

# Trajectoires de de Broglie pour la particule dans la boîte

MICHEL GONDRAN et RITA HOBLOS

EDF, Research and Development, 92140 Clamart.

RÉSUMÉ. On montre que le paquet d'onde proposé par Born pour la particule dans la boîte donne des trajectoires presque "identiques" aux trajectoires classiques et que la critique ancienne d'Einstein sur les trajectoires de de Broglie et de Bohm peut être définitivement réfutée.

*ABSTRACT. We show in the case of the particule in a box proposed by Born, that a proper application of the causal interpretation of de Broglie and Bohm to wave packets will give trajectories "close" to the classical trajectories. Moreover, the earlier criticism of Einstein, which was only partially answered, can now be definitively refuted.*

## 1 Introduction

L'exemple de la particule dans la boîte a été particulièrement important dans le débat sur l'interprétation de la mécanique quantique. C'est sur cet exemple trivial qu'Einstein a condamné définitivement l'approche causale de de Broglie et de Bohm.

En 1953, dans [11], il considère une onde stationnaire qui est de la forme :

$$\psi = Re^{iS} \quad (1)$$

*"Les fonctions des coordonnées  $R$  et  $S$  (fonctions réelles) se déduisent de  $\psi$ . Les impulsions (ou les vitesses) du système, qui sont des fonctions du temps, doivent permettre d'obtenir le dérivée de  $S$  par rapport aux coordonnées, si l'on se donne, à un instant particulier, les coordonnées du système individuel étudié.*

*Un simple coup d'oeil à la relation (1) montre que, dans notre cas  $\frac{\partial S}{\partial x}$  est nul, et donc la vitesse elle aussi est nulle. Cette objection, qu'au demeurant Pauli*

*avait déjà soulevée à l'encontre de cette tentative théorique, il y a un quart de siècle, pèse particulièrement lourd au regard de notre exemple. En effet, le fait que la vitesse soit nulle est en contradiction avec l'exigence, bien fondée, selon laquelle, pour un système macroscopique, le mouvement doit être approximativement identique à celui qui découle de la mécanique classique."*

Or Einstein était le seul grand physicien prêt à entendre une telle interprétation causale. Et il réfute l'approche à cause de la vitesse nulle de la particule dans la boîte... pour les solutions stationnaires. Et les réponses de l'époque de de Broglie [8] [9] et de Bohm [2] [3] n'ont pas été convaincantes, cf. une synthèse dans Holland [15] chap.6 p.239-245. Même si la réponse du paquet d'ondes a toujours été évoquée, c'est en fin de discussion au milieu de nombreux autres arguments non pertinents.

On montre dans cet article que la solution de Born [5], considérant un paquet d'onde particulier et non une solution stationnaire, permet de définir une vitesse compatible avec la mécanique classique et qui répond clairement à ce débat.

Il existe deux autres exemples importants où la vitesse de de Broglie est nulle alors qu'il existe des trajectoires en mécanique classique : ce sont les solutions stationnaires de l'atome d'hydrogène et de l'oscillateur harmonique isotrope. Nous rappellerons en conclusion la solution que nous venons d'y apporter [12].

## 2 La particule dans la boîte

Considérons l'équation d'une particule dans une boîte de largeur  $l$ . L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad \forall (x, t) \in [0, l] \times \mathbb{R}^+ \quad (2)$$

$$\psi(0, t) = \psi(l, t) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}^+ \quad (3)$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) \quad ; \quad \forall x \in [0, l] \quad (4)$$

En écrivant la solution de l'équation de Schrödinger sous la forme

$$\psi(x, t) = R(x, t)e^{i\frac{S(x, t)}{\hbar}} \quad (5)$$

de Broglie [7] et Bohm [1] proposent de considérer comme vitesse de la particule à l'instant  $t$  et dans la position  $x$  :

$$v(x, t) = \frac{\nabla S(x, t)}{m}. \quad (6)$$

Les fonctions d'onde stationnaires de (2) (3) (4)

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(k_n x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad (7)$$

avec  $k_n = \frac{n\pi}{l}$  et  $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ , posent un grand nombre de problèmes. Ainsi, tandis que  $R(x, t)$  est bien défini ( $R(x, t) = \sqrt{\frac{2}{l}} |\sin(k_n x)|$ ),  $S(x, t)$  n'est pas défini de manière unique. Il est constant par morceau dans chacun des intervalles  $\frac{(r-1)l}{n} < x < \frac{rl}{n}$  ( $r$  variant de 1 à  $n$ ).

On en déduit que  $\nabla S = 0$  presque partout excepté aux sommets  $\frac{r}{n}l$ , ce qui entraîne  $v = 0$  presque partout. Cette vitesse nulle donne à Einstein (1953) [10] une bonne raison de critiquer l'interprétation causale de de Broglie et Bohm.

De plus si l'on considère le "potentiel quantique"

$Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta R}{R}$ , on trouve

$$Q = E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{n\pi}{l} \right)^2$$

et ce potentiel reste constant et égal à l'énergie, même lorsqu'on fait tendre  $\hbar$  vers 0 (le produit  $n\hbar$  reste constant).

La raison de ces problèmes est bien connue. Elle provient uniquement de l'utilisation des solutions stationnaires (7) qui ne sont pas physiquement valables car ne correspondant pas à des paquets d'onde. Un paquet d'onde est une convolution par une fonction très régulière d'une famille d'ondes planes qui régularise ainsi la phase de la fonction d'onde. C'est l'hypothèse faites par Born [4] dans sa réponse à Einstein [10] où il montre ainsi sur le cas simple de la particule dans la boîte le passage en densité de probabilité de la mécanique quantique à la mécanique classique. Si on suppose que les solutions physiques de l'équation de Shrödinger sont les fonctions d'onde ayant une phase continue, on peut définir le logarithme complexe de la fonction d'onde complexe  $\psi(x, t)$ , à partir de (5) par continuité en  $t$  pourvu que  $\psi_0(x) = R_0(x) e^{i \frac{S_0(x)}{\hbar}}$

admette une phase  $S_0(x)$  continue.

### 3 Les trajectoires de de Broglie

La solution suggérée par Born [5] correspond à une condition initiale invariante par rapport aux translations  $\pm 2l$  (aller-retour dans la boîte dans les deux directions). Il propose

$$\psi_0(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{f(2kl + x) - f(2kl - x)\} \quad (8)$$

avec

$$f(x) = \left( \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{\left\{ \frac{-(x-x_0)^2}{4\sigma_0^2} + \frac{i}{\hbar} m v_0 (x-x_0) \right\}} \quad (9)$$

qui correspond à une particule ayant à l'instant initial une position moyenne  $x_0$  (avec un écart type  $\sigma_0$ ) et une vitesse  $v_0$ .

On fait aussi les hypothèses suivantes

$$\tau_0 = \frac{\hbar}{2m v_0} \ll \sigma_0 \ll l \quad (10)$$

qui sont les conditions de convergence de Born [5].

On en déduit

$$\psi(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \{F(2kl + x, t) - F(2kl - x, t)\} \quad (11)$$

avec

$$F(x, t) = \left( \frac{s(t)}{\sigma(t) \sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{\left\{ -\frac{(x-x_0-v_0 t)^2}{2\sigma(t)^2} - \frac{i m}{2\hbar t} \left[ \frac{\sigma_0^2}{\sigma(t)^2} (x-x_0-v_0 t)^2 - (x-x_0)^2 \right] \right\}} \quad (12)$$

$$\text{où } s(t) = \frac{\sigma_0 - i\tau_0 t}{\sigma(t)} ; \tau_0 = \frac{\hbar}{2m\sigma_0} ; \sigma(t) = \sqrt{\sigma_0^2 + \tau_0^2 t^2}.$$

Pour la simulation, on considère que la particule est un électron dont les caractéristiques sont (cf. Jönsson [19]) :  $m = 9.11 \times 10^{-28}g$ ,  $\hbar = 1.055 \times 10^{-27}gcm^2s^{-1}$ ,  $v_0 = 1.3 \times 10^{10}cms^{-1}$  et  $\sigma_0 = 10^{-5}cm$ . Pour la boîte, on prend  $l = 10^{-3}cm$  et  $x_0 = 0.5 \times 10^{-3}cm$ .

La vitesse  $v$  est calculée numériquement à partir de la formule classique

$$v(x, t) = \frac{\hbar}{m} \frac{Im(\frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^*)}{\psi \psi^*} \quad (13)$$

La figure 1 représente alors la trajectoire de la particule dans la boîte pour un point de départ  $x_0 = 0.5 \times 10^{-3}cm$  (le point central du paquet d'onde). A l'échelle de représentation, elle parait identique à la trajectoire de la particule dans la boîte en mécanique classique.

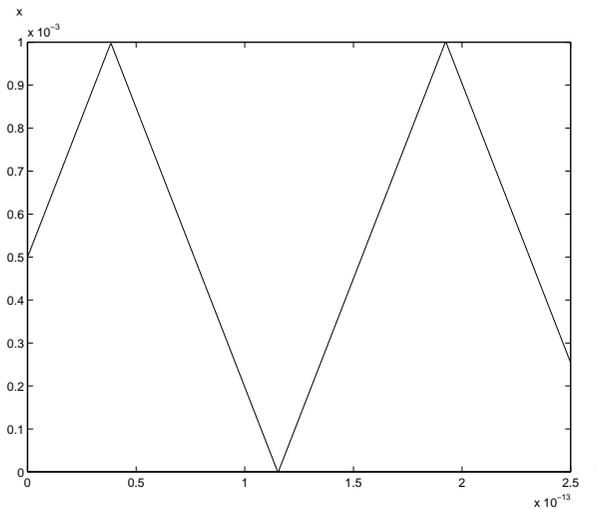


FIG. 1 – Particule dans la boîte pour le point central  $x_0 = 0.5 \times 10^{-3}$ .

La figure 2 représente un zoom de la figure 1 au voisinage de la première réflexion montrant la différence avec la mécanique classique.

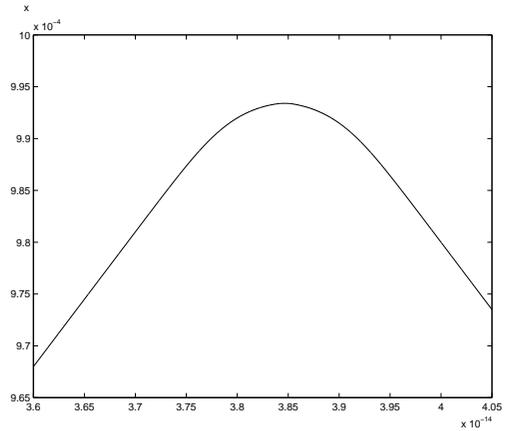


FIG. 2 – Zoom au voisinage du premier sommet de FIG.1.

Sur la figure 3, on a représenté trois trajectoires correspondant à 3 points de départ  $x_0 + \sigma_0$ ,  $x_0$ ,  $x_0 - \sigma_0$  (le point central du paquet d'onde ainsi que les deux points à un écart type  $\sigma_0$  du centre).

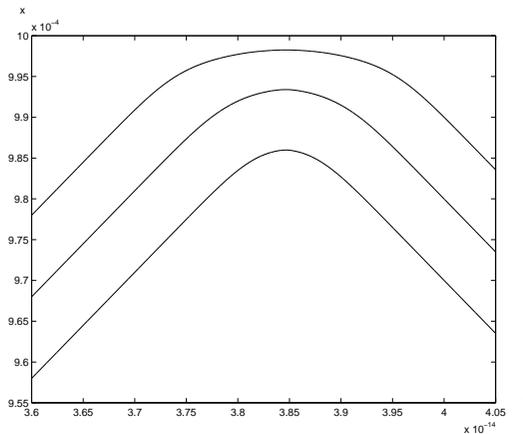


FIG. 3 – On rajoute à FIG.2 les trajectoires correspondant à  $\pm\sigma_0$  du centre du paquet.

La figure 4 représente la variation du potentiel quantique pour le point central. On remarque que le potentiel est nul sauf au voisinage des réflexions où il subit une importante variation.

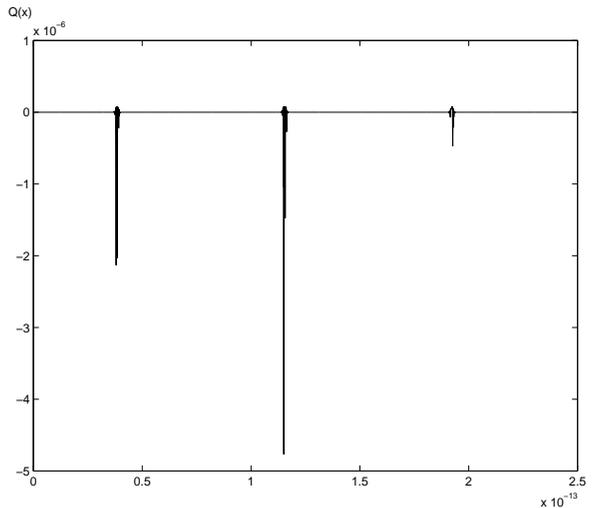


FIG. 4 – Evolution du potentiel de FIG.2.

Les calculs ont été effectués à partir de (10)(11)(12) et non à partir de l'approximation du développement classique de  $\psi(x, t)$  en série

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin(k_n x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

approximation qui nécessite la prise en compte de plus de 250 termes autour de la valeur de module maximum  $a_{n_{max}} = 7.079$  obtenue pour  $n_{max} = 3\,573\,215$ .

#### 4 Conclusion

Ainsi dans le cas de la particule dans la boîte, si le paquet d'onde correspond à un paquet d'ondes bien choisi, alors les trajectoires de de Broglie et Bohm existent et sont presque "identiques" aux trajectoires classiques.

Cette solution peut être considérée comme naïve et facile, comme était considérée la théorie de de Broglie et Bohm par Einstein dans sa lettre de 15 mai 1952, n°99, à Born [5] : *"As-tu vu que Bohm croit (comme de Broglie il ya 25 ans) pouvoir interpréter la théorie quantique dans un sens déterministe ? Ce procédé me semble un peu trop facile ; mais tu es évidemment mieux placé pour en juger"* ; mais cette solution répond clairement à ce débat.

Or comme dans cet exemple d'Einstein, la vitesse de de Broglie et de Bohm est aussi nulle pour les fonctions propres  $\Psi_{nlm}$  des équations de Schrödinger lorsque  $m = 0$ . En effet, comme les fonctions  $\Psi_{nl0}$  sont réelles, la vitesse donnée par la définition classique de Broglie et Bohm est nulle :

$$\mathbf{v}_1 = \frac{\nabla S}{m} = \frac{i\hbar}{2m\rho}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) = 0.$$

C'est en particulier le cas pour les solutions stationnaires de l'électron dans l'atome d'hydrogène et de l'oscillateur harmonique isotrope.

Nous avons proposé récemment [12] une explication pour ces problèmes. On montre d'abord que pour l'équation de Dirac, la vitesse de Dirac des états stationnaires de l'atome d'hydrogène et de l'oscillateur harmonique isotrope n'est pas nulle et correspond à une trajectoire circulaire. Pour l'état fondamental  $1s$  de l'atome d'hydrogène, on trouve :

$$\mathbf{v}_{1s} = \alpha c \sin\theta \mathbf{u}_\varphi.$$

On rappelle ensuite que pour obtenir une bonne approximation de la vitesse de Dirac, il est nécessaire d'ajouter la vitesse de Gordon [14] qui s'écrit

$$\mathbf{v}_2 = \frac{\hbar}{2m\rho} \text{rot}(\psi^* \boldsymbol{\sigma} \psi) \quad (14)$$

dans l'approximation de Pauli [19], [17], [4], [15], et

$$\mathbf{v}_2 = \frac{1}{m\rho} \nabla\rho \times \mathbf{s} \quad (15)$$

dans l'approximation de Schrödinger [16], [10] où  $\mathbf{s}$  correspond à un spin constant. On trouve alors une vitesse non nulle et une trajectoire circulaire pour l'atome d'hydrogène et l'oscillateur harmonique [10], [12].

Dans l'interprétation de de Broglie et Bohm, il faut donc prendre pour vitesse

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = \frac{\nabla S}{m} + \frac{1}{m\rho} \nabla\rho \times \mathbf{s} \quad (16)$$

à la place de la vitesse  $\mathbf{v}_1$ . On peut alors montrer que le terme  $\mathbf{v}_2$  est négligeable lorsque la fonction d'onde est étroite [13]. Ce n'est pas le cas de l'atome d'hydrogène, mais c'est le cas de la particule dans la boîte où on peut négliger ce terme comme nous l'avons fait.

La vitesse dépend alors du spin et...le procédé n'est peut-être plus un peu trop facile.

## Références

- [1] Bohm D., 1952, Physical Review, vol 85, p.166-193.
- [2] Bohm D., 1953, In Scientific papers presented to Max Born, p.13-19. Edinburgh : Olivier and Boyd.
- [3] Bohm D., Hiley B.J.,1985,Phys. Rev.Lett., 55, p. 2511-2514.
- [4] D.Bohm, B.J. Hiley,1993, The Undivided Universe, Routledge,London and New York.
- [5] Born M., "Continuity, determinism, and reality", Dan. Mat. Fys. Medd. 30, n°. 2,(1955) , p.1-26.
- [6] Born M., "Albert Einstein, Max Born Briefwechsel 1916-1955".
- [7] De Broglie, 1927, J. de Phys.,8 , p. 225-241.
- [8] De Broglie, 1953, In Scientific papers presented to Max Born, pp.21-80. Edinburgh : Olivier and Boyd.
- [9] De Broglie, 1956, Une tentative d'interprétation causale et non-linéaire de la mécanique ondulatoire,Paris,Gauthiers-Villars.
- [10] C. Colijn, E.R. Vrscaj, Phys.Lett. A **300**,(2002)p.334-340.
- [11] Einstein A., 1953, In Scientific papers presented to M.Born, pp.33-40, Edinburgh : (Oliver and Boyd).
- [12] M. Gondran, A. Gondran, 2003, Revisiting the Schrödinger probability current, quant-ph/0304055v1.
- [13] M. Gondran, A. Gondran, 2003, en préparation.
- [14] W. Gordon, Z. Physik **48**, 11 (1928); W. Gordon, Z. Physik **50**, 630 (1928).
- [15] Holland P.R., 1993 "The Quantum Theory of Motion" Cambridge University Press.
- [16] P.R. Holland, Phys. Rev. A **60**,6 (1999).
- [17] R.Gurtler, D.Hestenes, J. Math. Phys.**16**, 573 (1975); D.Hestenes, Am. J. Phys.**47**, 399 (1979).
- [18] Jönsson C. - 1961 - Zeitschr. Phys., 161, 454.
- [19] L.Landau, E. Lifchitz, Electrodynamique quantique,chap.4, Editions Mir, 1989.