

$$\boldsymbol{\Psi(x,t) = \Psi_0 \left(\cos(k_{dB}\, x \; - \; 2\,\pi \cosh(\theta)\; f_0 \; t\,) + i \sin(k_{dB}\, x \; - \; 2\,\pi \cosh(\theta)\; f_0 \; t\,)\right)}$$

Pour une transition rigoureuse entre référentiels : voir l'annexe A

En partant de

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

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

Introduisons ces relations dans l'équation d'onde (11), nous obtenons

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \left(\cos\left(2\,\pi\, f_t \frac{v}{c^2}\, x \; - \; 2\,\pi \; f_t \; t\right) + \; \mathrm{i} \sin\left(2\,\pi\, f_t \frac{v}{c^2}\, x \; - \; 2\,\pi \; f_t \; t\right)\right)$$

Mettons $2\,\pi\, f_t$ en facteur

$$\boldsymbol{\Psi(x,t) = \Psi_0 \left(\cos\left(2\,\pi\, f_t \left(\frac{v}{c^2}\, x - t\right)\right) + \mathrm{i} \sin\left(2\,\pi\, f_t \left(\frac{v}{c^2}\, x - t\right)\right)\right)} \qquad (12)$$

Équation du mouvement

À partir de l'équation (12) reformulée sous la forme d'une exponentielle de « e »

$$\boldsymbol{\Psi(x,t) = \Psi_0 \ e^{i\left(2\pi f_t\left(\frac{v}{c^2}\ x - t\right)\right)}} \qquad (13)$$

Équation de propagation

Recherche de l'équation de propagation associée à l'équation d'onde (13)

Calcul des dérivées partielles

Soit :

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

Alors :

- Première dérivée par rapport à **x** :

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i\ 2\pi f_t \frac{v}{c^2}\ \Psi(x,t)$$

- Deuxième dérivée par rapport à **x** :

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

- Première dérivée par rapport à **t** :

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\ i\ 2\pi f_t\ \Psi(x,t)$$

- Deuxième dérivée par rapport à **t** :

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

Équation d'onde

Comme déduit précédemment :

- $\boldsymbol{k_{dB} = 2\pi f_t \frac{v}{c^2}}$
- $\boldsymbol{\omega_t = 2\pi f_t}$

On a alors :

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = -k_{dB}^2 \ \Psi(x,t)$$

et

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2} = -\omega_t^2 \ \Psi(x,t)$$

On divise les deux membres pour obtenir une relation entre les dérivées :

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \left(\frac{k_{dB}^2}{\omega_t^2}\right) \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}$$

Mais comme :

$$k_{dB} = 2\pi f_t \frac{v}{c^2}, \omega_t = 2\pi f_t \ => \ \frac{k_{dB}^2}{\omega_t^2} = \left(\frac{v}{c^2}\right)^2$$

Donc **l'équation différentielle satisfaite par Ψ(x, t) est** :

$$\boldsymbol{\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \left(\frac{v}{c^2}\right)^2 \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}} \qquad (14)$$

ou de manière équivalente :

$$\boxed{\boldsymbol{\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) - \left(\frac{v}{c^2}\right)^2 \left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}\right) = 0}} \qquad (15)$$

Cette équation est une **équation d'onde** où la vitesse de phase de propagation est :

$$\boldsymbol{u = \left(\frac{c^2}{v}\right)}$$

Ce qui découle du fait que dans une équation d'onde classique on a :

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

et ici :

$$\frac{1}{u^2} = \left(\frac{v}{c^2}\right)^2 \Rightarrow u = \left(\frac{c^2}{v}\right)$$

Cette équation met en évidence une onde de phase et non une onde de transport de matière ou d'énergie

Établissement de l'équation en fonction de l'énergie

Nous cherchons une formulation qui est fonction de l'énergie de la particule.

Pour la suite, nous dérivons l'équation d'onde $\Psi\,(x,t)$ (15) comme suit

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

$$\frac{\partial^2 \Psi_0\, e^{\mathrm{i}\left(2\,\pi\, f_t\left(\frac{v}{c^2}\, x - t\right)\right)}}{\partial t^2}$$

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

Alors l'équation (15)

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) - \left(\frac{v^2}{c^4}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}\right) = 0$$

devient

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) - \left(\frac{v^2}{c^4}\right)\left((-2^2\,\pi^2\, f_t^2)\ \Psi(x,t)\right) = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(4\pi^2 \left(\frac{f_t^2 v^2}{c^4}\right) \Psi(x,t)\right) = 0 \qquad (16)$$

$\left(\frac{f_t^2 v^2}{c^4}\right)$ *est le terme de propagation de l'onde*

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

$m_r \equiv$ *masse relativiste*

Ce qui implique que

$$\left(\frac{f_t^2 v^2}{c^4}\right) = \left(\frac{m_r^2 v^2}{h^2}\right)$$

Introduisons cette expression dans l'équation de propagation (16)

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

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

Alors

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

Avec $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ et $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v^2}{c^2}\right)}}$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(\left(\frac{\gamma^2 m_0^2 v^2}{\hbar^2}\right) \Psi(x,t)\right) = 0$$

Nous disposons ici d'une équation relativiste qui, cependant, se heurte à des difficultés d'interprétation. Nous allons donc l'étudier dans le cas où les vitesses sont très faibles devant celle de la lumière. Cette approximation conduit à une formulation non relativiste, mieux adaptée à la description des systèmes quantiques à basse énergie.

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v^2}{c^2}\right)}} \approx 1$$

Dans les limites des vitesses non relativistes (v << c) nous pouvons simplifier l'équation comme suit :

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \left(\left(\frac{m_0^2 v^2}{\hbar^2}\right) \Psi(x,t)\right) = 0 \qquad (17)$$

Dans le but d'exprimer l'équation en fonction de l'énergie et en observant que le terme $m_0^2 v^2$ se factorise naturellement en $m_0\, m_0 v^2$, nous voyons qu'il est possible de modifier une partie de l'équation (17) ainsi

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

et en multipliant par $\frac{\hbar^2}{m_0}$

Nous obtenons

$$\left(\frac{\hbar^2}{m_0}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + (m_0 v^2)\, \Psi(x,t) = 0$$

En sachant que

$$E_{cinétique} = \left(\frac{1}{2}\right) m_0 v^2 \quad => 2\, E_c = m_0 v^2$$

Remarque : Ceci est un point clé très important dans la démarche qui implique d'en tenir compte dans l'interprétation des équations qui vont suivre.

Nous obtenons

$$\left(\frac{\hbar^2}{m_0}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + 2\,E_c\;\Psi(x,t) = 0$$

Nous divisons par 2

$$\boldsymbol{\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + E_c\;\Psi(x,t) = 0} \qquad Note : E_c = \left(\frac{1}{2}\right) m_0 v^2$$

<u>Dans les limites des vitesses non relativistes (v << c) nous pouvons simplifier l'équation comme suit :</u>

$$\boldsymbol{\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + E_c\,\Psi(x,t) = 0} \qquad (18)$$

Remarque : L'équation de type Schrödinger est obtenue **sans postulat quantique**, mais par transition relativiste.

Appliquons une autre transformation, connaissant que

$$E_t = E_c + E_0 \;\Rightarrow\; E_c = E_t - E_0$$

Énergie totale = Énergie cinétique + Énergie de masse au repos

Opérons un changement de variables

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + (E_t - E_0)\,\Psi(x,t) = 0$$

Nous distribuons

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + E_t\,\Psi(x,t) - E_0\,\Psi(x,t) = 0$$

Nous multiplions tout par -1

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)-E_t\,\Psi(x,t)+E_0\,\Psi(x,t)=0$$

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

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+E_0\,\Psi(x,t)=E_t\,\Psi(x,t)$$

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

$$\boldsymbol{-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+E_0\,\Psi(x,t)=E_t\,\Psi(x,t)} \qquad (19)$$

Cette même équation en fonction de f_0

$$\boldsymbol{-\left(\frac{h\,c^2}{8\,\pi\,f_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+E_0\,\Psi(x,t)=E_t\,\Psi(x,t)}$$

Il nous reste maintenant à <u>expliciter la dépendance temporelle</u>

Nous cherchons à exprimer l'équation 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

$$E_c+E_0=E_t$$

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

En partant de

$$\boldsymbol{E}=h\,f=\frac{h\;2\,\pi\,f}{2\,\pi}=\frac{h\,\omega}{2\,\pi}=\;\hbar\,\boldsymbol{\omega}$$

Nous obtenons de (19)

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+\hbar\,\omega_0\,\Psi(x,t)=\hbar\,\omega_t\,\Psi(x,t) \qquad (20)$$

En premier, appliquons la dérivé par rapport à X à $\Psi(x,t)$ (11)

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi_0\,\left(\cos(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\,t\,)+\,\mathrm{i}\sin(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\,t\,)\right)}{\partial x^2}\right)+\hbar\,\omega_0\,\Psi(x,t)=\hbar\,\omega_t\,\Psi(x,t)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi_0\,\mathrm{e}^{i(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\,t\,)}}{\partial x^2}\right)+\hbar\,\omega_0\,\Psi(x,t)=\hbar\,\omega_t\,\Psi(x,t)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)(i\,K_{db})\left(\frac{\partial\,\Psi_0\,\mathrm{e}^{i(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\,t\,)}}{\partial x}\right)+\hbar\,\omega_0\,\Psi(x,t)=\hbar\,\omega_t\,\Psi(x,t)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)(i\,K_{db})\,(i\,K_{db})\left(\Psi_0\,e^{i(k_{db}x\,-\,\omega_t\,t)}\right)+\hbar\,\omega_0\,\Psi(x,t)=\hbar\,\omega_t\,\Psi(x,t)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(-K_{db}^2\right)\,\Psi(x,t)+\hbar\,\omega_0\,\Psi(x,t)=\hbar\,\omega_t\,\Psi(x,t)$$

Divisons par $\Psi(x,t)$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(K_{db}^2\right)+\hbar\,\omega_0=\hbar\,\omega_t \qquad (21)$$

Remarque :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(K_{db}^2\right)=\,\hbar\,\omega_t-\hbar\,\omega_0$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(K_{db}^2\right)=\,\hbar\,\omega_c \qquad note : \omega_c\ non\ relativiste$$

$\hbar\,\omega_c$ $égal$ à l'énergie cinétique

L'équation (21) est l'équation que nous devons obtenir à la suite de l'application des dérivations de l'équation d'onde. La partie de droite de (20) doit être le résultat d'une dérivée par rapport au temps.

Dérivons l'équation d'onde $\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})$ (11) par rapport au temps

$$\frac{\partial\ \Psi\ (x,t)}{\partial t} = \frac{\partial\ \Psi_0\ e^{i(k_{db}\,x\,-\,\omega_t\ t\,)}}{\partial t}\ = -\,i\,\omega_t\,\Psi(x,t)$$

Posons

$$-\left(\frac{\hbar^2}{\mathbf{2}\ \boldsymbol{m_0}}\right)\ \left(\frac{\boldsymbol{\partial^2\ \Psi(x,t)}}{\boldsymbol{\partial x^2}}\right) + \hbar\ \boldsymbol{\omega_0}\ \ \boldsymbol{\Psi(x,t)} = \boldsymbol{\beta}\ \frac{\boldsymbol{\partial\ \Psi\ (x,t)}}{\boldsymbol{\partial t}} \qquad \textbf{(22)}$$

$$\hbar\ \omega_c\ \Psi(x,t)\ \ + \hbar\ \omega_0\ \Psi(x,t)\ \ \ = -\,\beta\ i\ \omega_t\ \Psi(x,t)$$

Divisons par $\Psi(x,t)$

$$\hbar\ \omega_c + \hbar\ \omega_0\ \ =\ -\,\beta\ i\ \omega_t$$

Nous voulons obtenir

$$\hbar\ \omega_c + \hbar\ \omega_0\ \ =\ \hbar\ \omega_t$$

Ce qui implique que

$$-\,\beta\ i\ \omega_t\ \ =\ \hbar\ \omega_t$$

Donc

$$\beta = -\frac{\hbar}{i}\ = i\ \hbar$$

Introduisons cette égalité dans (22)

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\ m_0}\right)\ \left(\frac{\partial^2\ \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \hbar\ \omega_0\ \ \Psi(x,t) = i\ \hbar\ \frac{\partial\ \Psi\ (x,t)}{\partial t}$$

$$\boldsymbol{i\ \hbar\ \frac{\partial\ \Psi\ (\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}\ =\ \hbar\ \omega_t\ \Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})\ \ =\ E_t\ \Psi(x,t)}$$

L'équation dépendante de la dérivé par rapport au temps en fonction de (20) est alors

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+\hbar\,\omega_0\;\Psi(x,t)=i\,\hbar\,\frac{\partial\;\Psi\;(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+\;E_0\;\Psi(x,t)=i\,\hbar\,\frac{\partial\;\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+m_0\,c^2\;\Psi(x,t)=i\,\hbar\,\frac{\partial\;\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}$$

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\;\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}=\;E_0\;\;\Psi(x,t)+\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)\right] \qquad (23)$$

Rappel : $\left(\frac{\partial^2\,\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial \mathrm{x}^2}\right)$ donne un résultat négatif

Énergie totale = Énergie de masse au repos + Énergie cinétique

Cette inclusion de l'énergie au repos E_0 est inhérente à notre approche de départ, où la fréquence ω_t de l'onde représente l'énergie totale relativiste de la particule, contrairement à l'approche standard de Schrödinger où la fréquence ω (sans indice) est associée à l'énergie mécanique du système (énergie cinétique + potentielle). Néanmoins, cela garantit une cohérence avec les résultats physiques de la mécanique quantique non relativiste."

Particule soumise à un potentiel, à une force

Les équations précédentes font référence à une particule libre, soumise à aucune force. Nous allons aborder le cas d'une particule soumise à un potentiel V unidimensionnel. Dans cette situation, l'équation dépendante de la position et du temps s'écrit

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\;\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial t}=-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\Psi(x,t)}{\partial x^2}\right)+V\,(x,t)\,\Psi(x,t)+\;E_0\;\;\Psi(x,t) \qquad (24)$$

L'énergie totale = l'énergie cinétique + l'énergie potentielle + l'énergie de masse au repos

Le potentiel V et la fonction d'onde Ψ peuvent dépendre du temps et de la position, $V(x,t)$ et $\Psi(x,t)$, l'énergie E_0 est constante.

L'équation indépendante du temps[1]

Dans un grand nombre de situations, le potentiel ne dépend pas explicitement du temps. La dépendance en temps peut alors être séparée de celle en position. Posons

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, f(t)$$

Dans ces situations, l'équation (24) s'écrit alors

$$i\,\hbar\,\psi(x)\,\frac{\partial\, f(t)}{\partial t} = -\left(\frac{\hbar^2\ f(t)}{2\,m_0}\right)\left(\frac{\partial^2\,\psi(x)}{\partial x^2}\right) + V\,(x)\,\psi(x)\,f(t)\ +\ E_0\ \psi(x)\,f(t)$$

En divisant par $\psi(x)\,f(t)$

$$\boldsymbol{i\,\hbar\,\frac{1}{f(t)}\frac{d\,f(t)}{dt} = -\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\,\frac{1}{\psi(x)}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right) + V\,(x)\ +\ E_0}$$

Le membre de gauche ne dépend que du temps et le membre de droite ne dépend que des coordonnées spatiales. Les dérivées partielles sont changées en dérivées ordinaires, car chaque membre ne dépend que d'une variable. Comme les variables peuvent varier de manière indépendante, chaque membre doit être égal à une même constante que nous notons B.

La partie de droite est la somme de E_0 qui est une constante et d'une équation selon X. Comme la somme est une constante et que E0 est une constante donc l'équation selon X est une constante (que nous notons D).

$$\boldsymbol{B = D + E_0}$$

Donc

$$\boldsymbol{i\,\hbar\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = B}$$

$$i\,\hbar\frac{1}{f}\,df = B\,dt$$

1. Thornton |Rex, *Physique moderne* (3e édition, de boek, page 205)

On intègre pour trouver la constante B.

$$i\,\hbar \int \left(\frac{1}{f} df\right) = \int B\, dt$$

On calcule les deux intégrales, ce qui donne

$$i\,\hbar\, \ln f = B\, t + C$$

Où C est une constante d'intégration que l'on peut choisir égale à 0. Donc,

$$\ln f = \frac{B\, t}{i\hbar}$$

De cette équation on déduit f,

$$f(t) = e^{\frac{B\, t}{i\hbar}} = \; e^{-\frac{iB\, t}{\hbar}} \tag{25}$$

$$f(t) = e^{\frac{D\, t}{i\hbar}}\, e^{\frac{E_0\, t}{i\hbar}} = \; e^{-\frac{i\, D\, t}{\hbar}}\; e^{-\frac{i\, E_0\, t}{\hbar}}$$

Si l'on compare cette expression pour f à la fonction d'onde de la particule libre, ayant la dépendance temporelle, on voit que $B = \hbar\, \omega_t$ = $E_t = E_{c+p} + E_0$. C'est le résultat général.

On a donc

$$\boldsymbol{i\,\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E_t = Constante}$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\, m_0}\right)\left(\frac{d^2\, \psi(x)}{dx^2}\right) + V\,(x)\, \psi(x) \; + \; E_0\, \psi(x) = E_{total}\, \psi(x) \tag{26}$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\, m_0}\right)\left(\frac{d^2\, \psi(x)}{dx^2}\right) + V\,(x)\, \psi(x) \; = E_t\, \psi(x) \; - \; E_0\, \psi(x)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\, m_0}\right)\left(\frac{d^2\, \psi(x)}{dx^2}\right) + V\,(x)\, \psi(x) \; = E_{cinétique}\, \psi(x) + \; E_{potentiel}\, \psi(x)$$

$E_c\,(x) + \; E_p(x)$ étant l'énergie ''mécanique'', pour simplifier nous allons l'identifier par $E_{mécanique} \;\; ou\; E_m$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right)+V\,(x)\,\psi(x)=E_{mécanique}\,\psi(x) \tag{27}$$

Nous retrouvons, ici, **l'équation de Schrödinger indépendante du temps**. C'est une équation fondamentale en mécanique quantique.

L'équation précédente peut se réécrire

$$\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}+\left[\frac{2m_0\left(E_m-V\,(x)\right)}{\hbar^2}\right]\psi(x)=0 \tag{28}$$

Dans le cas d'une particule libre, aucun potentiel ou potentiel constant

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right)=E_c\,\psi(x) \tag{29}$$

On peut réécrire l'équation (25) sous la forme

$$f(t)=e^{-\left(\frac{i\,E_t\,t}{\hbar}\right)}=\;e^{-i\,\omega_t\,t}$$

Et l'équation d'onde $\Psi(x,t)$ devient

$$\Psi(x,t)=\;\psi(x)\;\;e^{-i\,\omega_t\,t}$$

Dans le cas de cette équation, où le potentiel ne dépend pas du temps, on a

$$\Psi^*\Psi=\;\psi^2(x)\;\;e^{i\,\omega_t\,t}\,e^{-i\,\omega_t\,t}$$

$$\boldsymbol{\Psi^*\Psi=\;\psi^2(x)}$$

Les distributions de probabilité (données importantes en mécanique quantique que nous ne détaillerons pas dans ce document) sont constantes au cours du temps. En mécanique quantique, on dit que le système est dans un **état stationnaire**.

Exercice 1[1]

Considérons un métal dans lequel les électrons sont libres, le potentiel étant nul. Quelle forme mathématique prend la fonction d'onde $\psi(x)$?

Résolution de l'équation (26), l'équation indépendante du temps. V(x) =0, il faut résoudre l'équation différentielle sur $\psi(x)$.

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right)+V\,(x)\,\psi(x)\;+\;E_0\,\psi(x)=E_{total}\,\psi(x)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right)+\;E_0\,\psi(x)=E_{total}\,\psi(x)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right)=E_{total}\,\psi(x)-\;E_0\,\psi(x)$$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2\,m_0}\right)\left(\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}\right)=E_{cinétique}\,\psi(x)$$

$$\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}=-\frac{2m_0\,E_c}{\hbar^2}\;\;\psi(x)\;\;=\;-k_{dB}^2\,\psi(x)$$

On n'écrit plus explicitement la dépendance en x de $\psi(x)$ et on réécrit cette expression sous la forme

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2m_0\,E_c}{\hbar^2}\psi\;\;\;=\;-k_{dB}^2\,\psi$$

1. Thornton |Rex, *Physique moderne* (3e édition, de boek, page 207, Exemple 6.5)

Limite du modèle de l'oscillateur harmonique

Toutefois, un point subtil réside dans l'usage du formalisme relativiste pour définir une onde de matière plane : on considère une onde monochromatique de portée infinie, ce qui est un outil mathématique idéal plutôt qu'une situation physique réalisable (**une particule libre réelle devrait être représentée par un paquet d'ondes normalisable**). Ce choix d'onde plane simplifie grandement les mathématiques, mais il constitue un cas très particulier. En particulier, cela omet la question de la localisation de la particule et limite la portée de la déduction aux ondes stationnaires étendues, sans aborder comment une superposition pourrait conduire à une particule localisée.

Pour remédier à cette non-localisation, la construction d'un paquet d'ondes normalisable par **superposition linéaire d'ondes planes** avec des coefficients appropriés serait une solution.

Pourquoi normaliser la fonction d'onde ?

> En mécanique quantique, la fonction d'onde $\Psi(x)$ contient toute l'information sur l'état d'une particule. Cependant, $|\Psi(x)|^2$ n'a de sens physique que s'il représente une **densité de probabilité** : $|\Psi(x)|^2 \ dx$ donne la probabilité de trouver la particule entre x et $x + dx$
>
> Pour que cette interprétation soit valide, la somme (ou l'intégrale) de toutes les probabilités sur l'espace doit être égale à 1, c'est-à-dire que la particule doit se trouver quelque part avec certitude.
>
> **Condition de normalisation :**
>
> $$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 \ dx = 1$$
>
> Seules les fonctions d'onde normalisables (pour lesquelles l'intégrale ci-dessus converge) décrivent des états physiques possibles.

Modèle de l'oscillateur anharmonique

Lorsqu'on prend en compte la dépendance relativiste de l'inertie, caractérisée par l'accroissement du facteur

$$\boldsymbol{\gamma = \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{V^2}{c^2}\right)}}}$$

avec la vitesse de la particule, le système oscillant n'obéit plus à une dynamique linéaire. L'équation du mouvement devient non linéaire, du fait que la masse effective varie au cours de l'oscillation. Il en résulte un **comportement anharmonique**, dans lequel **la fréquence propre du système dépend de l'amplitude**, rompant la symétrie temporelle caractéristique de l'oscillateur harmonique.

Dans la mesure où le mouvement reste périodique, il est néanmoins possible de lui associer une **décomposition en série de Fourier**. Cette décomposition permet de représenter le signal temporel de l'oscillateur anharmonique comme une **superposition d'oscillations harmoniques**, chacune correspondant à une composante fréquentielle définie. Il s'agit ici d'une représentation mathématique du contenu spectral du système, et non d'une subdivision physique en oscillateurs indépendants.

En attribuant à chaque mode harmonique une onde plane associée, via les relations de de Broglie

$$E_t = \hbar\,\omega_t \qquad p = \hbar\,k$$

cette superposition donne lieu à un **paquet d'ondes**. La vitesse de groupe de ce paquet, définie

$$v_{groupe} = \frac{\partial \omega_t}{\partial k_{dB}}$$

coïncide avec la vitesse de la particule dans le cadre de la relation de dispersion relativiste. Ce fait assure la cohérence du modèle ondulatoire, dans lequel la dynamique du corpuscule est représentée par la propagation d'une enveloppe ondulatoire.

Ce cadre de description justifie alors, dans les limites considérées, l'usage du **paquet d'ondes** comme modélisation de la particule massive relativiste. Il établit un lien entre l'anharmonicité induite par les effets relativistes et la représentation ondulatoire de la matière, en s'appuyant sur la structure fréquentielle intrinsèque du mouvement.

Développement mathématique de l'idée d'oscillateur anharmonique et de sa représentation en paquet d'ondes

Oscillateur relativiste (inertie variable)

En relativité restreinte, la **masse invariante** m_0 reste constante, mais l'inertie augmente avec la vitesse via le facteur de Lorentz :

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{V^2}{c^2}\right)}}$$

L'impulsion devient :

$$p = \gamma\, m_0\, \dot{x}$$

L'équation du mouvement s'écrit :

$$\left(\frac{d}{dt}\right)(\gamma\, m_0\, \dot{x}) + kx = 0$$

Développons :

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{\dot{x}^2}{c^2}\right)}}$$

$$\left(\frac{d}{dt}\right)\left(\frac{m_0 \dot{x}}{\sqrt{\left(1 - \frac{\dot{x}^2}{c^2}\right)}}\right) + kx = 0$$

C'est une équation **non linéaire** et **non analytique** (due à la racine), donc le mouvement **n'est plus sinusoïdal**. C'est un **oscillateur anharmonique relativiste**. Le terme d'inertie dépend de $\dot{x}$.

Comportement non harmonique et spectre en fréquences

Un tel oscillateur **ne produit pas une fréquence unique**. Au lieu d'une oscillation à une seule fréquence ω, on obtient un **spectre** de fréquences.

Si l'on suppose que le mouvement reste périodique (cas borné), on peut le **décomposer en série de Fourier** :

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos(n\omega_0 t + \phi_n)$$

ou, sous forme complexe :

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{\mathrm{in}\omega_{0}\mathrm{t}}$$

Chaque terme représente une **oscillation harmonique** de fréquence $n\omega_0$. L'oscillateur anharmonique est donc **mathématiquement équivalent à une somme d'oscillateurs harmoniques**.

Représentation spatiale : onde plane associée à chaque harmonique

Dans la décomposition en série de Fourier d'un signal strictement périodique de fréquence fondamentale ω_o, chaque harmonique porte une fréquence

$$\omega_n = n\omega_0,$$

avec $n \in \mathbb{Z}$. Autrement dit, on retrouve la fondamentale ($n = 1$) puis ses harmoniques ($n = 2$ double, $n = 3$ triple, etc.).

En pratique, pour un oscillateur anharmonique relativiste borné et périodique, la non-linéarité introduit bien ces multiples entiers de la fréquence fondamentale ω_o dans le spectre

À chaque fréquence $\omega_n = n\omega_0$. , on associe une onde plane (type de Broglie) :

$$\psi_{n(x,t)} = A_n e^{i(k_n x - \omega_n t)}$$

avec :

$$k_n = \frac{p_n}{\hbar} \text{ et } \omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

On construit alors un **paquet d'ondes** :

$$\psi(x,t) = \sum_n A_n e^{i(k_n x - \omega_n t)}$$

ou en continu (si le spectre est dense) :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{i(kx - \omega(k)t)}\, dk$$

Pour passer de

$$d/dt\ (\gamma\ m_0\ \dot{x}(t))\ +\ k\ x(t)\ =\ 0$$

à une description en modes harmoniques, on utilise l'**identité de Fourier** :

$$f(t) = \Sigma_{n=-\infty}^{+\infty}\ F_n e^{(i\omega_n t)}\ ,$$

où $\omega_n = 2\pi\ n\ /\ T$ si l'oscillation est périodique de période T.
Appliquée à $\gamma\ m_o\ \dot{x}(t)$, cette décomposition se traduit par

$$\gamma\ m_0\ \dot{x}(t) = \Sigma_n\ [\gamma\ m_0 (i\ \omega_n\ X_n)] e^{i\ \omega_n\ t}$$

D'où

$$\frac{d}{dt}[\gamma\, m_0\, \dot{x}(t)] = \Sigma_{\mathrm{n}}\, [\gamma\, m_0\, (i\, \omega_{\mathrm{n}})^2 X_{\mathrm{n}}] e^{i\, \omega_{\mathrm{n}}\, t}$$

$$= \Sigma_{\mathrm{n}}\, [-\gamma\, m_0\, {\omega_{\mathrm{n}}}^2 X_{\mathrm{n}}] e^{i\, \omega_{\mathrm{n}}\, t}$$

En substituant dans l'équation du mouvement, chacun des modes Xn doit alors satisfaire

$$(-\gamma\, m_0\, {\omega_{\mathrm{n}}}^2 + k)\, X_{\mathrm{n}} = 0,$$

ce qui conduit naturellement à la relation de dispersion

$${\omega_{\mathrm{n}}}^2 = k\, /\, (\gamma\, m_0)$$

En l'absence de tout terme de potentiel non quadratique, c'est exclusivement la dépendance relativiste de l'inertie (facteur γ) qui brise l'harmonicité : l'anharmonicité observée découle uniquement des effets de la relativité restreinte, et non d'une modification du potentiel.

Vitesse de groupe et propagation

La **vitesse de groupe** v_g du paquet d'ondes est :

$$v_g = \frac{d\omega_t}{dk_{dB}}$$

Pour que le paquet d'ondes décrive correctement la particule, **il faut que** $v_g = v_{particule}$.

Par exemple, pour une particule libre avec la relation de dispersion relativiste :

$$\omega_t(k_{dB}) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{(\hbar k_{dB} c)^2 + m_2 c^2}$$

alors :

$$v_g = \frac{d\omega_t}{dk_{dB}} = \frac{\hbar k_{dB} c}{\sqrt{(\hbar k_{dB} c)^2 + m_2 c^2}} = \frac{pc^2}{E_t} = v_{particule}$$

La vitesse de groupe **est bien la vitesse de la particule**, ce qui justifie pleinement l'identification de la **trajectoire de la particule** avec **l'enveloppe du paquet d'ondes**.

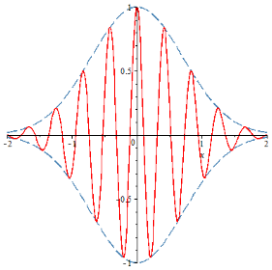
Conclusion du développement mathématique

- La prise en compte de la relativité rend l'oscillateur **anharmonique**, via la dépendance de la masse effective à la vitesse.
- Toute fonction périodique (ici, le mouvement non sinusoïdal) peut être **décomposée en série de Fourier** : la dynamique est décrite comme une **superposition d'oscillateurs harmoniques**.
- Chaque composante harmonique peut être associée à une **onde plane**, permettant une **représentation ondulatoire** complète.
- La somme de ces ondes forme un **paquet d'ondes**, dont la **vitesse de groupe** est égale à la vitesse de la particule.

Mathématiquement, le modèle d'un oscillateur relativiste fournit donc une base robuste à la représentation par paquet d'ondes d'une particule massive.

De manière générale, tout modèle d'oscillateur anharmonique offre une base tout aussi solide à cette représentation.

Paquet d'onde[1]



Pour un paquet d'ondes, nous retrouvons une vitesse de phase et une vitesse de groupe.

La vitesse des crêtes de l'onde, appelée la vitesse de phase, est donnée par

$$v_{phase} = \frac{\omega_{totale}}{k_{dB}} \qquad \omega\ totale = \omega\ cinétique + \omega\ de\ masse$$

Alors que la vitesse de l'enveloppe, appelée la vitesse de groupe, est donnée par

$$v_{groupe} = \frac{\partial \omega_t}{\partial k_{dB}}$$

Ici, pour notre onde, on a

$$E_t = \hbar\ \omega_t$$
$$p = \hbar\ k_{dB}$$

1. Luc Tremblay, Application de *E = hf* à des particules massives : http://physique.merici.ca/ondes/preuve-Ehf.pdf

Puisque

$$E_t = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$$

On a

$$\hbar\, \omega_t = \sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2\, k_{db}^2 c^2}$$

$$\omega_t = \frac{\left(\sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2\, k_{db}^2 c^2}\right)}{\hbar}$$

Ainsi, la vitesse de groupe est

$$v_g = \frac{\partial \omega_t}{\partial k_{dB}}$$

$$= \left(\frac{1}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{\left(\sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2\, k_{db}^2\, c^2}\right)}\right) 2k\hbar^2 c^2$$

$$= \left(\frac{k_{db}\, \hbar c^2}{\left(\sqrt{m_0^2 c^4 + \hbar^2\, k_{db}^2 c^2}\right)}\right)$$

$$= \frac{pc^2}{E_t}$$

$$= \frac{\Upsilon\, m_0 v_{particule}\, c^2}{\Upsilon m_0 c^2}$$

$$v_g = v_{particule}$$

La vitesse de groupe est donc égale à la vitesse de la particule.

La vitesse de phase est

$$v_{phase} = \frac{\omega_t}{k_{db}}$$

$$= \frac{\frac{E_t}{\hbar}}{\frac{p}{\hbar}}$$

$$= \frac{E_t}{p}$$

$$= \frac{\Upsilon\, m_0 c^2}{\Upsilon m_0 v_{particule}}$$

$$v_{phase} = \frac{c^2}{v_{particule}}$$

Notez qu'on a alors le résultat intéressant

$$v_g\, v_{ph} = v_{particule} \left(\frac{c^2}{v_{particule}} \right)$$

$$v_g\, v_{ph} = c^2$$

Puisque la vitesse de la particule est toujours inférieure à la vitesse de la lumière, la vitesse de phase est toujours plus grande que la vitesse de la lumière !

Une particule se déplace sous le format d'un paquet d'ondes dont la vitesse de la particule est la vitesse de groupe de ce paquet d'ondes.

Position de la particule et probabilité

En raison de sa nature mathématique, l'onde prend des valeurs complexes, avec une partie réelle et une partie imaginaire. Il est donc plus approprié de parler de « fonction d'onde » plutôt que « d'onde » pour désigner cette entité mathématique.

La fonction d'onde Ψ (x,t) comporte l'unité imaginaire $i = \sqrt{-1}$ qui est un outil formel sans réalité physique. Bien que la fonction d'onde elle-même ne soit pas directement mesurable, le carré de son module $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (où Ψ^* est le complexe conjugué) revêt une existence concrète et mesurable dans le monde physique.

Par analogie aux ondes lumineuses, dans l'expérience des deux fentes de Young, un lien est fait entre le carré du module de l'onde et l'intensité en un point de l'écran. Plus l'intensité est élevée en un endroit plus il y a de chance de détecter une particule. De ce fait, la probabilité de présence d'une particule est proportionnelle à l'intensité à un endroit déterminé, donc proportionnel au carré du module de l'onde. **Le module au carré est toujours réel et positif**, ce qui est indispensable pour une probabilité.

Plus spécifiquement $|\ \Psi\ |^2$ donne la densité de probabilité. La **probabilité** au sens strict est un nombre compris entre 0 et 1 qui mesure la chance qu'un événement se produise. Ce nombre est multiplié par 100 pour obtenir le pourcentage de chance.

Formellement :
Si *P* désigne la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle [a, b], alors :

$$P = \int_a^b \rho(x)\, dx$$

où $\rho(x)$ est la densité de probabilité.

La probabilité de trouver la particule dans [a,b] s'obtient en intégrant $|\ \Psi\ |^2$ sur cet intervalle.

$$P = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2\, dx$$

Pour que cette interprétation soit valide, la somme (ou l'intégrale) de toutes les probabilités sur l'espace doit être égale à 1, c'est-à-dire que la particule doit se trouver quelque part avec certitude.

Condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\ dx = 1$$

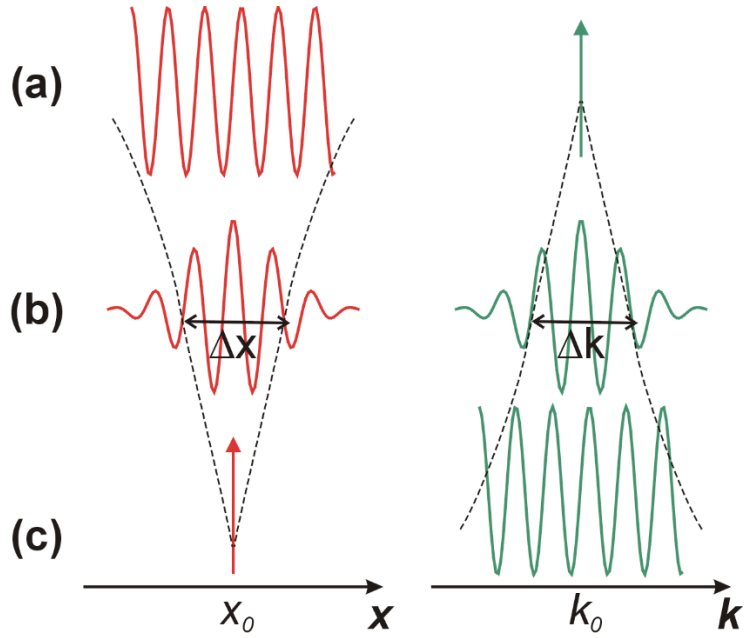
Simulation de la probabilité de présence d'une particule (à 0 :13)

Voir Annexe B (Mécanique quantité et probabilité)

Voir annexe C (Pourquoi le fait d'élever au carré la fonction d'onde aboutit à une probabilité ?)

Principe d'incertitude

Il découle que la probabilité de détecter une particule dans une région donnée de l'espace dépend directement de la forme de la fonction d'onde. Une onde plane, caractérisée par une seule valeur de k (vecteur d'onde), est étendue sur tout l'espace et ne permet pas de localiser la particule avec précision. En revanche, un paquet d'ondes, constitué de la superposition de plusieurs ondes de nombres d'onde k différents, permet de concentrer la probabilité de présence dans une zone restreinte. Plus les composantes de l'onde sont regroupées, plus la localisation de la particule est précise. La précision de la position dans l'espace est inversement proportionnelle à la précision sur le vecteur d'onde (quantité de mouvement). **Pour** *localiser* l'enveloppe dans x, il faut additionner beaucoup de porteuses de k différents afin que leurs phases s'annulent partout… **sauf** dans un domaine court.



Source : https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=4837114

Vues des fonctions d'onde décrivant la position (x_0) ou la quantité de mouvement (k_0) de (a) une onde pure (b) un paquet d'ondes et (c) un corpuscule parfaitement localisé. L'onde étant de fréquence pure, son énergie est parfaitement définie, mais elle n'est pas localisée dans l'espace. Inversement, le corpuscule est parfaitement localisé, mais n'a pas de fréquence déterminée. Le cas général est celui du paquet d'ondes qui est distribué en fréquence comme en espace. Du fait de l'équivalence mathématique entre ces deux représentations, l'étalement spatial est inversement proportionnel à l'étalement de l'impulsion

Paquet d'ondes et spectre

- Notre particule est décrite par une **fonction d'onde** $\Psi(x)$
- Pour connaître ses composantes d'impulsion, on fait la **transformée de Fourier** $\Phi(k)$
- La largeur (dispersion) de $|\Psi(x)|^2$ mesure Δx et celle de $|\Phi(k)|^2$ mesure Δp.

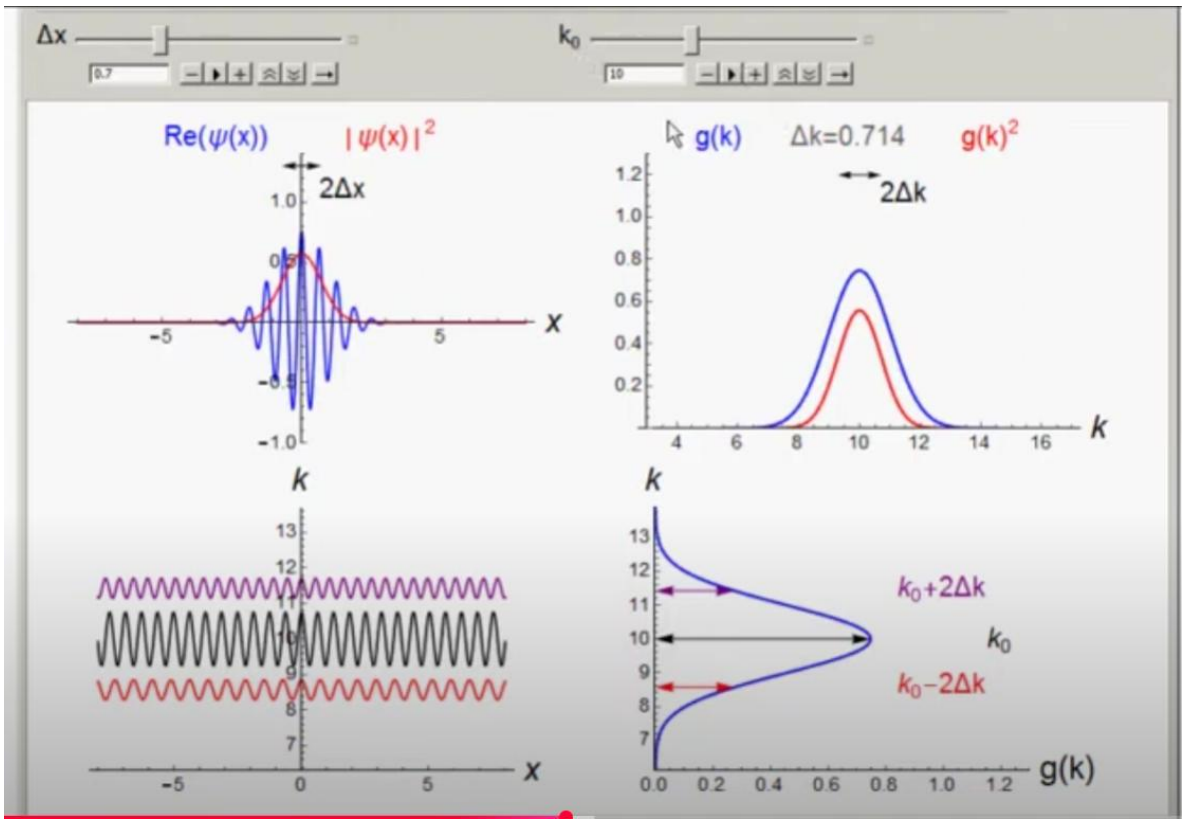
Inversion de Fourier

- Mathématiquement, plus $\Psi(x)$ est **concentrée** (petit Δx), plus sa transformée $\Phi(k)$ est **étalée** (grand Δp), et inversement.
- C'est un **théorème** de l'analyse de Fourier : **on ne peut pas à la fois avoir une fonction et sa transformée toutes deux très concentrées.**

Δx et Δp sont les **écarts-types** (variances) de la position et de l'impulsion pour la fonction d'onde $\Psi(x)$

L'incertitude est une propriété fondamentale de la nature, et non une limite expérimentale et n'est pas dû à une perturbation lors de la mesure.

Dû à cette propriété fondamentale de la nature, il est impossible de connaître simultanément et exactement la position et l'impulsion ou la vitesse d'une particule. Notons que le terme « indétermination » serait plus approprié que « incertitude », car il reflète mieux la nature intrinsèque de cette limitation ; cependant, pour des raisons historiques, c'est le terme « incertitude » qui s'est imposé dans la littérature scientifique.



[Relation d'incertitude de Heisenberg pour une particule libre](#) (vidéo)

Pour le simulateur : https://www.icp.universite-paris-saclay.fr/introduction-a-la-theorie-quantique/

Pour modéliser le paquet d'ondes en mécanique quantique on réfère couramment à une gaussienne.

Plusieurs raisons poussent à choisir une forme gaussienne pour la fonction d'onde en mécanique quantique, notamment :

1. **Inégalité d'incertitude optimale**
   La gaussienne est la seule forme de paquet d'ondes qui **sature exactement** l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \, \Delta k = 1/2$$

En d'autres termes, pour une gaussienne, l'incertitude sur la position et celle sur le nombre d'onde (ou la quantité de mouvement) sont réparties de façon optimale : on ne peut pas faire mieux.

2. **Transformée de Fourier simple**
   La transformée de Fourier d'une gaussienne est elle-même une gaussienne.

$$\psi(x) \propto^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \Leftrightarrow \phi(k) \propto e^{-\sigma^2 k^2}.$$

Cette propriété facilite grandement les calculs, notamment pour passer du domaine de l'espace au domaine des impulsions.

3. **Évolution temporelle analytique**
   Sous l'hamiltonien de particule libre, un paquet gaussien reste gaussien à tout instant, simplement avec un étalement (σ(t)) qui s'élargit de façon connue. Cela permet de suivre exactement la dispersion du paquet d'ondes sans recourir à des approximations numériques lourdes.

4. **Représentation de paquets localisés**
   Physiquement, une particule réellement localisée ne peut pas être décrite par une onde plane infinie. Un paquet gaussien modélise un état « quasi-localisé » et permet d'étudier la propagation et la diffusion spatiale d'une particule libérée ou confinée.

5. **Lien avec l'oscillateur harmonique**
   Les fonctions propres de l'oscillateur harmonique quantique sont des polynômes de Hermite fois une enveloppe gaussienne. Autrement dit, la gaussienne est la base naturelle du cas quadratique, ce qui simplifie l'étude de petits mouvements autour d'un minimum de potentiel.

6. **Simplicité mathématique et symétrie**
   La forme exponentielle en $-x^2$ est symétrique, lisse, et ne présente pas de discontinuités ni de coins. Elle est donc très commode pour des manipulations analytiques et pour assurer que la fonction d'onde et ses dérivées sont partout bien définies.

En résumé, la gaussienne offre un **compromis idéal** entre localisation spatiale, contrôle minimal de l'incertitude, et facilité de calcul aussi bien en espace qu'en impulsion. C'est pourquoi elle constitue souvent le « paquet d'ondes de choix » pour illustrer et étudier de nombreux phénomènes en mécanique quantique.

Voir l'annexe D (Fonction d'onde gaussienne et principe d'incertitude)

La formule d'Heisenberg pour le principe d'incertitude se déduit de la relation suivante :

$$\Delta x \, \Delta k = 1/2$$

Or, comme :

$$p = \hbar \, k_{dB} \implies k_{dB} = p/\hbar$$

En substituant dans l'inégalité précédente, on obtient :

$$\Delta x\, \Delta \left(\frac{p}{\hbar}\right) = \frac{1}{2} \implies \Delta x \left(\frac{\Delta p}{\hbar}\right) = \frac{1}{2} \Longrightarrow \Delta x\, \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Cette valeur $\hbar/2$ représente la borne inférieure théorique : en pratique, on peut observer

$$\Delta x\, \Delta p > \hbar/2$$

La forme générale du principe d'incertitude s'écrit donc :

$$\Delta x\, \Delta p \geq \hbar/2$$

Le paquet d'ondes d'une particule n'est pas obligatoirement une gaussienne

Tout état quantique localisé peut se construire comme une superposition d'ondes planes, et la forme de l'enveloppe spatiale peut être **n'importe quelle** fonction carrément intégrable (à condition qu'elle soit normalisable). La gaussienne est simplement la plus **commode** et "optimale" (sature l'inégalité d'incertitude, reste gaussienne sous dispersion…), mais on rencontre aussi :

- **Paquet rectangulaire**
- **Paquet de Lorentz**
- **Paquet "chapeau mexicain"** ou combinaisons de gaussiennes

Chaque forme a ses avantages et inconvénients :

- **Rectangulaire/sinc** : localisation « compacte » en espace, mais spectre à lobes latéraux, plus difficile à maîtriser.
- **Lorentzienne** : spectre simple (exponentiel), mais queue spatiale longue (moins localisée).
- **Gaussienne** : le juste milieu, pas de lobes secondaires, spectre simple, évolution analytique.

En pratique, on choisit la forme du paquet d'ondes selon le problème physique (confinement dans un puits, diffusion, formes initiales expérimentales, etc.)

La fonction d'onde et l'atome d'hydrogène

Dans l'atome d'hydrogène, composé d'un proton et d'un électron, la fonction d'onde fournit l'approche mathématique pour comprendre le comportement le l'électron autour du proton.

Les positions possibles de l'électron sont liées aux ondes stationnaires qui découlent de la fonction d'onde. **Rappel : ces ondes ne sont pas réelles, mais imaginaires (fonction complexe). Elles découlent des artifices mathématiques émis au départ. Seul le passage aux probabilités de présence apporte une information réelle sur la position de l'électron. La quantité qui a un sens physique direct est la densité de probabilité de présence, obtenue en calculant le carré du module de la fonction d'onde, $|\Psi|^2$. Item que nous aborderons plus loin.**

Le potentiel de Coulomb autour du proton a une symétrie sphérique, car il dépend que de la distance entre les deux particules chargées. Nous pouvons considérer le potentiel coulombien comme une «sphère» 3D à surface équipotentielle. Il s'agit d'une **symétrie sphérique du potentiel** et non d'une surface rigide. Les ondes stationnaires seront contraintes de s'établirent dans cette espace $\mathbb{R}^3$ à symétrie sphérique.

- Une onde stationnaire classique (comme sur une corde ou une membrane plane) est une vibration où certains points restent fixes (nœuds) et d'autres oscillent avec une amplitude maximale (ventres).
- Sur une sphère, les modes propres d'oscillation (formes de vibration naturelles) prennent la forme d'harmoniques sphériques : ce sont des motifs stationnaires qui présentent des zones nodales (où la fonction s'annule) et des zones de ventres, répartis selon la géométrie sphérique
- Mathématiquement, les harmoniques sphériques sont les fonctions propres du laplacien sur la sphère, et toute vibration stationnaire de la surface d'une sphère peut être décomposée en une somme d'harmoniques sphériques, exactement comme toute onde stationnaire sur une corde peut être décomposée en modes sinusoïdaux
- Physiquement, cela signifie que les harmoniques sphériques sont les motifs d'onde stationnaire possibles sur une sphère, chacun caractérisé par un nombre de nœuds selon la latitude et la longitude
- Les harmoniques sphériques sont bien l'équivalent des ondes stationnaires, mais adaptées à la surface d'une sphère, avec des motifs nodaux spécifiques à cette géométrie

Plus spécifiquement, l'état quantique de l'électron est décrit par une fonction d'onde complexe Ψ(r, θ, ϕ), solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\left(\frac{\hbar^2}{(2\,\mu)}\right)\Delta\Psi(r,\theta,\varphi)\;+\;V(r)\Psi(r,\theta,\varphi)\;=\;E\;\Psi(r,\theta,\varphi)$$

avec

- ħ (h-bar) le réel de Planck réduit,
- $\frac{1}{\mu}$ masse réduite. Tiens compte de la masse du proton et de la masse de l'électron. Le proton n'est pas infiniment lourd, le système tourne autour d'un centre de masse commun,

$$\frac{1}{\mu}=\frac{1}{m_p}+\frac{1}{m_e}\;\approx\;\frac{1}{m_e}$$

- Δ le laplacien,
- $\mathrm{V(r)}=\;-\;\frac{e^2}{(4\,\pi\,\varepsilon_0\,r)}$ le potentiel coulombien à symétrie sphérique,
- E l'énergie de l'état stationnaire.

Séparation des variables
En coordonnées sphériques (r, θ, ϕ), on pose :

$$\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)=R_{n\ell}(r)\;Y_\ell^m\;(\theta,\phi),$$

- $\boldsymbol{R_{n\ell}(r)}$ défini par des polynômes de Laguerre généralisés, dont les zéros radiaux correspondent aux « nœuds » dans la direction $\boldsymbol{r}$.
- $\boldsymbol{Y_\ell^m\;(\theta,\phi)}$, sont les harmoniques sphériques, fonctions propres du laplacien angulaire sur la sphère S^2, satisfaisant

$$\Delta_{S^2}\,Y_\ell^m=-\ell(\ell+1)\,Y_\ell^m.$$

Les indices quantiques (n, ℓ, m) déterminent respectivement :

- $\boldsymbol{n}$: nombre de nœuds radiaux + 1 (niveau principal),
    - **(nombre quantique principal) ($\boldsymbol{n}\in\mathbb{N}^*$) :** Il détermine principalement le **niveau d'énergie** de l'électron. Il est aussi lié à la taille moyenne de l'orbitale. Le nombre de nœuds total de la fonction d'onde est $n-1$.

- ℓ : nombre de zones nodales selon la latitude

  (nombre quantique azimutal) ($\ell \in \mathbb{N}$) : Il détermine la forme globale de l'orbitale (le nombre de surfaces nodales qui passent par le noyau) et est souvent associé aux lettres s, p, d, f...

  - l=0 (orbitale s) : Forme sphérique, aucun nœud angulaire.
  - l=1 (orbitales p) : Forme de "lobe", un plan nodal.
  - l=2 (orbitales d) : Formes plus complexes, deux plans nodaux.

- m : projection angulaire (nombre de zones nodales selon la longitude).

  - **(nombre quantique magnétique) (-ℓ ≤ m ≤ ℓ):** Il détermine l'**orientation** de l'orbitale dans l'espace. Plus précisément, il est lié à la projection du moment cinétique sur un axe (généralement z). La valeur absolue | m | correspond au nombre de nœuds angulaires qui contiennent l'axe z (comme des plans méridiens ou "de longitude").

Densité de probabilité
La quantité physiquement mesurable est la densité de probabilité :

$$\rho(r,\theta,\varphi) \;=\; |\Psi_{n\ell m}\,(r,\theta,\varphi)|^2$$

et la probabilité de trouver l'électron dans le volume élémentaire d^3r autour du point (r,θ,φ) est

$$P = |\,\Psi(r,\theta,\varphi)\,|^2\; d^3r.$$

Quantification des niveaux d'énergie
Les conditions aux limites (régularité en $r \;=\; 0$ et décroissance à l'infini) n'admettent que des valeurs d'énergie discrètes,

$$E_{\mathrm{n}} \;= \frac{\mu\, e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\, \hbar^2 n^2}$$

correspondant aux seules ondes stationnaires admissibles. Exemple : La valeur numérique de $E_1 \simeq -13{,}6$ eV.

Ainsi, la mécanique quantique de l'atome d'hydrogène apparaît comme la description d'ondes stationnaires complexes, où seules les configurations satisfaisant les conditions physiques et géométriques du problème produisent des niveaux d'énergie et des densités de probabilité bien définis.

Les résultats obtenus pour l'atome d'hydrogène à partir de l'équation de Shrödinger a permis le bien-fondé de cette équation.

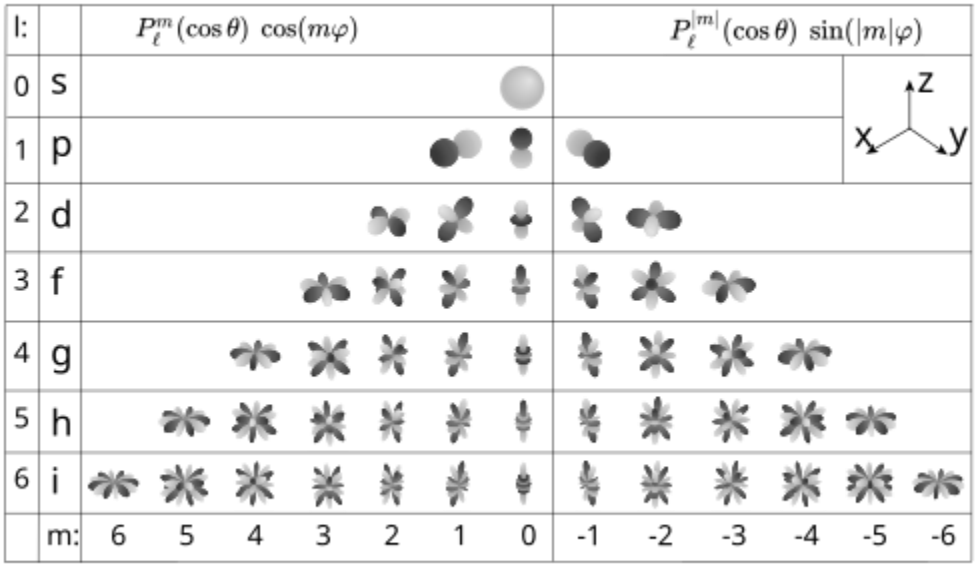


Image pour les harmoniques sphériques réelles .

By 3eфp - Own work, CC0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=85303448

Simulateur : Fonction d'ondes de l'atome d'hydrogène

Lecture suggérée pour plus de détails :

Thornton |Rex, *Physique moderne* (3e édition, de boek, chapitre 7)

CONCLUSION

Ce document a proposé une construction pédagogique de l'équation de Schrödinger fondée sur une articulation rigoureuse entre relativité restreinte, oscillation harmonique et mécanique ondulatoire. En modélisant une particule au repos comme un oscillateur harmonique abstrait, nous avons montré comment les effets relativistes transforment cette oscillation en onde progressive, conduisant à une représentation complète par la fonction d'onde.

Le quadrivecteur fréquences/vecteurs d'onde a joué un rôle central, permettant de relier naturellement l'énergie, la fréquence, l'impulsion et la longueur d'onde. Cette approche a mené, sans postulat quantique arbitraire, à l'équation de Schrödinger — dans ses formes dépendante et indépendante du temps — comme conséquence d'une transition relativiste cohérente.

L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde, essentielle à la mécanique quantique, est ici replacée dans un cadre dynamique : la **densité de probabilité** devient l'expression naturelle de la localisation partielle d'un paquet d'ondes. C'est dans ce contexte qu'émerge le **principe d'incertitude**, non comme une limitation mystérieuse, mais comme une conséquence directe de la **périodicité et de la superposition des ondes**. La contrainte $\Delta x\, \Delta p \geq \hbar/2$ résulte alors de la structure même des paquets d'ondes, soulignant l'impossibilité de localiser parfaitement une particule sans en altérer la composante impulsionnelle.

Cette démarche offre également une base solide pour la compréhension des systèmes liés. En particulier, l'**atome d'hydrogène** constitue un exemple fondamental où l'équation de Schrödinger, appliquée à un potentiel coulombien central, permet de retrouver avec une précision remarquable les niveaux d'énergie quantifiés observés expérimentalement. L'apparition des **nombres quantiques**, des **orbitales** et des **harmoniques sphériques** découle directement de la résolution de cette équation en coordonnées sphériques — justifiant l'approche ondulatoire comme description fidèle de la structure atomique.

Enfin, en généralisant à l'**oscillateur anharmonique relativiste**, on montre que même lorsque la dynamique devient non linéaire, une description ondulatoire reste possible via la construction de **paquets d'ondes** associés à chaque mode harmonique. La cohérence entre vitesse de groupe et vitesse de la particule renforce alors la validité de cette modélisation.

Cette perspective ne prétend pas se substituer à la formulation canonique de la mécanique quantique, mais elle en éclaire les fondements. Elle offre une vision unifiée, où la mécanique ondulatoire apparaît non comme une rupture avec la physique classique, mais comme son prolongement naturel à travers le prisme de la relativité et de l'oscillation.

ANNEXE A

Transition rigoureuse entre référentiels

1. Formalisme de base et définitions

Référentiel R' (référentiel propre de la particule)

- La particule est au repos ($dx' = 0$), son mouvement n'est qu'une oscillation harmonique interne :

$$Z'(\tau) = X_0\,[cos(\omega_0\,\tau) + isin(\omega_0\,\tau)] = X_0 e^{(i\,\omega_0\,\tau)}$$

  - τ : temps propre, défini par l'invariant d'intervalle.
  - $\omega_0 = m_0 c^2 \,/\, \hbar$: pulsation propre, car $E_0 = m_0 c^2 = \hbar\,\omega_0$.
  - X^0 : amplitude caractéristique.

Référentiel R (laboratoire)

- La particule se déplace à vitesse constante v selon l'axe x.

2. Transformations de Lorentz

On note $(x',\, t')$ les coordonnées en R' et $(x,\, t)$ celles en R.

2.1 Transformation directe

$$x = \gamma\,(x' + v\,t')$$
$$t = \gamma\left(t' + \frac{v\,x'}{c^2}\right)$$

2.2 Transformation inverse

$$x' = \gamma\,(x - v\,t)$$
$$t' = \gamma\left(t - \frac{v\,x}{c^2}\right)$$

avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{(1 - v^2\,/\,c^2)}}$.

2.3 Calcul du temps propre

L'invariant d'intervalle :

$$d\tau^2 = dt^2 - \frac{dx^2}{c^2}.$$

Pour un mouvement uniforme dans R, la vitesse instantanée est $v = \frac{dx}{dt}$, donc $dx = v\,dt$

$$d\tau = \sqrt{dt^2 - \frac{dx^2}{c^2}} = \sqrt{dt^2 - \frac{v^2\,dt^2}{c^2}} = \sqrt{(1 - v^2\,/\,c^2)}\;dt = \frac{dt}{\gamma}.$$

Inversement, dans R′ où la particule est au repos :

$$dt' = \gamma\, d\tau, \text{ puis } d\tau = \frac{dt'}{\gamma}$$

3. Transformation de l'oscillation

3.1 Oscillation dans le référentiel propre R'

$$Z'(\tau) = X_0 e^{i\,\omega_0\,\tau}$$

3.2 Substitution du temps propre (τ) dans R

1. Pour exprimer τ en fonction des coordonnées (x, t) du référentiel R, on utilise les transformations de Lorentz :

$$t' = \gamma\left(t - \frac{vx}{c^2}\right)$$

où

- t' : temps mesuré dans R',
- t : temps mesuré dans R,
- x : position dans R,
- $\gamma = \frac{1}{\sqrt{(1 - v^2 / c^2)}}$: facteur de Lorentz

2. Puis $\tau = t' / \gamma$:

$$\tau = t - \frac{vx}{c^2}$$

Ainsi :

$$Z'(\tau) = X_0 e^{i\,\omega_0\left(t - \frac{vx}{c^2}\right)}$$

3.3 Fréquence de phase

La phase devient $\varphi(x,\, t) = \omega_0\,\tau = \omega_0\,\left(t - \frac{vx}{c^2}\right)$.

$$Z\,(x,t) = X_0 e^{i\,\left(\omega_0 t - \frac{\omega_0 vx}{c^2}\right)}$$

On définit la nouvelle pulsation de phase :

$$\omega_t = \gamma\, \omega_0 \text{ (fréquence de phase)}$$

car la composante temporelle de la phase se dilate de γ.

3.4 Onde plane en R

avec

$$k_{dB} = \frac{\gamma\, \omega_0 v}{c^2} = \frac{\gamma\, m_0\, v}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \quad \text{(vecteur d'onde)},$$

L'oscillation devient :

$$Z(x,\, t) = X_0\, e^{i\,(\omega_t\, t - k_{dB}\, x)},$$

et

$$p = \gamma\, m_0\, v.$$

4. Vérifications

- Relations de de Broglie :

$$\hbar\, \omega_t = \gamma\, m_0\, c^2 = E_t; \quad \hbar\, k_{dB} = \gamma\, m_0\, v = p$$

- Relation de dispersion :

$$\omega_t^2 - k_{db}^2\, c^2 = \left(\frac{m_0 c^2}{\hbar}\right)^2 \Leftrightarrow E_t^2 = (m_0\, c^2)^2 + (p\, c)^2$$

5. Interprétation et généralisation

- L'oscillation en temps propre devient une onde plane spatio-temporelle sans postulat.
- Invariant d'intervalle et phase quantique $\omega_0\, \tau$ sont préservés.

Conclusion

Appliquer les transformations de Lorentz à une oscillation propre génère naturellement la forme plane de la fonction d'onde, les relations de Broglie et la dispersion relativiste sans hypothèse ad hoc.

Annexe B

Mécanique quantité et probabilité

En mécanique quantique, la fonction d'onde Ψ (x,t) est une **amplitude de probabilité**, pas une probabilité en elle-même. Voici pourquoi on prend le carré (ou plus précisément le **module au carré**) de Ψ pour obtenir une probabilité :

1. **Amplitude complexe et signe**
   Ψ peut être un nombre complexe ; si on prenait simplement Ψ (x,t) comme probabilité, on obtiendrait des valeurs qui peuvent être négatives ou comporter une partie imaginaire, ce qui n'a pas de sens pour une probabilité.

2. **Module au carré garantissant une quantité réelle et positive**
   Le module au carré

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)$$

est toujours un nombre réel et non négatif. C'est donc la quantité naturelle pour représenter une densité de probabilité en x.

3. **Règle de Born**
   Cette prescription (« probabilité = amplitude au carré ») est connue sous le nom de **règle de Born**. Elle garantit que :

   - L'intégrale de $|\Psi|^2$ sur tout l'espace vaut 1 (condition de normalisation) ;
   - Lorsqu'on a un système en superposition de plusieurs états, les probabilités s'ajoutent de façon cohérente (interférences possibles au niveau des amplitudes, mais somme des $|\Psi|^2$ seule donne la probabilité finale).

4. **Exemple simple**
   Si Ψ est une superposition de deux « pics » localisés A et B :

$$\Psi = c_A\,\psi_A + c_B\,\psi_B$$

Alors

$$|\Psi|^2 = |c_A|^2|\psi_A|^2 + |c_B|^2|\psi_B|^2 + 2\Re[c_A^*\,c_B\,\psi_A^*\,\psi_B]$$

Les termes croisés expliquent les interférences, mais les "poids" des positions A et B restent donnés par $|c_A|^2$ et $|c_B|^2$. Les coefficients c_A et c_B devraient être normalisés ($|c_A|^2 + |c_B|^2 = 1$).

En résumé, on élève la fonction d'onde au carré (module au carré) pour passer d'une **amplitude** (qui peut être positive, négative ou complexe) à une **probabilité** (qui doit être réelle, positive et normalisable à 1). C'est le postulat fondamental (règle de Born) qui relie le formalisme mathématique de la fonction d'onde aux résultats expérimentaux.

Annexe C

perplexity

Pourquoi le fait d'élever au carré la fonction d'onde aboutit à une probabilité ?

1. Origine : la fonction d'onde est complexe

En mécanique quantique, l'état d'une particule est décrit par une fonction d'onde $\Psi(x,t)$, qui est en général une fonction complexe.
Exemple :

$$\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

2. Interprétation physique : l'hypothèse de Born

En 1926, Max Born a proposé que **la probabilité de trouver la particule en un point x à l'instant t est donnée par le module au carré de la fonction d'onde** :

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$$

C'est-à-dire :

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t) \cdot \Psi\,(x,t)$$

où ψ^* est le conjugué complexe de Ψ.

3. Pourquoi le module au carré ?

- **Le module au carré est toujours réel et positif**, ce qui est indispensable pour une probabilité.
- La fonction d'onde, étant complexe, contient des informations sur l'amplitude (reliée à la probabilité) et la phase (reliée aux interférences).
- **Seul le module au carré a une signification physique directe** : il donne la densité de probabilité de présence.

4. Lien mathématique : exemple

Prenons $\Psi(x) = a + ib$ (avec a et b réels).
Alors :

$$|\Psi(x)|^2 = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2$$

C'est toujours un nombre réel positif.

5. Pourquoi pas seulement le réel ou l'imaginaire ?

- Si on prenait seulement la partie réelle ou imaginaire, on pourrait obtenir des valeurs négatives ou nulles, ce qui n'a pas de sens pour une probabilité.
- Le module au carré, en revanche, garantit que la somme (ou l'intégrale) des probabilités sur tout l'espace peut être normalisée à 1.

6. Résumé et justification physique

C'est le module au carré de la fonction d'onde qui, selon l'interprétation de Born, donne la probabilité de présence d'une particule, car cette opération élimine la partie imaginaire et fournit une grandeur réelle et positive, adaptée à une interprétation probabiliste.

En bref :

- La fonction d'onde est complexe (contiens « i »).
- Le module au carré donne une densité de probabilité réelle et positive.
- C'est pourquoi on l'utilise pour relier la théorie quantique aux probabilités mesurées expérimentalement.

Annexe D

Fonction d'onde gaussienne et principe d'incertitude

CHATGPT

Exemple de la fonction d'onde gaussienne et du principe d'incertitude

Pour une fonction d'onde gaussienne centrée en 0 et de largeur caractéristique σ_x :

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi{\sigma_x}^2)^{\frac{1}{4}}}\ e^{\left[-\left(\frac{x^2}{4{\sigma_x}^2}\right)\right]}$$

on montre pas à pas que :

$$\Delta x\ \Delta k\ =\ 1/2$$

1. Définition des incertitudes

Position :

$$\Delta x\ =\ \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$

Nombre d'ondes :

$$\Delta k\ =\ \sqrt{\langle k^2\rangle - \langle k\rangle^2}$$

Les espérances sont définies par :

$$\langle x\rangle\ =\ \int\ x\ |\Psi(x)|^2\ dx$$

et

$$\langle x^2\rangle = \int x^2|\Psi(x)|^2dx$$

de même pour ⟨k⟩ et ⟨k²⟩ en espace des impulsions avec ϕ(k), la transformée de Fourier de ψ(x).

2. Calcul de Δx

Normalisation :

$$\int\ |\Psi(x)|^2\ dx\ =\ 1$$

Espérance de x :

Par symétrie de la gaussienne centrée,

$$\langle x \rangle \;=\; 0$$

Espérance de x² :

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi {\sigma_x}^2}} \right) \exp\left[-\frac{x^2}{(2{\sigma_x}^2)} \right] dx \;=\; {\sigma_x}^2$$

Écart-type :

$$\Delta x \;=\; \sqrt{\langle x^2 \rangle - \; 0} = \; \sigma_x$$

3. Calcul de Δk

Transformée de Fourier :

$$\phi(k) = \frac{(2{\sigma_x}^2)^{1}/^{4}}{\pi^{1}/_{4}} \; \exp[-{\sigma_x}^2 k^2]$$

Espérance de k :

Par symétrie, ⟨k⟩ = 0

Espérance de k² :

$$\langle k^2 \rangle = \; \int k^2 \left(\frac{\sqrt{2{\sigma_x}^2}}{\sqrt{\pi}} \right) \times \exp[-2{\sigma_x}^2 k^2] \, dk \;=\; \frac{1}{(4{\sigma_x}^2)}$$

Écart-type :

$$\Delta k \;=\; \sqrt{\langle k^2 \rangle} = \; \frac{1}{(2\sigma_x)}$$

4. Produit des incertitudes

$$\Delta x \;\; \Delta k \;=\; \sigma_x \;\left[\frac{1}{(2\sigma_x)} \right] = \frac{1}{2}$$

5. Interprétation

Cette valeur minimale (1/2) est la borne inférieure de l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta x \;\; \Delta k \;\geq\; 1/2$$

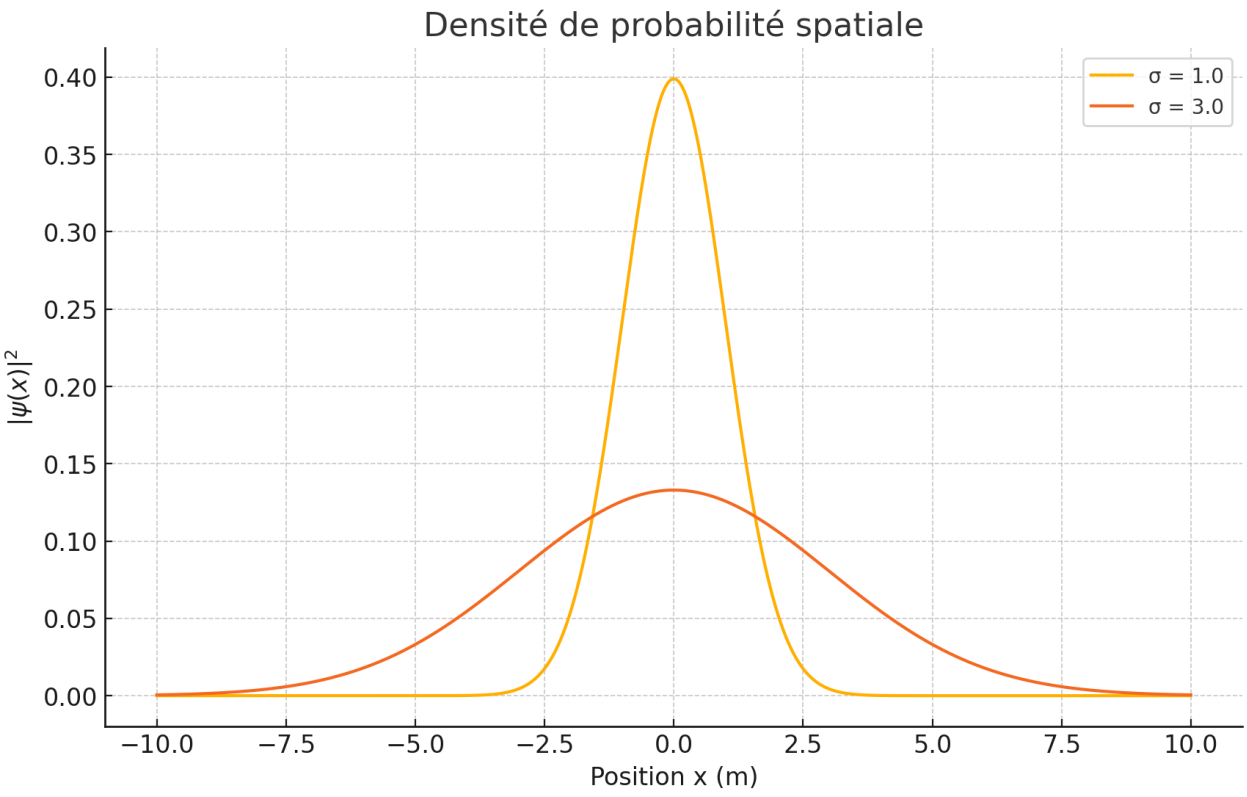
Seule la gaussienne réalise exactement cette borne (on dit qu'elle « sature » l'inégalité).

Toute autre forme de paquet d'ondes donnera $\Delta x \;\; \Delta k \;>\; 1/2$.

Ainsi, la gaussienne est le paquet d'ondes optimal pour minimiser simultanément l'incertitude de position et de nombre d'onde.

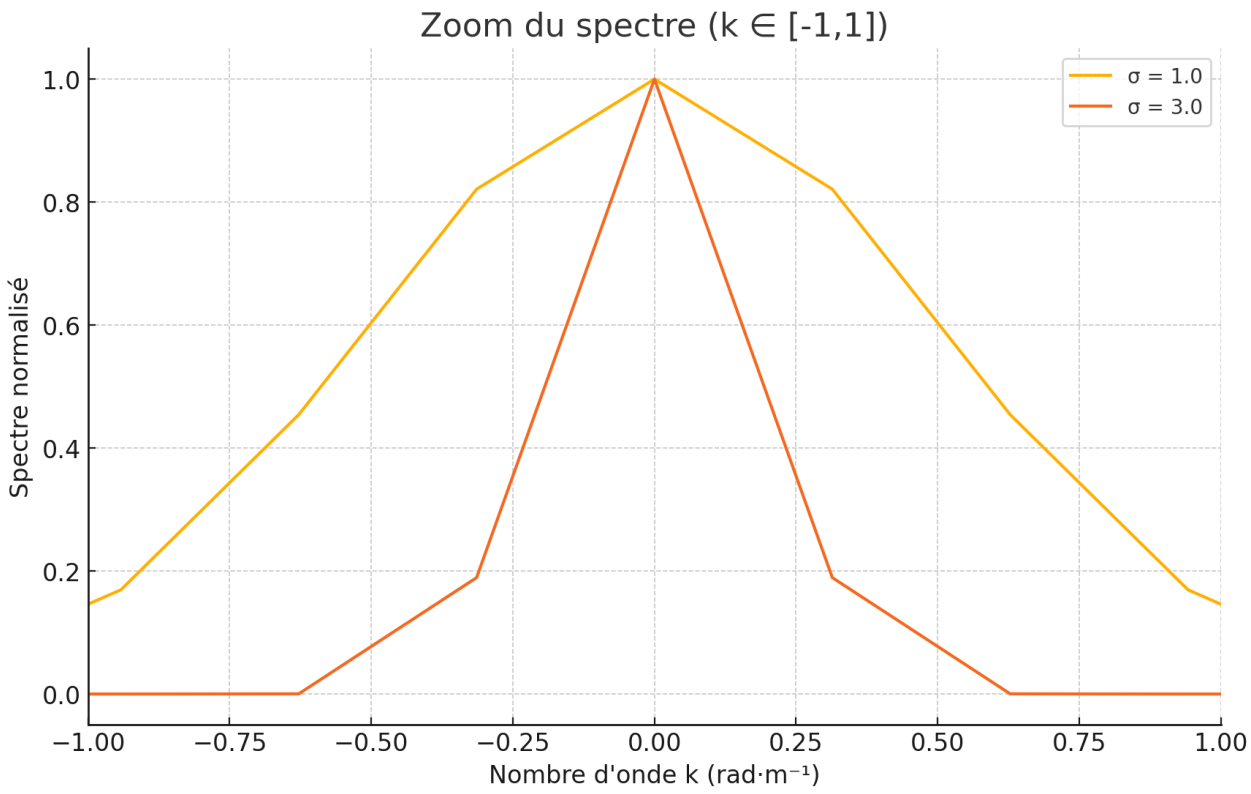
1. **Densité de probabilité spatiale** pour deux paquets gaussiens de largeurs différentes (σ petit vs. σ grand) :
    - Plus σ est petit → paquet très localisé (flèche courte) → incertitude en position faible.
    - Plus σ est grand → paquet étalé → incertitude en position forte.
2. **Densité de probabilité spectrale** (espace des nombres d'onde) :
    - Pour σ petit → spectre très large (incertitude en k grande).
    - Pour σ grand → spectre étroit (incertitude en k petite).

Ces deux images montrent visuellement que réduire l'incertitude en position (paquet étroit) augmente celle en nombre d'onde (spectre large), et vice versa.



Densité de probabilité spatiale

- **Paquet étroit** (σ=1, ligne jaune) : pic haut et étroit ⇒ forte localisation, Δx petit.
- **Paquet large** (σ=3, ligne orange) : pic plus bas et large ⇒ moins localisé, Δx grand.



Densité de probabilité spectrale

- **Paquet étroit** (σ=1) : spectre très large en k ⇒ Δk grand.
- **Paquet large** (σ=3) : spectre resserré autour de k=0 ⇒ Δk petit.