

Trajectoires quantiques - Trajectoires de Newton

Deuxième partie

(Le seuil de potentiel)

MICHEL LARINI

Professeur émérite

Aix-Marseille Université, email: m.larini@sfr.fr

RÉSUMÉ. Dans cet article on reprend la démarche, développée dans la première partie, consacrée aux trajectoires d'une particule quantique dans la boîte [1], et on s'intéresse cette fois au parcours, 1D, d'une particule quantique d'énergie totale E_0 déposée au temps $t = 0$ au point X_0 et se dirigeant vers un seuil de potentiel de niveau ES . On se limite au cas où $E_0 > ES$. Cette démarche originale permet de calculer la trajectoire de la particule en partant de l'équation de Schrödinger stationnaire.

On part de l'équation de Schrödinger stationnaire et on détermine les densités de probabilité puis, avec une approche originale, les trajectoires incidentes de la particule quantique.

On montre ensuite qu'il est possible d'expliquer la nature des trajectoires incidentes de la particule « quantique » par l'existence d'une force quantique $F_q(x)$.

Par la suite, on applique la loi de Newton à la particule quantique soumise à la force quantique $F_q(x)$. On constate, comme dans la référence [1], que les trajectoires incidentes obtenues, dites trajectoires de Newton, sont identiques aux trajectoires quantiques calculées précédemment. Ainsi la particule quantique se comporte comme une particule classique obéissant à la loi de Newton mais évoluant dans le champs de force quantique $F_q(x)$.

Enfin, on s'intéresse à l'influence qu'aurait la masse de la particule quantique sur les trajectoires obtenues à partir de l'équation de Schrödinger. On constate que lorsque sa masse augmente, toutes choses égales par ailleurs, elles finissent par se confondre avec les trajectoires rectilignes qu'aurait une particule classique, placée dans les mêmes conditions, et soumise à la loi de Newton.

Ce qui précède interroge : existe-t-il vraiment deux mondes le monde quantique régi par l'équation de Schrödinger et le monde classique régi par la loi de Newton ?

1 Introduction

On s'intéresse au parcours incident, 1D, d'une particule quantique d'énergie totale E_0 déposée en un point X_0 à l'instant $t=0$ et se dirigeant vers un seuil de potentiel ES . Pour cela, on utilise une démarche originale introduite dans la référence [1]. On se limite au cas $E_0 > ES$ et, sauf si spécifié, la particule quantique a la masse d'un électron.

Dans le paragraphe 2 on pose le problème et à partir de l'équation de Schrödinger 1D stationnaire on rappelle le calcul des fonctions d'ondes.

Dans le paragraphe 3 on calcule la densité de probabilité pour un parcours de la particule entre le point X_0 et le seuil de potentiel.

Dans les paragraphes 4 puis 5, à partir de l'approche introduite dans la référence [1] on calcule les trajectoires quantiques, puis les trajectoire quantiques « relatives ».

Dans le paragraphe 6 on montre l'existence d'une force quantique $F_q(x)$ engendrée par l'interaction entre la particule et le seuil de potentiel.

Dans le paragraphe 7, on s'intéresse à l'influence qu'aurait la masse de la particule quantique sur ses trajectoires en utilisant la même démarche que dans le paragraphe 4.

Dans le paragraphe 8, on applique la deuxième loi de Newton à un électron soumis à la force quantique $F_q(x)$, mise en évidence dans le paragraphe 6, et on compare les trajectoires quantiques, obtenues dans le paragraphe 3, aux trajectoires obtenues et dites trajectoires de de Newton.

Compte tenu de ce qui précède, avant de conclure on s'interroge sur l'existence du monde quantique, pour l'infiniment petit, et du monde classique, pour les particules « massives ».

2 Equation de Schrödinger stationnaire - Les fonctions d'onde

Une particule quantique de masse m est déposée, en X_0 à l'instant $t=0$, dans une zone où le potentiel est nul. Elle se déplace vers un seuil de potentiel ES (Figure 1).

$m = 9.11.10^{-31}$ (masse de l'électron)

$\hbar = h/2\pi = 6.6210 \times 10^{-34}$ (h constante de Planck)

X_0 = position de la particule déposée à $t=0$

E_0 = Energie totale de la particule

ES= Potentiel (énergie potentiel du seuil)

$V0 = \sqrt{\frac{2E0}{m}}$ (vitesse de la particule « classique »)

$Ti = \frac{|X0|}{V0}$ (durée du parcours incident d'une particule « classique »)

Remarque:

On parlera de particule « quantique » pour une particule ayant un comportement décrit à partir de l'équation de Schrödinger. On parlera de particule « classique » pour une particule identique, placée dans les mêmes conditions, mais ayant un comportement classique c'est-à-dire obéissant à la loi de Newton.

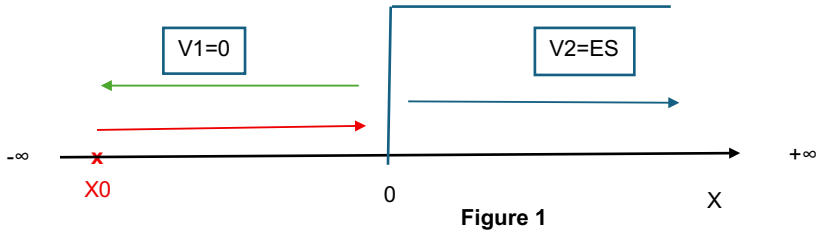


Figure 1:

Soit les deux domaines , 1 pour $X < 0$ et 2 pour $X > 0$, où l'équation de Schrödinger s'écrit respectivement :

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0 \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE0}{\hbar^2}} \quad (1)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) = 0 \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E0 - ES)}{\hbar^2}} \quad (2)$$

Avec les conditions aux limites : $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ et $\frac{d\psi_1}{dx}(0) = \frac{d\psi_2}{dx}(0)$

Les solutions générales de (1) et (2) sont :

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \quad \text{et} \quad \psi_2(x) = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x} \quad (3)$$

Les conditions aux limites imposent :

$$B_2 = 0 \quad ; \quad B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1 \quad ; \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1$$

$B_2 = 0$ car $\psi_2(x)$ est une onde uniquement progressive qui ne rencontre aucun obstacle.

3 Les densités de probabilité le long du parcours incident

Le parcours incident s'effectue entre X_0 et 0.

On définit : $\omega(x) = \|\psi_1(x)\psi_1^*(x)\|$

Soit : $\omega(x) = A_1^2(1 + A^2 + 2A\cos(2k_1x))$ avec : $A = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$

Pour que la fonction $\omega(x)$ soit une densité de probabilité il faut la normer sur le parcours allant de X_0 à $X=0$. En effet, lors du trajet incident la probabilité de trouver la particule entre X_0 et 0 est égale à

1. Ainsi : $\int_{X_0}^0 \omega(x) dx = 1$

Cette condition impose :

$$A_1^2 = B_0 = \frac{-1}{(1 + A^2) X_0 + \frac{A}{k_1} \sin(2k_1 X_0)} \quad (4)$$

La densité de probabilité incidente s'écrit alors:

$$P_{Ni}(x) = B_0(1 + A^2 + 2A\cos(2k_1x)) \quad (5)$$

Remarque :

Si $X_0 \rightarrow -\infty$ alors $B_0 \rightarrow 0$ et $P_{Ni}(x) \rightarrow 0$.

Ce résultat est cohérent car la probabilité de trouver la particule en un point x sur une distance infinie est forcément nulle. D'où l'obligation de travailler avec X_0 fini.

Résultats :

Ci-dessous, sur la figures 2, nous avons représenté la densité de probabilité en fonction de l'abscisse x , pour différentes valeurs du seuil ES . La particule est déposée à $t=0$ au point $X_0 = -2 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ avec une énergie totale $E_0 = \frac{1}{2} m V_0^2$ et $V_0 = 100 \text{ m/s}$.

Commentaires :

Pour $ES=0.01$ E_0 (vert) la densité de probabilité est presque constante autour de la valeur 50 000. Ainsi si ES tend vers 0 la densité de probabilité devient constante et cela nous indique que la vitesse de la particule reste constante et égale à V_0 .

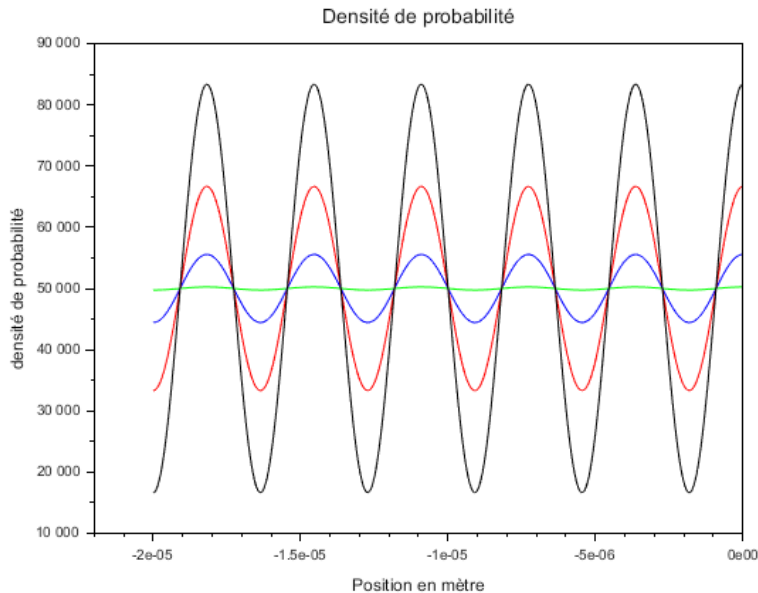


Figure 2: ES=0.01 E0 (vert) ; ES= 0.2 E0 (bleu); ES=0.5 E0 (rouge) ; ES=0.8 E0 (noir)

Si ES augmente l'amplitude des oscillations augmente et les minima diminuent. La longueur d'onde reste la même et on n'observe pas de déphasage.

4 Les trajectoires quantiques incidentes

Pour déterminer les trajectoires incidentes, à partir de l'équation de Schrödinger stationnaire, on utilise la même démarche que celle développée dans la première partie [1]. Pour cela, on suppose que la particule a une trajectoire $x(t_p)$ (ou $t_p(x)$) (figure 3).

Si $PN(x)$ est la densité de probabilité de la particule, au point x , on peut exprimer la probabilité élémentaire de trouver la particule sur la

trajectoire au point x à dx près :

$$dP = PN(x)dx \quad (6)$$

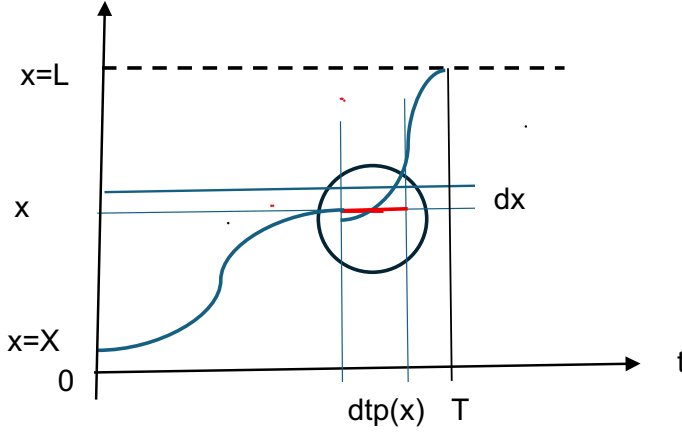


Figure 3:

Mais nous proposons une autre façon d'exprimer la probabilité dP :

$$dP = \frac{dtp(x)}{Ti} \quad (7)$$

C'est le rapport du temps $dtp(x)$ que la particule passe dans la tranche dx divisé par la durée totale Ti de son parcours incident entre $x= X0$ et $x=L$

$$(6) \text{ et } (7) \Rightarrow \frac{dtp(x)}{Ti} = PN(x) .dx \quad (8)$$

L'équation (8) joue un rôle fondamental, elle assure le lien entre l'évolution spatiale de la densité de probabilité et l'évolution temporelle de la position de la particule quantique.

$$(8) \Rightarrow \frac{dx}{dtp(x)} = \frac{1}{Ti PN(x)} = Vp(x) \quad (9)$$

C'est le rapport de la distance dx parcourue pendant la durée $dtp(x)$, c'est donc la vitesse $Vp(x)$ de la particule au point x . On peut alors

calculer l'énergie cinétique $Ec(x)$ de la particule en chaque point x de la trajectoire incidente :

$$Ec(x) = \frac{1}{2}mVp^2(x) \quad (10)$$

Dans [1] on a montré que Ti est égal au temps que mettrait la particule à effectuer le parcours incident si elle se comportait comme une particule « classique » soit :

$$Ti = \frac{|X0|}{V0} \quad (11)$$

L'équation de la trajectoire est obtenue en intégrant l'équation (8) entre $X0$ et x compte tenu de (5).

Il vient :

$$tp(x) = \frac{|X0|}{V0} B0 \left((1 + A^2) (x - X0) + \frac{A}{k_1} (\sin(2k_1 x) - \sin(2k_1 X0)) \right) \quad (12)$$

(12) nous indique l'instant $tp(x)$ où la particule se trouve au point de coordonnée x . C'est bien l'équation de la trajectoire de la particule quantique.

Résultats :

Sur la figure 4 on a représenté les trajectoires pour 3 valeurs de la position initiale de la particule $X0$ ($1 \cdot 10^{-5}$; $0.7 \cdot 10^{-5}$; $0.4 \cdot 10^{-5}$) et pour 4 valeurs de ES .

L'énergie totale de la particule est $E0 = \frac{1}{2}mV0^2$ avec $V0 = 100$ m/s.

Les trajectoires quantiques s'enroulent autour d'une droite et on peut vérifier que cette droite est la trajectoire rectiligne de la particule classique de pente $V0$. Ainsi la durée de tous les trajets incidents est bien égale au temps de parcours de référence Ti (11).

Cela valide, à postériori, le choix qui avait été fait pour le temps de parcours de référence (11). De plus, les résultats sont conformes à ce qui est communément admis, à savoir que : « si le niveau quantique n est élevé le mouvement de la particule quantique doit être approximativement identique à celui qui découle de la mécanique classique » [2]. C'est aussi ce que prédisent les calculs dans la référence [7] où le nombre quantique est élevé.

Pour $ES=0.01$ la trajectoire est rectiligne à l'échelle de la représentation. Ce cas est représentatif de l'absence de seuil et la particule se comporte comme une particule classique libre qui se déplace à la vitesse constante V_0 .

Plus ES s'approche de E_0 et plus l'amplitude des oscillations augmente et plus les pentes aux nœuds se raidissent.

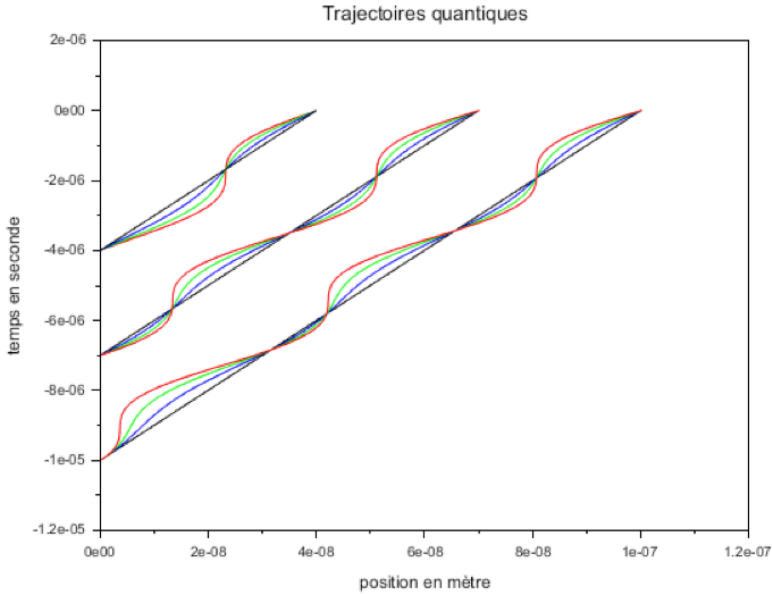


Figure 4: $ES=0.01$ E_0 (noir); $ES=0.5$ E_0 (bleu); $ES=0.8$ E_0 (vert); $ES=0.99$ E_0 (rouge)

5 Trajectoires « relatives » dans le repère lié à la particule classique

Nous venons de voir que la particule quantique oscillait autour d'une droite qui est la trajectoire d'une particule identique ayant un comportement classique et placée dans les mêmes conditions.

Nous nous intéressons, à présent, au mouvement relatif de la particule quantique par rapport à un repère lié à la particule classique. Sur la figure 5, on peut observer ce mouvement par rapport au repère relatif pour 4 valeurs de l'énergie du seuil.

La particule est placée à $t=0$ en $X_0 = -10^{-5}$ m avec une énergie totale $E_0 = \frac{1}{2}mV_0^2$ pour $V_0 = 100$ m/s.

Lorsque ES est voisin de zéro la particule quantique est immobile dans le repère relatif, elle se déplace donc à la vitesse V_0 par rapport au repère absolu. L'amplitude des oscillations augmente avec l'intensité de ES.

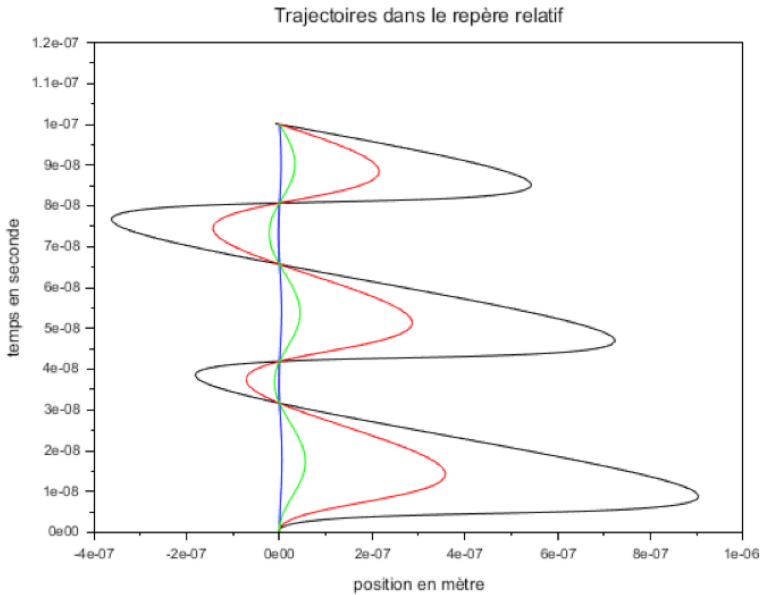


Figure 5: ES=0.01 E_0 (bleu); ES=0.1 E_0 (vert); ES=0.5 E_0 (rouge); ES=0.99 E_0 (bleu)

6 La force quantique

L'énergie cinétique de la particule quantique évolue en fonction de x (10), si l'on raisonne de façon classique cela signifie que la particule est soumise à une force $Fq(x)$ telle que « la variation d'énergie cinétique est égale au travail de la force appliquée »

$$\text{soit: } dEc(x) = dW = Fq(x).dx \Rightarrow Fq(x) = \frac{dEc}{dx} \quad (13)$$

A partir de (9) , (11) , (12) et (13) on calcule :

$$Ec(x) = \frac{mV_0^2}{2 X_0^2 B_0^2} \frac{1}{(1 + A^2 + 2A \cos(2k_1 x))^2} \quad (14)$$

$$Fq(x) = \left(\frac{4 m k_1 A V_0^2}{X_0^2 B_0^2} \right) \frac{\sin(2k_1 x)}{(1 + A^2 + 2A \cos(2k_1 x))^3} \quad (15)$$

Résultats :

Dans les cas présentés la particule est placée en $X_0 = -10^{-5}$ m avec une énergie totale $E_0 = \frac{1}{2} m V_0^2$ pour $V_0 = 100$ m/s.

Commentaires :

Le cas $ES = 0.01 E_0$ est représentatif de la situation « sans seuil ». Dans ce cas la force quantique est quasi nulle. Ce résultat est cohérent avec celui des figure 4 et 5 où la vitesse reste sensiblement constante et égale à V_0 . Cela suggère que la particule n'est soumise à aucune force .

Dans les autres cas la force quantique oscille, autour de zéro, avec la même longueur d'onde que les trajectoires (figure 4) et que la densité de probabilité (figure 2) . Quand ES augmente l'amplitude des oscillations grandit comme pour la densité de probabilité et l'amplitude des trajectoires. Mais dans tous les cas la force quantique Fq est nulle au seuil en $x=0$.

7 Trajectoires incidentes des particules « massives »

A présent nous posons la question : « l'équation de Schrödinger peut-elle décrire le comportement d'une particule classique ? ».

Pour cela, on s'intéresse à l'influence qu'aurait la masse de la particule sur les trajectoires quantiques obtenue dans le paragraphe 4..

Sur la figure 7, avec :

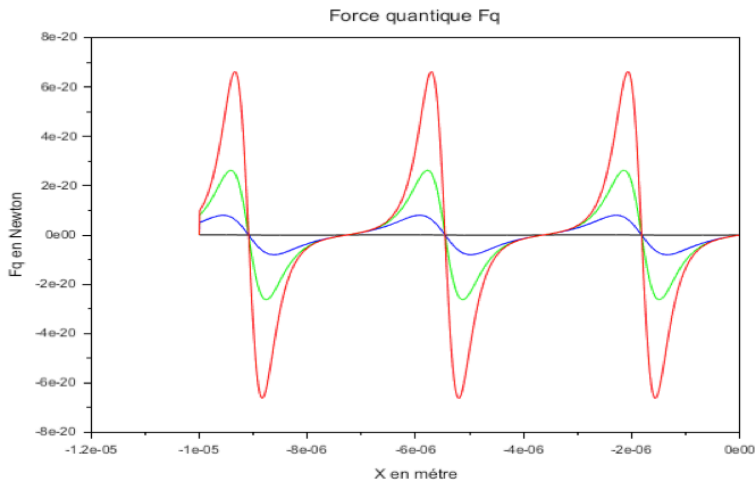


Figure 6: $ES=0.01 E_0$ (noir), $ES=0.5 E_0$ (bleu), $ES=0.7 E_0$ (vert), $ES=0.8 E_0$ (rouge)

$X_0=10^{-5}$ m; $V_0=100$ m/s ; $E_0=1/meV^2$; $ES=0.9 E_0$; $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg (masse de l'électron), nous avons représenté les trajectoires pour 4 valeurs croissantes de la masse de la particule.

Commentaires :

On constate, sur la figure 7, que si la masse m augmente, à l'échelle de l'observation, la trajectoire « quantique » tend vers une trajectoire rectiligne. Une autre façon de dire est : « si m augmente l'effet quantique, du à la force quantique $Fq(x)$, minue et finit par disparaître ».

Ainsi pour la particule massive (m grand) on retrouve la trajectoire classique d'une particule posée en X_0 à $t=0$.

Sur la figure 8 on a représenté pour une particule massive, $m=2000 m_e$, les trajectoires quantiques d'une particule déposée à l'instant $t=0$ au point $X_0=-10^{-5}m$ pour trois vitesse V_0 et pour $ES=0.9 E_0$

Commentaires :

Dans tous les cas, sur la figure 8 les trajectoires sont rectilignes, comme des trajectoires classiques, et de plus les pentes des trajectoires

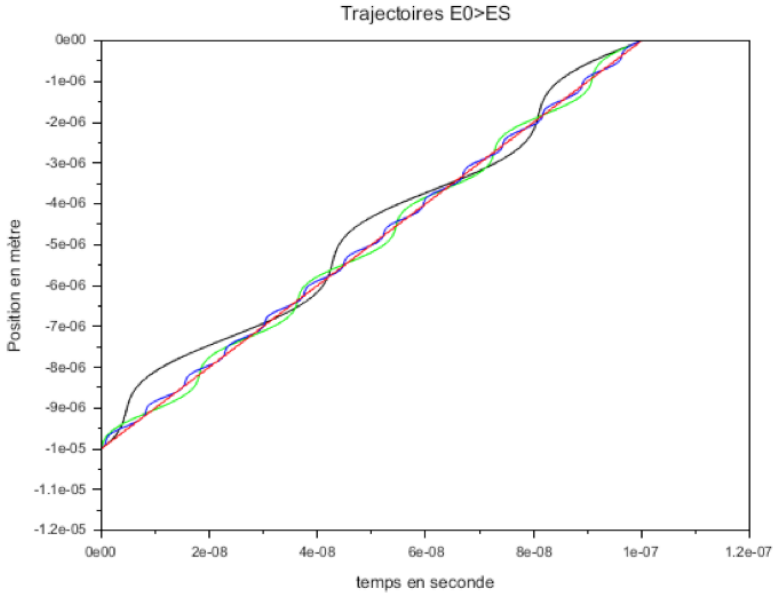


Figure 7: $m=me$ (noir); $m=4 me$ (vert); $m=25 me$ (bleu); $m=2000 me$ (rouge)

sont bien égales à V_0 . .

L'ensemble des résultats (figure 7 et figure 8) sont confirmés analytiquement :

En effet si $m \rightarrow \infty$, $B_0 \rightarrow \frac{-1}{(1+A^2)X_0}$ et donc (12) $\Rightarrow tp(x) = \frac{x-X_0}{V_0}$

On constate qu'avec notre démarche, bâtie à partir de l'équation de Schrödinger, les trajectoires des particules massives sont identiques aux trajectoires classiques qui auraient été obtenues à partir de la deuxième loi de Newton soit : $x = V_0 t + X_0$.

Ainsi l'équation de Schrödinger permet de décrire le comportement de particules classiques massives.

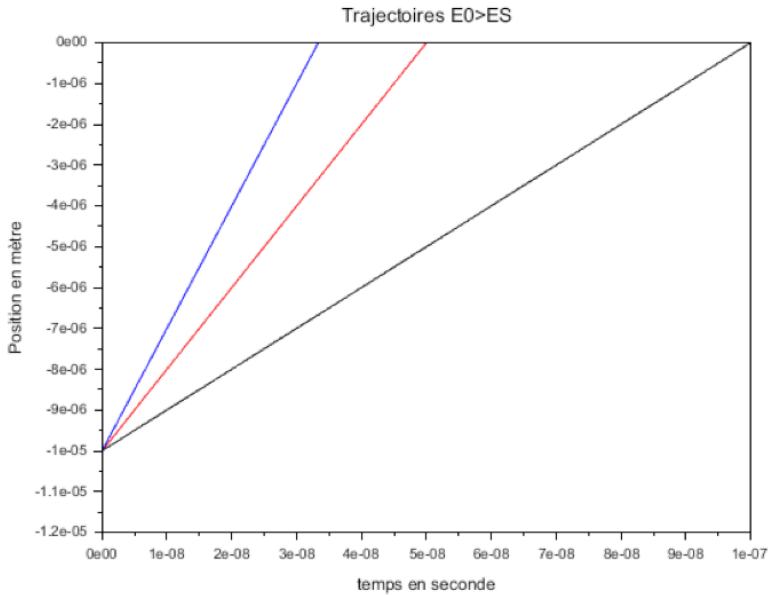


Figure 8: $V_0 = 100$ m/s (noir); $V_0 = 200$ m/s (rouge); $V_0 = 300$ m/s (bleu)

8 Trajectoires de Newton

Dans le paragraphe 4, nous avons établi l'existence de trajectoires que nous qualifierons de « quantiques » (figure 4).

Dans le paragraphe 6, nous avons montré qu'il existait un champ de force $Fq(x)$ tout au long du parcours incident .

A présent, comme pour la référence [1], on se pose la question suivante :

« Quelle serait la trajectoire $XN(t)$ de notre particule si elle se déplaçait dans le champs de force quantique $Fq(x)$ en obéissant à la deuxième loi de Newton ? »

Dans ce cas la trajectoire $XN(t)$ serait solution de l'équation :

$$m \frac{d^2 XN(t)}{dt^2} = Fq(XN(t)) \quad (16)$$

L'équation (16) est résolue très simplement en discrétisant la dérivée seconde avec un schéma explicite:

$$\text{Il vient : } XN(t+dt) = Fq(XN(t)) \frac{dt^2}{m} + 2XN(t) - XN(t-dt) \quad (17)$$

Avec les deux conditions :

$$XN(0) = x_0 \text{ et } XN(dt) = x_0 + Vp(x_0) \times dt \quad (18)$$

$Vp(x_0)$ est calculé à partir de l'équation (11). Avec ces deux conditions la particule est placée à $t=0$ dans la même situation que pour les trajectoires « quantiques » du paragraphe 3. Ainsi les deux trajectoires peuvent être comparées.

Résultats:

Pour la figure 9 avec $X_0 = -10^{-5}$ m, $V_0 = 100$ m/s et $m = 9.1110 \cdot 10^{-31}$ (masse de l'électron) nous avons représenté pour $ES = 0.01 E_0$ et $ES = 0.9 E_0$ les trajectoires de Newton (16) et les trajectoires quantiques (12).

Le constat est sans appel : « *Les trajectoires quantiques et les trajectoires de Newton sont confondues* »

9 Conclusion

Les résultats obtenus dans le présent travail viennent confirmer ceux obtenus dans la première partie qui était consacrée au comportement de la particule quantique dans la boîte à partir de l'équation de Schrödinger stationnaire [1].

Les résultats de la première partie [1] et ceux du présent travail, tous deux, obtenus à partir d'une démarche originale qui permet de calculer des trajectoires à partir de l'équation de Schrödinger stationnaire nous amène à nous interroger et en particulier: Existe-t-il deux mondes, celui de l'infiniment petit régi par l'équation de Schrödinger et le monde macroscopique régit par la loi de Newton ? L'ensemble des résultats obtenus montrent que les choses ne sont pas aussi simples.

En effet, d'une part, nous avons pu constater que l'équation de Schrödinger et l'équation (8) permettent de décrire les trajectoires des particules quantiques (12) mais aussi des particules classiques massives (paragraphe 7).

D'autre part, toujours en s'appuyant sur l'équation de Schrödinger et l'équation (8), des considérations énergétiques mettent en évidence

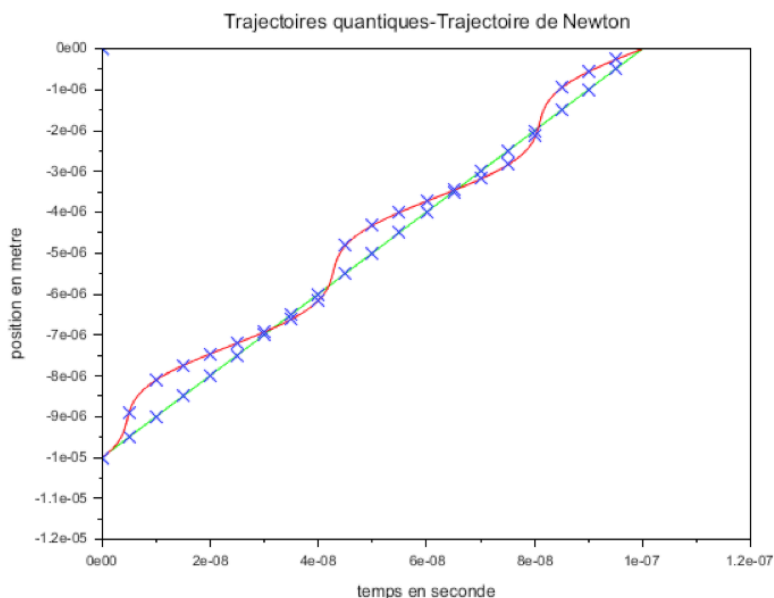


Figure 9: Trajectoire quantiques: ES=0.01 E0 (vert) ; ES=0.9 E0 (rouge) Trajectoires de Newton : (x)

l'existence d'une force quantique $F_q(x)$ qui agit sur les particules en chaque point des trajectoires (15). Et si l'on calcule des trajectoires en admettant que la particule obéit à la loi de Newton (16) sous l'action de la force quantique $F_q(x)$ on obtient les mêmes trajectoires que celles calculées à partir de l'équation de Schrödinger et de l'équation (8).

****Ainsi on constate que [Schrödinger + équation (8)] donnent les mêmes résultats que [Newton + $F_q(x)$] et cela que la particule soit quantique ou massive. ****

Références

- [1] Larini M., à paraitre 2026,
- [2] Gondran M., Gondran A., 2014, Mécanique quantique, Editions Matériologiques.

- [3] Einstein A., 1953, In papers presented to M. Born, pp 33-40, Edinburgh:(Olivier and Boyd).
- [4] Bohm D., Physical Review, 1952, vol 85, pp 166-193.
- [5] Basdevant J.L, 2017, Introduction à la physique quantique, chez Deboeck.
- [6] Born M., 1955, Continuity, determinism, and reality, Dan. Mat. Fys., Medd.30, n°2, pp 1-26.
- [7] Gondran M., Hoblos R., 2005, Trajectoires de de Broglie pour la particule dans la boîte, Annales de la Fondation Louis de Broglie, Volume 30 n° 3-4.
- [8] Borel L., 1987, Thermodynamique et énergétique, Presses Polytechniques Romane
- [9] Born M (1926), Zur Quantenmechanic der Stossvorgänge, 37 (12) 863-867

(Manuscrit reçu le 22 juillet 2026)