Particule en mouvement dans l'espace et soumise à un champ de force uniforme -méthode de la double solution-

Jacques Robert

Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas, 91405, Orsay, France.
Fondation Louis de Broglie, 23 rue Marsoulan, 75012 Paris.

RÉSUMÉ. On reprend un exemple analytique illustrant la mise en application de la méthode de double solution de Louis de Broglie dans le cas de l'équation de Schrödinger pour une particule soumise à un champ de force conservatif. On montre comment les solutions régulières et singulières apparaissent et leur relation avec le potentiel quantique.

ABSTRACT. One analytical example is given to illustrate the application of Louis de Broglie's double solution method to the Schrödinger equation for a particle subjected to a conservative force field. We show how regular and singular solutions appear and their relation to the quantum potential.

1 Introduction.

Des travaux, trop peu connus, illustrent de manière explicite la mise en oeuvre de la méthode de la double solution de Louis de Broglie [1, 2]. Dans le courant des années 1950, Gérard Petiau [3, 4], a illustré les cours professés par Louis de Broglie à l'Institut Poincaré (années 1952-1953 et 1953-1954), en résolvant quelques problèmes élémentaires de mécanique ondulatoire par la méthode de la double solution. Dans les exemples traités par G. Petiau, le système était une particule en mouvement dans l'espace soit soumise à une force, soit contrainte à évoluer dans une symétrie simple. Ces développements qui présentent à la fois les solutions régulières et les solutions à singularité de la théorie de la double solution sont restés confidentiels, peut-être masqués par l'usage exclusif de la langue française et par une présentation particulièrement concise, associée un usage expert des fonctions spéciales.

La méthode de la double solution s'appuie sur la résolution de l'équation des ondes de Schrödinger, en pratique Louis de Broglie s'appuie le plus souvent sur l'équation relativiste de Klein-Gordon pour une particule, elle en distingue les solutions régulières et les solutions singulières. La théorie a évolué au cours du temps.

Dans l'article de 1927, on peut lire en [1] p.232, l.1-4 : *"Nous désignons ce postulat sous le nom de "principe de la double solution", parce qu'il implique l'existence de deux solutions sinusoïdales de l'équation (19) ayant même facteur de phase, l'une comportant une singularité ponctuelle et l'autre ayant, au contraire une amplitude continue".* Pour préciser ce qui est écrit dans [1] aux paragraphes 1 et 2 puis 3 et 4, les solutions de la même équation de Schrödinger sont cherchées soit sous forme de singularités mobiles, les fonctions $u(x,y,z,t) = f(x,y,z,t)\cos(\frac{\varphi(x,y,z,t)}{\hbar})$, soit sous la forme correspondant à la description d'un nuage de points, les fonctions $\Psi(x,y,z,t) = a(x,y,z)\cos(\frac{\varphi'(x,y,z,t)}{\hbar})$. La différence de paramétrisation entre les deux types de solutions porte sur la distinction entre l'amplitude mobile $f(x,y,z,t)$ et l'amplitude stationnaire $a(x,y,z)$. La concordance des phases qui est mise en jeu dans la méthode de la double solution va concerner ces deux types de solutions. Louis de Broglie considère alors que ce principe est *"provisoire"* [1] p.232, l.4-7. La méthode s'appuie sur une vision complètement ondulatoire de la dualité onde-corpuscule.

L'abondance des discussions sur l'interprétation de la version hydrodynamique de la mécanique quantique par le concept d'onde pilote a eu un effet d'écran sur les solutions à singularités de l'équation de Schrödinger. L'onde pilote s'appuie sur le point de vue simplifié exprimé clairement dans [1] au chapitre (11), p. 241, l.3-8 : *"Mais si l'on ne veut pas invoquer le principe de la double solution, il est admissible d'adopter le point de vue suivant : on admettra l'existence, en tant que réalité distinctes, du point matériel et de l'onde continue représentée par la fonction Ψ et l'on prendra comme postulat que le mouvement du point est déterminé en fonction de la phase de l'onde par l'équation (I). On conçoit alors l'onde continue comme guidant le mouvement de la particule. C'est une onde pilote".* Il est clairement écrit par Louis de Broglie que la théorie de la double solution, qui est purement ondulatoire, ne se réduit pas à la théorie de l'onde pilote, qui associe corpuscule et onde. Les solutions à singularité ne sont pas non plus du même type que les solutions en "paquets d'ondes" construites sur des combinaisons linéaires de solutions stationnaires régulières [1], p. 227, l.10-11.

Il y a plusieurs variantes possibles pour la mise en oeuvre de la méthode de la double solution, liées à des choix de paramétrisation et de systèmes de coordonnées différents pour la fonction S qui représente la phase de l'onde. Il existe aussi des formes multiples pour les solutions de l'équation de Hamilton-Jacobi, solutions qui ne sont que des intermédiaires de calcul pour trouver l'ensemble des mouvements. Dans le cadre de la théorie des ondes, l'existence de ces variantes illustre bien la richesse de la méthode et les ouvertures qu'elle peut susciter [1]p. 228, l. 1-24.
Dans l'ouvrage de 1956 [2], la théorie de la double solution est abordée vraiment seulement à partir du chapitre XVI, on peut lire en [2], p210 et 211 : "Etant donné une certaine équation de propagation valable dans un certain domaine de l'espace et admettant dans ce domaine une solution continue Ψ telle que

$$\Psi(x,y,z,t) = a(x,y,z,t)e^{\frac{2\pi i}{\hbar}\varphi(x,y,z,t)} \tag{1}$$

satisfaisant à certaines conditions aux limites, il existe une autre solution

$$u(x,y,z,t) = f(x,y,z,t)e^{\frac{2\pi i}{\hbar}\varphi(x,y,z,t)} \tag{2}$$

ayant la même phase $\varphi(x,y,z,t)$, obéissant aux mêmes conditions aux limites et dont l'amplitude présente une singularité en général mobile. Dans cette variante, l'amplitude de la solution régulière dépend explicitement du temps.

En appendice de cet ouvrage [2], p287-290, Louis de Broglie présente une autre présentation de la double solution s'appuyant sur les travaux de G. Petiau [3] qu'il résume ainsi : *"Si une équation d'ondes de la Mécanique ondulatoire admet deux solutions, l'une régulière, l'autre à singularité ponctuelle, possédant les mêmes lignes de courant, la singularité doit au cours du temps suivre les mêmes lignes de courant"*.
Nous allons nous restreindre ici à la méthode de résolution proposée par G. Petiau pour illustrer la mise en oeuvre de la théorie de la double solution dans le cas non-trivial d'une particule non-relativiste en mouvement dans un champ de force uniforme. Nous allons en donner une version plus développée, sans nouveaux résultats, mais dans une forme que l'on espère actualisée. Dans cette note, les équations et résultats sont repris de manière extensive avec les conventions de signe et les choix de fonctions utilisés les plus largement dans les ouvrages standards du domaine [5].

Au (2) nous développons les grandes lignes de la méthode exposée par G. Petiau qui permet d'obtenir l'ensemble des solutions, régulières

(1) et singulières (2), associées à la même phase, donc répondant par construction aux contraintes de “la formule du guidage”, dans un référentiel suivant le mouvement. Au (3) nous appliquons cette méthode au cas du mouvement sous un champ de force constant suivant une des directions de l’espace, cas pour lequel on peut trouver des solutions analytiques. Au (4) nous reprendrons cette étude et nous obtiendrons la forme correspondant aux solutions de ce problème telle qu’elle se trouve dans les ouvrages standards de mécanique quantique [5]. En conclusion au (5), on comparera les différentes formes obtenues et on discutera de la notion d’accord des phases.

2 Présentation des grandes étapes de la méthode de la double solution dans la version utilisée par G. Petiau [4, 3]

2.1 Equation de Schrödinger et paramétrisation de la fonction d’onde

L’équation d’onde de Schrödinger :

$$-\triangle\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} V\,\Psi = \frac{2im}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{3}$$

décrit le mouvement dans l’espace d’une particule de masse m soumise à l’action d’un potentiel $V(x,\,y,\,z)$ associé à une fonction d’onde $\Psi(x,\,y,\,z,\,t)$. A ce niveau très général, on peut rester en coordonnées cartésiennes. Suivant la méthode de Louis de Broglie, on écrit l’onde sous la forme :

$$\Psi(x,\,y,\,z,\,t) = a(x,\,y,\,z,\,t)\,e^{\frac{i}{\hbar}S(x,\,y,\,z,\,t)} \tag{4}$$

où les fonctions de cette paramétrisation non-linéaire $a(x,\,y,\,z,\,t)$ et $S(x,\,y,\,z,\,t)$ sont réelles et dépendent toutes deux du temps. Suivant l’usage de la formulation hydrodynamique de la mécanique quantique, on a coutume de dénommer $a(x,\,y,\,z,\,t)$ l’amplitude de l’onde et $S(x,\,y,\,z,\,t)$ l’action associée à l’onde. L’équation (3) conduit au système d’équations :

$$2m(\partial_t S + V) + \sum_{i=x,y,z}(\partial_i S)^2 - \hbar^2\frac{\triangle a}{a} = 0 \tag{5}$$

$$2m(\partial_t a) + 2\sum_{i=x,y,z}(\partial_i S)(\partial_i a) + (\triangle S)\,a = 0 \tag{6}$$

Traditionnellement on remarque que l'équation (5) est l'équation de Hamilton-Jacobi du problème classique modifiée par le potentiel quantique $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\triangle a}{a}$.
La méthode de résolution développée par G. Petiau est de nature variationnelle et emploie la méthode des caractéristiques [6], appliquée aux équations différentielles aux dérivées partielles linéaires du premier ordre, pour résoudre l'équation (6).

2.2 Première étape : choix de la forme paramétrique de $S(x, y, z, t)$ et résolution de l'équation (6)

Dans une première étape, on suppose que la forme de S est connue et on en donne une expression paramétrique. On considère alors l'équation (6) comme une équation aux dérivées partielles linéaire du premier ordre de la forme :

$$\sum_{m=1}^{m=N} P_m \frac{\partial u}{\partial x_m} = 0 \tag{7}$$

où $u(x, y, z, t)$ est l'intégrale première recherchée. Dans le cas présent $a(x, y, z, t)$ joue le rôle de $u(x, y, z, t)$ et les P_m sont les coefficients associés aux $\frac{\partial a}{\partial x_m}$. On peut trouver une solution de (7) par la méthode des courbes caractéristiques en résolvant le système d'équations :

$$\frac{dx_1}{P_1} = \frac{dx_2}{P_2} = ... = \frac{dx_N}{P_N} \tag{8}$$

Ici , c'est la version de la méthode où le membre de droite de (6)est obtenu par la mise sous forme implicite

$$2m(\partial_t a) + 2\sum_{i=x,y,z}(\partial_i S)(\partial_i a) = -(\triangle S)\, a$$

et les équations des courbes caractéristiques sont obtenues en résolvant les systèmes d'équations :

$$\frac{dt}{m} = \frac{dx}{\frac{\partial S}{\partial x}} = \frac{dy}{\frac{\partial S}{\partial y}} = \frac{dz}{\frac{\partial S}{\partial z}} = \frac{-2da}{(\triangle S)\, a} \tag{9}$$

Dans un premier temps, par simplicité, on privilégie avec G. Petiau, des fonctions $S(x, y, z, t)$ telles que :

$$\triangle S = 0 \tag{10}$$

et la solution de (6) s'obtient alors simplement puisque le système à résoudre a la forme d'un système d'équation d'un mouvement classique. Il suffit de déterminer 3 intégrales premières dépendant du temps, solution des équations différentielles simples contenues dans (9) :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}; \quad \frac{dy}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial y}; \quad \frac{dz}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial z} \tag{11}$$

soit donc l'équation des trajectoires :

$$\begin{aligned} x(t) = \varphi_1(t); \quad y(t) = \varphi_2(t); \quad z(t) = \varphi_3(t) \\ x_0 = \varphi_1(t_0); \quad y_0 = \varphi_2(t_0); \quad z_0 = \varphi_3(t_0) \end{aligned} \tag{12}$$

où on peut prendre $t_0 = 0$.
Les fonctions $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t)$, $\varphi_3(t)$ vérifient bien évidemment les équations :

$$\frac{d\varphi_1(t)}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}; \quad \frac{d\varphi_2(t)}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial y}; \quad \frac{d\varphi_3(t)}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial z} \tag{13}$$

On peut faire ressortir le caractère d'intégrales premières en introduisant les paramètres $(\lambda,\, \mu,\, \nu)$ qui suivent le mouvement et en réécrivant (12) sous la forme :

$$\lambda = x - \varphi_1(t); \quad \mu = y - \varphi_2(t); \quad \nu = z - \varphi_3(t) \tag{14}$$

Notons que la limite $(\lambda,\, \mu,\, \nu) \to (0,\, 0,\, 0)$ donne la trajectoire vérifiant les conditions (12). Cette trajectoire n'est pas nécessairement la trajectoire classique à laquelle on s'attend puisque la fonction $S(x,\, y,\, z,\, t)$ vérifiant (5 et 10) ne coïncide pas nécessairement avec l'action classique.

2.3 Seconde étape : nouvelle forme pour (5), choix des paramètres de $S(x, y, z, t)$ et recherche de $a(x, y, z, t)$

Les transformations précédentes ont réduit le problème à la recherche de :

$$a(x, y, z, t) = a(\lambda, \mu, \nu) = f_{arbitraire}(\lambda, \mu, \nu) \tag{15}$$

Le temps a disparu explicitement puisque chacune de ces solutions suit une des trajectoires. Elle est solution de l'équation différentielle aux dérivées partielles (5). Pour résoudre (5) on effectue le changement de variable (14) pour passer dans une description sur les coordonnées qui suivent le mouvement, obtenu par la méthode des caractéristiques, associé à la fonction $S(x,\, y,\, z,\, t)$ qui n'est généralement pas la fonction obtenue classiquement. Rappelons que l'on s'est placé dans le cas le plus simple où $\triangle S = 0$. Cette transformation est linéaire donc :

$$\triangle_{x,y,z} a(x,y,z,t) = \triangle_{\lambda,\mu,\nu} a(\lambda,\mu,\nu) \tag{16}$$

L'équation (5) dont les solutions seront les formes possibles pour $a(\lambda,\mu,\nu)$, régulières ou avec singularité en $(\lambda,\mu,\nu) \to (0,0,0)$, devient :

$$\hbar^2 \left[\frac{\partial^2 a}{\partial \lambda^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial \nu^2}\right] = \left[2m(\partial_t S + V) + \sum_{i=x,y,z} (\partial_i S)^2\right] a$$

soit :

$$\hbar^2 \left[\frac{\partial^2 a}{\partial \lambda^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial \mu^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial \nu^2}\right] - F(\lambda,\mu,\nu) a(\lambda,\mu,\nu) = 0 \tag{17}$$

Pour que cette réduction du problème ait un sens, il faut établir préalablement un ensemble de conditions qui déterminent la compatibilité de la forme des fonctions $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t)$, $\varphi_3(t)$ et de la fonction $S(x,y,z,t)$. Ces conditions s'obtiennent en remarquant que l'expression transformée en (λ,μ,ν) :

$$2m(\partial_t S + V) + \sum_{i=x,y,z} (\partial_i S)^2 = \Phi(\lambda,\mu,\nu,t) \to F(\lambda,\mu,\nu) \tag{18}$$

doit être indépendante de t pour décrire des solutions qui suivent le mouvement. On obtient $\Phi(\lambda,\mu,\nu,t)$ en opérant la substitution :

$$x = \lambda + \varphi_1(t); \quad y = \mu + \varphi_2(t); \quad z = \nu + \varphi_3(t)$$

et on vérifie la compatibilité du choix de la forme de $S(x,y,z,t)$ en vérifiant que l'on a bien $\frac{\partial \Phi(\lambda,\mu,\nu,t)}{\partial t} = 0$. Il est utile de remarquer que la fonction $S(x,y,z,t)$ est déterminée par un chemin différent que celui employé à l'ordinaire, ici on ne la choisit comme solution de l'équation de Hamilton-Jacobi, ici associée à l'équation (5) à la limite $\hbar \to 0$. De même on ne recherche pas une action réduite et que l'on ne résout pas un problème stationnaire.

Une fois déterminée la fonction $F(\lambda,\mu,\nu)$, on peut résoudre (18) et obtenir les fonctions $a(\lambda,\mu,\nu)$, ce qui pourra conduire à des fonctions régulières et/ou singulières. Les conditions aux limites à l'infini pourront induire un choix particulier de solutions et conduire à des règles

de quantification, la concordance entre les deux types de solutions étant garantie par la formule du guidage[4]. Le problème de la détermination de l'équation de Schrödinger par la méthode de la double solution est alors formellement résolu.
On peut en outre étudier les conditions qui permettent d'obtenir $F(\lambda, \mu, \nu) = 0$ et donc de retrouver des trajectoires correspondant à des trajectoires du problème classique original.

2.4 Remarque "onde -corpuscule" ou "onde régulière-onde singulière"

A ce stade, on peut faire une remarque sur la forme de la fonction $a(\lambda, \mu, \nu)$ qui reste encore à déterminer. Si l'on avait une solution parfaitement localisée en mouvement, donc une particule réduite à un point matériel, puisque $a^2(\lambda, \mu, \nu)$ est associée à la probabilité de présence de trouver la particule, on s'attendrait à pouvoir prendre $a^2(x, y, z, t)$ sous la forme :

$$a^2(\lambda, \mu, \nu) = \delta(\lambda, \mu, \nu) = \delta(x - x(t), y - y(t), z - z(t))$$

Et effectivement, si le mouvement était restreint à une dimension, on aurait toute latitude dans le choix de a, régulière ou singulière, résultat qui s'appuie sur le théorème de D'Alembert de la théorie des ondes. Dans les développements associés à la méthode de la double solution, on poursuit cette intuition en cherchant les solutions d'une équation des ondes qui est essentiellement à une seule dimension, car on restreint le mouvement à un problème de cordes vibrantes le long de chaque trajectoire en respectant les idées originelles de la mécanique ondulatoire [1]. Ce mouvement dans sa globalité doit se trouver dans un espace à trois dimensions pour décrire le lieu des mouvements de la particule. Et ce mouvement est celui associé à une fonction $S(x, y, z, t)$ qui obéit, comme on vient de le voir à l'équation de Hamilton-Jacobi (5) modifiée par le potentiel quantique $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\triangle a}{a} = F(\lambda, \mu, \nu)$.
Cependant on peut remarquer que dans les cas où $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\triangle a}{a} = 0$, $S(x, y, z, t) = S_{cl}(x, y, z, t)$ et on retrouve une expression de même forme que celle de l'action classique puisqu'elle obéit à la même équation de Hamilton-Jacobi ordinaire.

3 Application au mouvement d'une particule dont le mouvement est soumis à un champ de force constant suivant la dimension x et libre suivant y et z [3]

3.1 Équation de Schrödinger et paramétrisation de la fonction d'onde

Le potentiel est $V(x) = -kx$, l'équation d'onde de Schrödinger prend la forme[5] :

$$-\triangle\Psi - \frac{2mk}{\hbar^2} x\,\Psi = \frac{2im}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{19}$$

La forme du potentiel permet de rester en coordonnées cartésiennes et on écrit l'onde sous la forme (4) :

$$\Psi(x,y,z,t) = a(x,y,z,t)\, e^{\frac{i}{\hbar}S(x,y,z,t)}$$

où les fonctions $a(x,y,z,t)$ et $S(x,y,z,t)$ sont réelles et dépendent toutes deux du temps. L'équation (19) conduit au système d'équations [3, 5] :

$$2m(\partial_t S - kx) + \sum_{i=x,y,z} (\partial_i S)^2 - \hbar^2 \frac{\triangle a}{a} = 0 \tag{20}$$

$$2m(\partial_t a) + 2 \sum_{i=x,y,z} (\partial_i S)(\partial_i a) + (\triangle S)\, a = 0 \tag{21}$$

3.2 Choix de la forme paramétrique de $S(x,y,z,t)$ et résolution de l'équation (21)

La forme test retenue pour $S(x,y,z,t)$, avec $\triangle S = 0$, est

$$S(x,y,z,t) = S_0(t) - S_1(t)x - \beta y - \gamma z \tag{22}$$

$$\frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial t} = S_0^{'}(t) - S_1^{'}(t)x$$

$$\frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial x} = -S_1(t); \quad \frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial y} = -\beta; \quad \frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial z} = -\gamma$$

les équations couplées sont :

$$2m\left[S_0^{'}(t) - (S_1^{'}(t) + k)x\right] + S_1(t)^2 + \beta^2 + \gamma^2 - \hbar^2\frac{\triangle a}{a} = 0 \tag{23}$$

$$2m(\partial_t a) + 2 \sum_{i=x,y,z} (\partial_i S)(\partial_i a) = 0 \tag{24}$$

Les intégrales premières des équations caractéristiques de (21) peuvent s'écrire :

$$\lambda = x - \varphi(t); \quad \mu = y - \frac{\beta}{m}(t - t_0); \quad \nu = z - \frac{\gamma}{m}(t - t_0) \tag{25}$$

$$m\varphi'(t) = -S_1(t);\ \varphi(t_0) = x_0 \tag{26}$$

3.3 Nouvelle forme pour (20), choix des paramètres de $S(x, y, z, t)$

Le changement de variable (25) dans (20) conduit à :

$$2m \left[S_0^{'}(t) - (S_1^{'}(t) + k) (\lambda + \varphi(t)) \right] + S_1(t)^2 + \beta^2 + \gamma^2 - \hbar^2 \frac{\triangle a}{a} = 0 \tag{27}$$

soit

$$\hbar^2 \triangle_{\lambda,\mu,\nu} a(\lambda,\ \mu,\ \nu) + (A\lambda + B) a(\lambda,\ \mu,\ \nu) = 0 \tag{28}$$

et

$$F(\lambda,\ \mu,\ \nu) = -(A\lambda + B) \tag{29}$$

où

$$A = -2m \left[k + S_1^{'}(t) \right] \tag{30}$$

et

$$B = -2mS_0^{'}(t) + 2m(S_1^{'}(t) + k)\varphi(t) - S_1(t)^2 - \beta^2 - \gamma^2 \tag{31}$$

Les conditions de compatibilité ne sont remplies que si A et B sont des constantes par rapport au temps :

$$A' = S_1^{''}(t) = 0$$

et

$$B' = -2mS_0^{''}(t) - 2S_1^{'}(t)S_1(t) + 2mS_1^{''}(t)\varphi(t) + 2m(S_1^{'}(t) + k)\varphi^{'}(t) = 0$$

soit

$$2mS_0^{''}(t) = -2S_1^{'}(t)S_1(t) + 2mS_1^{''}(t)\varphi(t) + 2m(S_1^{'}(t) + k)\varphi^{'}(t)$$

$$2mS_0^{''}(t) = 2 \left[-2S_1^{'}(t) - k \right] S_1(t)$$

$$S_0^{''}(t) = \frac{1}{m} \left[-2S_1^{'}(t) - k \right] S_1(t)$$

On en déduit :

$$S_1'(t) = \alpha_0; \qquad A = -2m(k+\alpha_0) \qquad S_1(t) = \alpha_0 t + \alpha; \tag{32}$$

$$\varphi'(t) = -\frac{1}{m}\left(\alpha_0 t + \alpha\right); \tag{33}$$

et la trajectoire accélérée de la caractéristique suivant x est donnée par :

$$\varphi(t) = \frac{-1}{m}\left(\frac{1}{2}\alpha_0 t^2 + \alpha t\right) + x_0 \tag{34}$$

On calcule ensuite $S_0(t)$:

$$S_0''(t) = \frac{-(2\alpha_0+k)}{m}(\alpha_0 t+\alpha); \qquad S_0'(t) = \frac{-(2\alpha_0+k)}{m}(\frac{1}{2}\alpha_0 t^2+\alpha t+\alpha_1)$$

$$S_0(t) = \frac{-(2\alpha_0+k)}{m}(\frac{1}{6}\alpha_0 t^3 + \frac{1}{2}\alpha t^2 + \alpha_1 t + \alpha_2)$$

dans cette expression α_0, α , α_1, φ_0 et α_2 sont des constantes arbitraires et on peut prendre $\alpha_2 = 0$.
On obtient l'ensemble des expressions correspondant à la forme compatible cherchée :

$$S(x,y,z,t) = \frac{-(2\alpha_0+k)}{m}(\frac{1}{6}\alpha_0 t^3 + \frac{1}{2}\alpha t^2 + \alpha_1 t) - [\alpha_0 t + \alpha]\, x - \beta y - \gamma z \tag{35}$$

$$A = -2m(k+\alpha_0) \tag{36}$$

$$B = 2\alpha_1(2\alpha_0+k) + 2mx_0(\alpha_0+k) - \alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2 \tag{37}$$

3.4 Mouvement associé à $S(x,y,z,t)$ par la méthode de Hamilton-Jacobi et détermination complète des paramètres

Le mouvement suivant les axes des y et des z est rectiligne uniforme et on retrouve (25) :

$$\frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial y} = -\beta = -m\dot{y} \rightarrow y(t) = \frac{\beta}{m}t + y_0$$

$$\frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial z} = -\gamma = -m\dot{z} \rightarrow z(t) = \frac{\gamma}{m}t + z_0$$

Pour le mouvement suivant x :

$$\frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial x} = -\left[\alpha_0 t + \alpha\right] = -m\dot{x} \rightarrow x(t) = \frac{\alpha_0}{2m}t^2 + \frac{\alpha}{m}t + x_0$$

On retrouve aussi ce résultat en remarquant que le mouvement est conservatif d'énergie $E = \frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial t}$:

$$E = \frac{\partial S(x,y,z,t)}{\partial t} = \frac{-(2\alpha_0 + k)}{m}(\frac{1}{2}\alpha_0 t^2 + \alpha t + \alpha_1) - \alpha_0\, x$$

dont en déduit une autre expression de la trajectoire suivant l'axe des x :

$$x(t) = \frac{\alpha_0}{2m}\left(\frac{2\alpha_0 + k}{\alpha_0}\right)t^2 + \frac{\alpha}{m}\left(\frac{2\alpha_0 + k}{\alpha_0}\right)t + \frac{1}{\alpha_0}\left(\frac{(2\alpha_0 + k)\,\alpha_1}{m} - E\right)$$

et ces deux expressions coïncident si $2\alpha_0 + k = \alpha_0$ donc si $\alpha_0 = -k$ donc $A = 0$. En $t = 0$, $S(x,y,z,0) = -\alpha x - \beta y - \gamma z$ et $x(0) = \left(\frac{\alpha_1}{m} + \frac{E}{k}\right) = x_0$ soit $\alpha_1 = m(x_0 - \frac{E}{k})$.

3.5 Expressions vérifiant l'ensemble des contraintes définissant un mouvement

Ces contraintes nous conduisent finalement aux expressions suivantes pour la phase, les trajectoires associées et les grandeurs A et B :

$$S_1(t) = -kt + \alpha \tag{38}$$

$$S_0(t) = \frac{-k^2}{6m}t^3 + \frac{k\alpha}{2m}t^2 + (kx_0 - E)t \tag{39}$$

$$S(x,y,z,t) = \frac{-k^2}{6m}t^3 + \frac{k\alpha}{2m}t^2 + (kx_0 - E)t - \left[-kt + \alpha\right]x - \beta y - \gamma z \tag{40}$$

$$x(t) = \frac{-k}{2m}t^2 + \frac{\alpha}{m}t + x_0 \tag{41}$$

$$y(t) = \frac{\beta}{m}t + y_0 \tag{42}$$

$$z(t) = \frac{\gamma}{m}t + y_0 \tag{43}$$

$$A = 0 \tag{44}$$

$$B = 2m(E - kx_0) - (\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2) \tag{45}$$

où (x_0, y_0, z_0) et (α, β, γ) sont les positions et impulsions à l'instant initial $t = 0$ pour ce mouvement conservatif d'énergie totale E.

3.6 Lien avec les mouvements du problème classique associé

Pour s'assurer des liens de la démarche précédente avec le problème traité de manière classique, qui emploie traditionnellement [7] la paramétrisation $S(x,y,z,t) = Et - f(x) - \beta y - \gamma z$, on recherche la forme des solutions de l'équation de Hamilton-Jacobi classique avec la paramétrisation "$\Delta S = 0$" de G. Petiau :

$$S_c(x,y,z,t) = S_{c0}(t) - S_{c1}(t)x - \beta y - \gamma z$$

on obtient :

$$2m\left(S'_{c0}(t) - \left[S'_{c1}(t) + k\right] x\right) + S_{c1}(t)^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 0$$

Ceci se résout directement :

$$S_{c1}(t) = -kt + c_0$$

et

$$S'_{c0}(t) = \frac{-1}{2m}\left[(-kt + c_0)^2 + \beta^2 + \gamma^2\right]$$
$$S_{c0}(t) = \frac{-1}{2m}\left[\frac{k^2}{3}t^3 - kc_0t^2 + (c_0^2 + \beta^2 + \gamma^2)t + c_1\right]$$

Sans perte de généralité on peut prendre la constante d'intégration $c_1 = 0$ et finalement :

$$S_c(x,y,z,t) = \frac{-k^2}{6m}t^3 + \frac{kc_0}{2m}t^2 - \frac{(c_0^2 + \beta^2 + \gamma^2)}{2m}t - (-kt + c_0)\,x - \beta y - \gamma z$$

à comparer avec :

$$S(x,y,z,t) = \frac{-k^2}{6m}t^3 + \frac{k\alpha}{2m}t^2 + (kx_0 - E)t - [-kt + \alpha]\,x - \beta y - \gamma z$$

La coïncidence des expressions est vérifiée directement pour les premiers termes en t^3 et ceux en y et z. Elle suppose le choix $\alpha = c_0$ pour ceux en t^2, ce qui entraine la coïncidence des termes en x. Et les termes en t coïncident si

$$E - kx_0 = \frac{(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2)}{2m}$$

soit si $B = 2m(E - kx_0) - (\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2) = 0$.
Il s'ensuit que l'on trouve bien que pour une solution de type complètement classique le potentiel quantique est identiquement nul.

3.7 Potentiel quantique et amplitude de l'onde

Il faut maintenant chercher quelle est la forme à donner à l'amplitude de l'onde. Le potentiel quantique pour un champ de force uniforme est donné par l'expression

$$F(\lambda,\, \mu,\, \nu) = -(A\lambda + B)$$

L'amplitude de l'onde se calcule alors en résolvant l'équation (28) :

$$\hbar^2 \triangle_{\lambda,\mu,\nu} a(\lambda,\, \mu,\, \nu) + (B + A\lambda) a(\lambda,\, \mu,\, \nu) = 0 \tag{46}$$

qui possède la même forme que l'équation stationnaire associée à (19) dont on verra la résolution au (**4**). Pour résoudre les équations de cette forme, dans les cas où $A = 0$ discutés en (**3.5**) on peut définir des coordonnées sphériques [4, 3] où l'on choisit par commodité avec l'axe des x comme axe des z.

$$\lambda = \rho \cos\theta; \quad \mu = \rho \cos\varphi \sin\theta; \quad \nu = \rho \sin\varphi \sin\theta \tag{47}$$

alors on peut rechercher les solutions de (28) sous la forme standard [5] réelle :

$$\mathrm{a}(\lambda,\, \mu,\, \nu) = \phi(\rho) \mathrm{P}_\ell^m(cos\theta) \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases}$$

$$\frac{1}{\rho^2} \left\{ \frac{d}{d\rho} \left[\rho^2 \frac{d\phi(\rho)}{d\rho} \right] - \ell\,(\ell+1) \right\} + \frac{B}{\hbar^2} \phi(\rho) = 0$$

ou encore

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell\,(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{B}{\hbar^2} \right\} \phi(\rho) = 0 \tag{48}$$

3.8 Solutions régulières et singulières de l'équation (48) lorsque $A = 0$

3.8.1 Cas $B \neq 0$

L'équation (48) devient après le changement de variable $r = \rho\sqrt{B}/\hbar$:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell\,(\ell+1)}{r^2} + 1 \right\} \phi(r) = 0$$

équation différentielle dont les solutions sont les fonctions de Bessel sphériques ([8] p. 621-622).
Les solutions régulières sont les

$$j_n(r) = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} J_{n+1/2}(r) \tag{49}$$

et les solutions singulières à l'origine sont les

$$n_n(r) = (-1)^{n+1}\sqrt{\frac{\pi}{2r}}J_{-(n+1/2)}(r) \tag{50}$$

où les $J_\nu(r)$ sont les fonctions de Bessel ([8] p. 619)) que l'on peut exprimer aussi à l'aide des fonctions hypergéométriques confluentes : $J_\nu(r) = \frac{r^\nu e^{-ir}}{2^\nu \Gamma(\nu+1)} F(\nu + 1/2 \mid 2\nu + 1 \mid 2ir)$. L'amplitude de la solution de l'équation de Schrödinger peut s'exprimer ainsi :

$$a_B(\lambda, \mu, \nu) = \sum_{\ell,m} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\rho\sqrt{B}}} \left\{R_{\ell m} J_{(n+1/2)}(\rho\sqrt{B}/\hbar) + S_{\ell m} J_{-(n+1/2)}(\rho\sqrt{B}/\hbar)\right\}$$
$$\mathrm{P}_\ell^m \cos\theta \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases} \tag{51}$$

où les $R_{\ell m}$ et les $S_{\ell m}$ des coefficients. Les $S_{\ell m}$ sont, d'après la terminologie employée "les constantes de structure" du corpuscule lorsqu'il est décrit avec une superposition d' ondes singulières. Si on se se restreint aux cas "isotropes" $\ell = 0$, $m = 0$, la solution singulière pour $a_B(\rho)$ est :

$$f_{B00}(\rho) = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\rho\sqrt{B}}} J_{-1/2}\left(\frac{\rho\sqrt{B}}{\hbar}\right)$$

et on a [8], p. 622 :

$$f_{B00}(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \sqrt{\frac{\hbar}{\rho\sqrt{B}}} \cos\left(\frac{\rho\sqrt{B}}{\hbar}\right)$$

Ce qui correspond à des solutions où la singularité (une onde pas une particule) décrit l'ensemble des mouvements classiques tels que $x(t) = \frac{1}{2m}kt^2 + v_0 t + x_0$. Certes la forme de la particule évolue au cours du temps dans l'espace où se meut la singularité, mais ces modifications sont considérée secondaires par rapport à la perception d'un mouvement global, puisque l'essentiel de l'amplitude est localisée au voisinage de $\rho = 0$.

3.8.2 Cas $B = 0$

L'équation (48) devient :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{\ell\,(\ell+1)}{\rho^2} \right\} \phi(\rho) = 0 \tag{52}$$

soit l'équation radiale de Laplace en coordonnées sphériques dont les solutions sont ([8], p.1264) soit

$$\phi(\rho) = \rho^{\ell}$$

soit

$$\phi(\rho) = \rho^{-(\ell+1)}$$

Si on se se restreint aux cas “isotropes” $\ell = 0$, $m = 0$, la solution singulière à l'origine pour $a_{000}(\rho)$ est :

$$a_{000}(\rho) = \frac{C}{\rho}$$

3.8.3 Discussion sur la nature des solutions obtenues

Il est clair que $\rho^2 \left|a_{B00}(\rho)\right|^2 d\rho$ ou $\rho^2 \left|a_{000}(\rho)\right|^2 d\rho$ ne s'intègrent pas bien quand $\rho \to \infty$, ce qui n'est pas incompatible avec le fait que les fonctions $\phi(\rho)$ obtenues décrivent des fonctions d'onde du continuum et qu'il faut adopter une autre normalisation [5]. Si on laisse de côté cette question, on a bien obtenu la résolution de l'équation de Schrödinger avec des solutions qui représentent des singularités mobiles correspondant au mouvement classique que l'on attend avec un champ de force uniforme. Comment aborder l'ensemble des solutions ? La réponse est donnée par G. Petiau dans [3] de manière très concise, voire expéditive : *“Dans le cas général, on est ramené à l'équation $\hbar^2\Delta a - F(\lambda,\mu,\nu)a(\lambda,\mu,\nu) = 0$ qui au voisinage de $\lambda = \mu = \nu = 0$ admet la solution singulière (50) et qui pour les valeurs de λ, μ, ν suffisamment grandes admet la solution régulière à l'infini que considère la mécanique quantique”.* C'est certainement vrai puisque le procédé employé ici vise à mettre en relief les solutions à singularité. Les solutions régulières, l'autre terme de la théorie de la double solution, doivent permettre de retrouver les résultats obtenus par la résolution directe de l'équation de Schrödinger, sans paramétrisation “amplitude-phase, puisqu'elles sont mathématiquement équivalentes. Cette concordance “terme à terme” , même si elle est garantie, reste cependant à établir.

4 Les solutions ordinaires

4.1 Équation de Schrödinger et paramétrisation de la fonction d'onde

Le potentiel est $V(x) = -kx$ appelle à pratiquer par séparation des variables en coordonnées cartésiennes. L'équation d'onde de Schrödinger prend la forme :

$$-\triangle\Psi - \frac{2mk}{\hbar^2}x\,\Psi = \frac{2im}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{53}$$

On écrit l'onde sous la forme :

$$\Psi(x,y,z,t) = a^*(x)\,e^{\frac{i}{\hbar}(-Et-\beta y-\gamma z)} \tag{54}$$

qui explicite le caractère conservatif des solutions, On va suivre la méthode indiquée dans [5], p. 93-95.

4.2 Résolution de l'équation (53)

L'équation 53 devient :

$$\left[\frac{-1}{a^*(x)}\left(\frac{d^2a^*(x)}{dx^2}\right) + \frac{\beta^2+\gamma^2}{\hbar^2}\right]\Psi - \frac{2mk}{\hbar^2}x\,\Psi = \frac{+2mE}{\hbar^2}\Psi$$

en notant $E - \frac{\beta^2+\gamma^2}{2m} = \varepsilon$

$$\left(\frac{d^2a^*(x)}{dx^2}\right) + \frac{2mk}{\hbar^2}\left[x+\frac{\varepsilon}{k}\right]a^*(x) = 0$$

qui possède la même structure que l'équation (46) réécrite avec $B' = B + \beta^2 + \gamma^2$ en se limitant à $a'(\lambda)$ la partie de la fonction ne dépendant que de λ :

$$\frac{\partial^2 a'}{\partial\lambda^2} + \frac{A}{\hbar^2}(\lambda + \frac{B'}{A})a' = 0 \tag{55}$$

Les solutions régulières sont alors

$$a^*(x) = \mathscr{A}\Phi\left(-\left(x+\frac{\varepsilon}{k}\right)\left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}\right)$$

où $\Phi(x)$ est une fonction d'Airy et $\mathscr{A}$ un facteur de normalisation pour les fonctions propres du spectre continu. De même on aura

$$a'(\lambda) = \mathscr{C}\Phi\left(-(\lambda+\frac{B'}{A})\left(\frac{A}{\hbar^2}\right)^{1/3}\right)$$

Les fonctions d'Airy s'expriment avec des fonctions de Bessel d'ordre 1/3 . Ce choix ne conduit pas à une décomposition phase-amplitude évidente pour $\Psi(x, y, z, t)$, il faut adopter une autre approche.

4.3 Résolution de l'équation (53) en représentation "p" partielle

On écrit l'onde sous la forme :

$$\Phi(p, y, z, t) = b(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}(-Et-\beta y-\gamma z)} \tag{56}$$

L'équation 53 se réécrit :

$$-i\hbar k \frac{db(p)}{dp} + \left(\frac{p^2}{2m} - \varepsilon\right) b(p) = 0$$

dont les solutions sont :

$$b(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar k}} e^{\frac{i}{\hbar k}\left(\frac{p^3}{6m}-\varepsilon p\right)}$$

et une forme possible pour $a^*(x)$ est alors :

$$a^*(x) = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{k}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(-px+\frac{p^3}{6mk}-\varepsilon\frac{p}{k}\right)}$$

et la même procédure est applicable à la représentation “p” de l'équation (55)

$$a'(\lambda) = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{k}} e^{\frac{i}{\hbar}\left(-p\lambda+\frac{p^3}{6mk}-\varepsilon\frac{p}{k}\right)}$$

5 Lien entre les différentes représentations des solutions régulières et singulières

Pour les solutions régulières, le lien explicite entre les deux formulations, celle dépendante dépendante du temps et la formulation standard reste à faire, il ne sera pas abordé dans cette note. On rappelle que la phase des solutions régulières et singulières obtenues par la méthode phase-amplitude est (35)

$$S(x, y, z, t) = \frac{-(2\alpha_0 + k)}{m}(\frac{1}{6}\alpha_0 t^3 + \frac{1}{2}\alpha t^2 + \alpha_1 t) - [\alpha_0 t + \alpha]\, x - \beta y - \gamma z$$

conduisant à (36) et (37)

$$A = -2m(k+\alpha_0)\ ;\ B = 2\alpha_1(2\alpha_0+k) + 2mx_0(\alpha_0+k) - \alpha^2 - \beta^2 - \gamma^2$$

où les paramètres α_0, α et α_1 ne sont pas contraints *a-priori* même si l'on peut supposer qu'à la fin des calculs on ne s'écartera pas radicalement des valeurs liées à la compatibilité de ces paramètres avec des mouvements ainsi que cela a été établi au (**3.5**). Mais encore faut-il le démontrer.
La forme déterminée pour $S(x,y,z,t)$ ne correspond de manière évidente ni à la phase sous la forme de (54)

$$S^*(x,y,z,t) = -Et - \beta y - \gamma z$$

de la représentation "q", ni à la phase sous la forme de (56)

$$S^*(x,y,z,t) = -Et - px - \beta y - \gamma z + \frac{p^3}{6mk} + \left(-E + \frac{\beta^2+\gamma^2}{2m}\right)\frac{p}{k}$$

de la représentation "p". Cela indique que les solutions régulières obtenues par une des méthodes s'exprimeront comme des combinaisons linéaires de celles obtenues par une des deux autres méthodes.
On pourraît aussi chercher des solutions singulières de (55) directement à partir des solutions de l'équation d'Airy qui possède des solutions régulières et singulières qui s'obtiennent aussi en combinant des fonctions de Bessel régulières et singulières d'ordre $\pm 1/3$. Ce travail techniquement exigeant reste à faire. Le raccord entre les solutions stationnaires et les solutions en mouvement restera aussi peu immédiat.

6 Conclusion

On a repris, sous forme très explicite et développée, les calculs proposés par Gérard Petiau , avec le problème analytique mais non trivial du mouvement dans un champ de force uniforme, pour illustrer la manière dont on peut faire fonctionner la méthode de la double solution. Celle-ci est capable d'engendrer à la fois des solutions régulières mais aussi des solutions singulières où la singularité suit les trajectoires d'un (et parfois du) problème classique associé au problème quantique. Le problème du mouvement de type classique des singularités est trouvé sans avoir besoin d'effectuer l'opération de passage à la limite $\hbar \to 0$. Sur cet exemple, il est remarquable de constater que lorsque $B = 0$, donc le cas des mouvements purement classiques, seules les solutions singulières peuvent être définies, les solutions régulières divergeant fortement

lorsque l'on s'éloigne de l'origine des coordonnées mobiles. On a montré aussi que la condition d'accord des phases qui est immédiate, puisque structurelle, entre les solutions régulières et singulières est beaucoup plus difficile à expliciter entre ces solutions et les solutions ordinaires. Cette étude montre ou rappelle que l'on sait aborder avec succès d'autres cas que celui du mouvement libre avec la méthode de la double solution. Pour faire progresser la théorie, qui est basée sur le mouvement d'une particule dans l'espace physique $\mathbb{R}^3$, un système dynamique naturel au sens de L.A. Pars [7], il est nécessaire d'étudier la manière dont on retrouve les solutions obtenues par la mécanique quantique pour des mouvements de systèmes mécaniques, au sens Lagrangien [7], donc dans des espaces de dimension quelconque.
La méthode de la double solution utilisée ici est une illustration de la souplesse dont on dispose en cherchant les solutions des équations des ondes, mais tant qu'elle demeure comme ici dans le cadre de l'équation de Schrödinger elle ne permettra pas de dépasser ce cadre et d'établir un lien, meilleur que celui dont on dispose, entre mécanique classique et mécanique quantique. Les solutions à singularité mobiles des équations des ondes sont un point de départ qui semble crucial puisqu'elles permettent une description en ondes tout en privilégiant une région de l'espace restreinte. On peut la connecter avec une non-linéarité "régularisant" la singularité [2] ou un terme source et chercher alors des modèles en amont des équations de Schrödinger, de Klein-Gordon ou de Dirac. En tout état de cause, il nous manque un exemple analytique convaincant qui puisse servir de "pierre de Rosette" entre la méthode de résolution par la double solution et la méthode de résolution standard de la mécanique quantique et qui puisse aussi assurer la connection vers la théorie quantique des champs.

Références

[1] Louis de Broglie, J. Phys. Radium **8**, 225 (1927)

[2] Louis de Broglie, Une tentative d'interprétation causale et non linéaire de la mécanique ondulatoire (la théorie de la double solution) Gauthier-Villars, Paris (1956)

[3] G. Petiau, Comptes Rendus, **239**, 344 (1954)

[4] G. Petiau, Séminaire Louis de Broglie. Théories physiques, **24**, exp. n°18, 1-13 (1954-1955)

[5] L. Landau, E. Lifchitz, Physique Théorique : Tome III. Mécanique quantique, Théorie non-relativiste, Editions Mir, Moscou (1967)

[6] William H. Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation New York NY : John Wiley & Sons (1973)

[7] L.A. Pars, A treatise on analytical dynamics, OX BOW Press (1979)

[8] Ph. Morse, H. Feschbach, Methods of Theoretical Physics, Mc Graw-Hill Book Compagny (1953)