amg - MÉCANIQUE GÉOMÉTRIQUE

1. L'action et les relations hamiltoniennes

• On considère point matériel de masse m repéré par sa position dépendant du temps : $M(t) = (x(t), y(t), z(t))$.

L'action $\mathcal{S}$ est associée à un lagrangien $\mathcal{L}\left(\overrightarrow{OM}, \dot{\overrightarrow{OM}}, t\right)$, qu'on peut écrire de façon simplifiée $\mathcal{L}(x_i\,, \dot{x}_i\,, t)$, selon la relation : $\mathcal{S}(x_i\,, t) = \int_0^t \mathcal{L}(x_i(t), \dot{x}_i(t), t)\, dt$.

• On considère les variations de l'action associées à des changements de trajectoire (avec une sommation implicite sur les indices i) : $\delta\mathcal{S} = \int_0^t \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i}\, \delta x_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}\, \delta \dot{x}_i\right) dt$.

En intégrant par parties :

$$\delta\mathcal{S} = \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}\, \delta x_i\right]_0^t + \int_0^t \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}\right) \delta x_i\, dt \ .$$

• Pout déterminer les mouvements physiques réels entre la position initiale M_0 et un point $M(t)$ fixé, on part du principe que l'action doit être stationnaire, c'est-à-dire $\delta\mathcal{S} = 0$. Les variations δx_i étant quelconques, mais nulles aux extrémités, on en conclut que les trajectoires vérifient les équations d'Euler-Lagrange : $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} = 0$.

• Maintenant, pour ces mouvements physiques réels, on considère au contraire les variations de $\mathcal{S}$ pour un déplacement de $M(t)$; cela donne alors : $\delta\mathcal{S} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}\ \delta x_i = p_i\ \delta x_i$, avec l'impulsion $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}$; ainsi : $p_i = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}$.

• Par ailleurs, la définition de l'action donne :

$$\frac{d\mathcal{S}}{dt} = \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}\ \dot{x}_i = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + p_i\ \dot{x}_i \ .$$

Or, d'après les équations d'Euler-Lagrange :

$$d\mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i}\ dx_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}\ d\dot{x}_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}\ dt = \dot{p}_i\ dx_i + p_i\ d\dot{x}_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}\ dt \ .$$

Ainsi le Hamiltonien $\mathcal{H} = p_i\ \dot{x}_i - \mathcal{L}$ est tel que :

$$d\mathcal{H} = \dot{x}_i\ dp_i - \dot{p}_i\ dx_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}\ dt \ \ ; \ \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = -\mathcal{H} \ .$$

2. Action réduite pour un système conservatif de l'énergie

• On considère un cas où $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = 0$, ce qui impose aussi $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = 0$. On obtient ainsi : $\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \dot{x}_i\ \frac{dp_i}{dt} - \dot{p}_i\ \frac{dx_i}{dt} = 0$.

Pour un système dérivant d'une énergie potentielle $E_p(M)$, le lagrangien peut s'écrire sous la forme : $\mathcal{L} = E_c - E_p$, d'où le hamiltonien : $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2\,m} + E_p = E = Cste$.

• L'équation de Hamilton-Jacobi donne alors une action réduite $\mathcal{S}_0(x_i)$: $\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} = -E$; $\mathcal{S}(x_i\,, t) = -E\ t + \mathcal{S}_0(x_i)$.

Or on peut écrire :

$$\mathcal{S}(x_i\,,t) = \int_0^t (p_i\,\dot{x}_i - E)\,d\mathcal{t} = \int_{M_0}^{M} p_i\,dx_i - E\,t\ \ ;$$
$$\mathcal{S}_0(x_i) = \int_{M_0}^{M} p_i\,dx_i\ \ ;\ \ p_i = \frac{\partial \mathcal{S}_0}{\partial x_i}\,.$$

◊ remarque : dans la mesure où $\vec{p}$ est tangent à la trajectoire d'une particule, pour une énergie donnée toutes les trajectoires sont orthogonales aux surfaces équi-action.

• Ceci peut être relié au principe de Maupertuis permettant de déterminer la trajectoire réelle entre deux points donnés :

$$p = \|\vec{p}\| = \sqrt{2\,m\,.\,(E - E_p)}\ \ ;$$
$$\Delta\mathcal{S} = -E\,\Delta t + \Delta\mathcal{S}_0 = -E\,.\,(t_2 - t_1) + \int_{M_1}^{M_2} \vec{p}\cdot d\overrightarrow{OM}\ \ ;$$
$$\Delta\mathcal{S} = \int_{M_1}^{M_2} \sqrt{2\,m\,.\,(E - E_p)}\ d\ell = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{2\,m\,.\,(E - E_p)}\ v\,d\mathcal{t}\,.$$

En posant $f(x_i\,,\dot{x}_i) = \sqrt{2\,m\,.\,(E - E_p)}\ v$ on obtient :

$$\delta(\Delta\mathcal{S}) = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\delta x_i\,d\mathcal{t} + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\,\delta\dot{x}_i\,d\mathcal{t}\ \ ;$$
$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\,\delta\dot{x}_i\,d\mathcal{t} = \left[\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\,\delta x_i\right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{d\mathcal{t}}\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\,\delta x_i\,d\mathcal{t}\ \ ;$$
$$\left[\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\,\delta x_i\right]_{t_1}^{t_2} = 0\ \ ;$$
$$\delta(\Delta\mathcal{S}) = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{d}{d\mathcal{t}}\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i}\right)\delta x_i\,d\mathcal{t}$$
$$= -\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m\,v}{\sqrt{2\,m\,.(E-E_p)}}\,\frac{\partial E_p}{\partial x_i} + \frac{d}{d\mathcal{t}}\left(\sqrt{2\,m\,.\,(E - E_p)}\ \frac{\dot{x}_i}{v}\right)\right)\delta x_i\,d\mathcal{t}\,.$$

Dans le cas de la trajectoire réelle :

$$m\,v = p = \sqrt{2\,m\,.\,(E - E_p)}\ \ ;$$
$$\delta(\Delta\mathcal{S}) = -\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial E_p}{\partial x_i} + m\,\ddot{x}_i\right)\delta x_i\,d\mathcal{t}\,.$$

La seconde loi de Newton $m\,\ddot{x}_i = -\frac{\partial E_p}{\partial x_i}$ correspond donc bien au principe moindre action de Maupertuis : $\delta(\Delta\mathcal{S}) = 0$.

3. Formulation ondulatoire de Schrödinger

• Louis De Broglie avait compris la nécessité d'une description ondulatoire mais sans savoir quelle pouvait être l'équation régissant de telles ondes .

Schrödinger a cherché avec une fonction d'onde de la forme : $\Psi(x_i\,,t) = \psi(x_i)\,\chi(t)$.

L'analogie avec l'optique géométrique l'a incité en outre à chercher en supposant $\psi(x_i) = \exp\left(\frac{\mathcal{S}_0}{\kappa}\right)$ avec une constante κ homogène à une action (pour avoir une grandeur sans dimension).

Ceci donne : $p_i = \frac{\partial \mathcal{S}_0}{\partial x_i} = \frac{\kappa}{\psi}\,\frac{\partial \psi}{\partial x_i}$ puis $\frac{\kappa^2}{2\,m\,\psi^2}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i}\right)^2 + E_p = E$ qui peut aussi s'écrire : $\kappa^2\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i}\right)^2 + 2\,m\,.\left(E_p - E\right)\psi^2 = 0$.

• Avec l'idée de base du calcul variationnel, Schrödinger propose alors de chercher une fonction ψ donnant :

$$\delta\left(\iiint\left[\kappa^2\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i}\right)^2 + 2\,m\,.\left(E_p - E\right)\psi^2\right]\,d^3x\right) = 0\ .$$

Ceci peut aussi s'écrire :

$$\iiint \kappa^2\,\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i}\,\delta\psi\right)\,d^3x + \cdots$$
$$+ \iiint\left(-\kappa^2\,\Delta\psi + 2\,m\,.\left(E_p - E\right)\psi\right)\delta\psi\;\,d^3x = 0\ .$$

Or on peut considérer que ψ s'annule à l'infini, dans la mesure où l'onde est associée à la présence de particules (de façon analogue aux photons pour l'onde lumineuse) et où son intégrale doit être finie. Ainsi $\delta\psi$ y est nulle donc :

$$\iiint \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x_i}\,\delta\psi\right)\,d^3x = \lim_{R\to\infty} \oiint_{r=R} \frac{\partial\psi}{\partial x_i}\,\delta\psi\,dS_i = 0\ .$$

Il reste donc la condition : $-\kappa^2\,\Delta\psi + 2\,m\,.\left(E_p - E\right)\psi = 0$, qui peut s'écrire : $-\frac{\kappa^2}{2\,m}\,\Delta\psi + E_p\,\psi = E\,\psi$.

En appliquant cette équation (plus simple à résoudre) au cas de l'atome d'hydrogène, Schrödinger montre qu'on retrouve les résultats déjà connus si et seulement si on impose $\kappa = \hbar$.

4. Équation de Schrödinger

• Schrödinger cherche ensuite à préciser l'équation obtenue par rapport à la propagation de l'onde. Puisque $p_i = \frac{\partial\mathcal{S}}{\partial x_i}$ est normal aux “surfaces d'onde” équi-action, il s'intéresse à la vitesse de propagation de ces surfaces, analogue à la vitesse de phase v_φ en optique.

D'après $d\mathcal{S} = \frac{\partial\mathcal{S}}{\partial t}\,dt + \frac{\partial\mathcal{S}}{\partial x_i}\,dx_i = -E\,dt + p\,d\ell_\varphi$ avec un déplacement $d\ell_\varphi = \vec{n}\cdot d\overrightarrow{OM}$, les surfaces équi-action sont telle que $d\mathcal{S} = -E\,dt + p\,d\ell_\varphi = 0$. Ainsi : $v_\varphi = \frac{d\ell_\varphi}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2\,m\,.(E-E_p)}}$.

◊ remarque : il faut ne pas confondre avec la vitesse de groupe $v = \frac{p}{m} = \sqrt{\frac{2\,(E-E_p)}{m}}$; cela est bien conforme à la relation $\lambda = \frac{h}{p}$ de De Broglie, donnant une propagation plus lente pour p grand.

• L'analogie avec la propagation d'ondes lumineuses le conduit alors à considérer l'équation : $\Delta\Psi - \frac{1}{v_\varphi^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$ et à en chercher des solutions sinusoïdales ; en notations complexes :

$$\Psi(x_i\,,t) = \exp\left(\mathrm{i}\frac{\mathcal{S}(x_i\,,t)}{\hbar} + Cte\right) = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{E\,t}{\hbar} + \mathrm{i}\frac{\mathcal{S}_0(x_i)}{\hbar} + Cte\right) ;$$
$$\Psi(x_i\,,t) = \psi(x_i)\ \exp\left(-\mathrm{i}\frac{E\,t}{\hbar}\right)\ ;\ \psi(x_i) = \exp\left(\mathrm{i}\frac{\mathcal{S}_0(x_i)}{\hbar} + Cte\right) .$$

En reportant dans l'équation de propagation considérée, il obtient effectivement : $-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\Delta\psi + E_p\,\psi = E\,\psi$.

• En outre, on peut aussi écrire : $-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\Delta\Psi + E_p\,\Psi = E\,\Psi$ où par ailleurs $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}\,\Psi$; il en déduit l'équation générale :

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\Delta\Psi + E_p\,\Psi = \mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} .$$

◊ remarque : le laplacien correspond aussi à : $p_i\,\Psi = -\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial x_i}$.

5. Limite “géométrique” de la mécanique ondulatoire

• Dans un cas plus général, on peut être conduit à chercher des solutions sous une forme analogue mais avec une amplitude non constante : $\Psi(x_i\,,t) = a(x_i\,,t)\ \exp\left(\mathrm{i}\frac{\mathcal{S}(x_i\,,t)}{\hbar}\right)$ où $a = |\Psi|$.

En reportant dans l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$\Delta\Psi = \left[\Delta a - \frac{a}{\hbar^2}\left(\frac{\partial\mathcal{S}}{\partial x_i}\right)^2 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(a\,\Delta\mathcal{S} + 2\,\frac{\partial\mathcal{S}}{\partial x_i}\frac{\partial a}{\partial x_i}\right)\right]\ \exp\left(\mathrm{i}\frac{\mathcal{S}}{\hbar}\right)\ ;$$
$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,a\,\frac{\partial\mathcal{S}}{\partial t}\right)\ \exp\left(\mathrm{i}\frac{\mathcal{S}}{\hbar}\right) .$$

Les parties réelle et imaginaire donnent en simplifiant :

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}\right)^2 + E_p - \frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\Delta a}{a} = 0 \ ;$$
$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{m}\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}\frac{\partial a}{\partial x_i} + \frac{a}{2\,m}\Delta \mathcal{S} = 0 \ .$$

• Dans la première équation :

$\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}\right)^2 = p^2 = \frac{h^2}{\lambda^2}$;

$\hbar^2 \frac{\Delta a}{a} \approx \frac{\hbar^2}{L^2}$ en notant L la dimension typique du système.

L'approximation de la mécanique géométrique correspond à la limite où $\lambda \ll L$, pour laquelle le terme d'impulsion est nettement prépondérant. L'équation devient alors : $\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}\right)^2 + E_p \approx 0$ (équivalent à $\frac{p^2}{2\,m} + E_p \approx E$).

• La seconde équation peut s'écrire :

$$\frac{\partial (a^2)}{\partial t} + \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a^2 \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial x_i}\right) = 0 \ ;$$
$$\frac{\partial (|\Psi|^2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(|\Psi|^2\, v_i) = 0 \ .$$

Cela traduit la propagation à la vitesse $\vec{v}$ de la densité de présence $|\Psi|^2$ de la particule décrite.

• Au total, on voit que toute la mécanique newtonienne du point matériel n'est qu'une approximation “géométrique” de la mécanique ondulatoire, analogue à l'optique géométrique pour les phénomènes lumineux (ces approximations sont toutefois très utiles dans de très nombreuses circonstances).