

Physique

B. Fourcade

Bertrand.Fourcade@univ-grenoble-alpes.fr,

Laboratoire interdisciplinaire de physique,

Lecture notes available at :

http://liphy-annuaire.univ-grenoble-alpes.fr/pages_personnelles/bertrand_fourcade

Things to do :

- Send me an e-mail, so I know your address;
- Download this document (no need to print because it will be upgraded).

Table des matières

partie 1. Mécanique Classique	7
Chapitre 1. Mécanique Newtonienne	9
1. Quelques exemples simples d'équation du mouvement	9
1.1. Systèmes dynamiques en $d = 1$ dimension	9
2. Espace des configurations et espace des phases	10
3. Généralisation : notion de flot	11
4. Le toboggan d'Abel : un exemple de problème inverse	12
5. Le cas du pendule	14
6. Intégrales elliptiques : comment connaître la période d'un pendule simple ?	14
7. Système à deux degrés de liberté	16
7.1. Travail d'un champ de force sur un chemin	16
7.2. Moment cinétique	18
Chapitre 2. Mécanique de Lagrange et calcul variationnel	21
1. Introduction	21
2. Symmétries, Théorème de Noether	23
3. Théorème d'Émilie Noether	26
4. Géodésiques	26
5. Quelques problèmes variationnels	28
5.1. Loi de Snell-Descartes	28
5.2. Variation sous contraintes	29
6. Lagrangien d'une particule chargée dans un champ électromagnétique	30
7. L'instabilité d'Euler	32
Chapitre 3. Dynamique des champs classiques : passage au continuum et symétries	37
1. Introduction	37
2. Chaîne de masses	37
3. Chaîne continue	38
4. Qu'est-ce qu'une symétrie ?	40
Chapitre 4. Solitons	43
1. Introduction	43
2. Équation de Sine-Gordon	43
2.1. Mise en forme	43
2.2. Comportement asymptotique : soliton et anti-soliton	44
2.3. Solution exacte interpolant entre 0 et 2π .	45
2.4. Calcul de l'énergie	45
3. Solutions multi-solitons et transformation de Bäcklund	47
Chapitre 5. Mécanique de Hamilton	51
1. Rappels sur la transformée de Legendre	51
2. Fonction de Hamilton et énergie	52
3. Flot et espace des phases	53
4. Théorème de Liouville	53
5. Rappels : formes différentielles	55

6. Crochets de Poisson	56
7. Lien entre le flot Hamiltonien et la 2- forme symplectique	57
8. Théorème du retour de Poincaré	57
9. Approche Hamiltonienne (cas continu)	58
Chapitre 6. Structure de l'espace-temps - Introduction à la relativité	59
1. Notion de variété	59
2. Courbes et vecteurs sur une variété	60
3. Forme multilinéaire et tenseur	61
4. Exemples de tenseur	62
5. Métrique riemannienne	63
6. Deux autres notions	63
6.1. Dérivée extérieure	63
6.2. Dérivée de Lie	63
7. Métrique de Minkowski	63
8. Lignes d'univers	65
9. Temps propre	66
10. Facteur de Lorentz	67
11. Simultanéité de deux évènements	67
12. Géodésiques	68
13. Dérivation covariante	69
partie 2. Mécanique quantique	71
Introduction	72
Expériences des fentes d'Young : un électron, ou tout autre objet microscopique (i.e. une particule), est à la fois une onde et une particule	72
Autres expériences	76
Symétries et représentation des groupes	77
Polarisation du photon	80
Interprétation	82
Mesure	83
Propriétés physiques, mesure et opérateurs	84
Cryptage quantique	85
Les principes de base de la mécanique quantique	87
Opérateur d'évolution	87
États stationnaires	88
Mécanique Ondulatoire	90
Lagrangien et Hamiltonien en mécanique quantique	92
Équation d'Euler-Lagrange	92
Structure formelle des équations du mouvement en mécanique classique : les crochets de Poisson	93
Théorème Ehrenfest en mécanique quantique	93
Principe variationnel et équation de Schrödinger (Feynman, 1965)	93
Pour aller plus loin	94
Calculus	95
Équation de Schrödinger	96
États stationnaires	97
Insouciances mathématiques	98
Opérateurs	99
Relations de commutation canonique	99
Exemples	100
Particule dans un puits de potentiel infini	100

Potentiel en $\delta(x)$	100
Symétries en mécanique quantique	101
Conséquences des symétries : quelques exemples	101
Symétrie de parité	101
Potentiel invariant sous rotation	102
Potentiel spatialement périodique	102
Oscillateur harmonique	103
Instantons	106
Chaîne anharmonique	106
Chapitre 7. Intrication quantique - EPR - Aspect- Bell	109
1. Vecteurs d'état pour plusieurs particules	109
2. États intriqués	110
3. Schéma expérimental d'Einstein-Podolsky-Rosen dans la version de Bohm-Aharonov	110
4. Une difficulté	112
5. Paramètres supplémentaires	112
6. Inégalité de Bell	113
Chapitre 8. Le problème de Sturm-Liouville	115
1. Existence des fonctions propres (vecteurs propres)	119
1.1. Fonctions de Green	119
1.2. Construction de la fonction de Green	119
1.3. Un problème équivalent : Il existe un inverse de l'opérateur L	120
2. Ensemble équicontinu de fonctions	121
3. Construction de la base propre de l'opérateur T	122
4. Fonctions orthogonales	123
5. Les vecteurs propres de T constituent une base complète de $\mathcal{L}^2(a, b)$.	124
6. Fonctions de Green et développement sur une base propre	125
7. Distributions	126
8. Exercices	129
Bibliographie	135

I MÉCANIQUE CLASSIQUE

Références :

- (i) Méthodes mathématiques de la mécanique classique, V. Arnold
- (ii) Géométrie contemporaine, B. Doubrovine et al.
- (iii) Classical dynamics : A contemporary approach, Jorge V. José
- (iv) mathematical Physics : Classical Mechanics, Andreas Knauf

II MÉCANIQUE QUANTIQUE

Références :

- (i) Mécanique quantique ; Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard ;
- (ii) Physique quantique, Michel Le Bellac ;
- (iii) Sturm-Liouville Theory and its Applications, Al-Gwaiz, M.A.

Première partie

Mécanique Classique

Mécanique Newtonienne

Un mouvement est défini comme une application d'un intervalle de temps I dans \mathbb{R}^N où N est le nombre de degrés de liberté (3 pour un point matériel et $3n$ pour un système de n points matériels). Le vecteur position $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^N$ spécifie les coordonnées spatiales et les vitesses seront notées $\dot{\mathbf{q}}$. L'espace des configurations est l'espace des \mathbf{q} « possibles » en fonction des contraintes ou des liaisons. Cet espace a une structure de variété (on peut donc définir un espace tangent, voir chapitre suivant) où on peut définir des angles, des volumes etc. (c'est donc une variété de Riemann).

On apprend en mécanique classique que le mouvement d'un point matériel est défini de façon univoque par sa position et sa vitesse initiales. En vertu de la théorie des équations différentielles, il existe donc une fonction F de $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}$ dans \mathbb{R}^N telle que

$$(1) \quad \ddot{\mathbf{q}} = F(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$$

car la fonction F et les conditions initiales spécifient la trajectoire de façon unique. La fonction F est généralement définie de façon empirique, l'exemple canonique pour un point matériel étant celui d'un ressort $F(\mathbf{q}) = -k\|\mathbf{q}\|$ où k est la constante de rigidité.

EXERCICE 1. *Un système de coordonnées est dit inertiel s'il y a invariance par translation dans le temps. Autrement dit, si $\mathbf{q}(t)$ est solution, alors $\mathbf{q}(t+s)$ est aussi solution quelque soit s . La fonction F peut-elle alors dépendre du temps dans un système de coordonnées inertiels ?*

Un classe importante de problème correspond aux systèmes dérivant d'un potentiel. Dans ce cas, il existe une fonction U de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \dots \times \mathbb{R}^3$ dans \mathbb{R} telle que les équations du mouvement prennent la forme

$$(2) \quad m_i \ddot{q}_i = -\frac{\partial U}{\partial q_i} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

où, pour simplifier les notations, nous avons supposé une seule coordonnée q_i pour chaque point matériel. Nous étudierons principalement ces systèmes (à quelques exceptions près comme pour une particule chargée dans un champ électromagnétique).

1. Quelques exemples simples d'équation du mouvement

1.1. Systèmes dynamiques en $d = 1$ dimension. Nous nous plaçons dans le cas des systèmes à 1 degré de liberté. La notation x pour la position est donc naturelle. On définit l'énergie cinétique

$$(3) \quad T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

et l'énergie potentielle

$$(4) \quad U(x) = - \int_{x_0}^x f(\xi) d\xi$$

REMARQUE 1. *Il n'est pas toujours possible de définir une énergie potentielle pour $d \geq 2$. Voir plus loin.*

On baptise énergie la quantité

$$(5) \quad E = T + U$$

Dérivant E par rapport à rapport au temps t , on retrouve les équations du mouvement :

$$(6) \quad \frac{dE}{dt} = \dot{x}\ddot{x}m + \frac{dU}{dx}\dot{x} = 0$$

La quantité E est donc conservée : c'est une intégrale première ou une constante du mouvement.

Pour un système 1d (une dimension), les équations du mouvement peuvent être mises sous la forme :

$$(7) \quad \dot{x} = y$$

$$(8) \quad \dot{y} = f(x)$$

dont la solution définit une courbe ou une ORBITE $x = \varphi(t)$, $y = \dot{\varphi}(t)$ dans le plan de phase de coordonnées $(x(t), y(t))$ où la trajectoire est donnée sous forme paramétrée.

EXERCICE 2. Pour l'oscillateur harmonique,

$$(9) \quad m\ddot{x} = -kx$$

démontrer que les orbites sont des cercles dont le rayon est fonction de l'énergie E . Noter que la courbe peut être réduite à un point qui correspond à l'équilibre stable du pendule.

Le plan de phase dont chaque point représente l'information nécessaire à prédire l'évolution du système est le plan de phase (x, y) . On appelle portrait de phase l'ensemble de ces courbes indicées par les niveaux d'énergie E .

EXEMPLE 1. Une situation rencontrée fréquemment est celle d'un profil de potentiel à deux minima. Pour visualiser le problème, il suffit d'imaginer une masse astreinte à se déplacer dans une fosse sous l'effet de la gravité. Dans le cas général d'un potentiel $U(x)$, les niveaux d'énergie sont donnés par :

$$(10) \quad E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + U(x) > U(x)$$

Les points tournants correspondent aux extrémités du mouvement où la vitesse s'annule. Pour une fosse à deux minima, il existe deux types de mouvements périodiques dont les orbites sont séparées par une courbe que le mobile met un temps infini à parcourir (Pourquoi?). Cette courbe est appelée séparatrice.

EXERCICE 3. Tracer à la main (sans faire de calculs) les orbites pour le pendule simple (gravité g et longueur l) donnée par l'équation

$$(11) \quad \ddot{\theta} = -\frac{g}{l}\sin\theta \quad \omega^2 = g/l$$

Multipliant les deux membres par $\dot{\theta}$, on donnera une intégrale première et on isolera les positions d'équilibres stables et instables. Une position d'équilibre est dite stable si en s'écartant de cette position d'équilibre, on reste dans un voisinage de celle-ci. Elle est dite instable dans le cas contraire. En déduire l'effet des non-linéarités sur la période du pendule.

2. Espace des configurations et espace des phases

On voit tout de suite que pour décrire la dynamique d'un système mécanique, il faut définir un espace plus large que l'espace des positions des points matériels composant le système mécanique. L'espace des positions s'appelle l'espace des configurations. Nous supposons une variété différentiable et nous l'appellerons M . Pour décrire la dynamique, il faut des vitesses. En chaque point x de M , nous pouvons définir un espace tangent $T_x M$. L'espace des phases est par définition l'ensemble des positions et des vitesses possibles (par seulement celles données par la dynamique des équations de Newton).

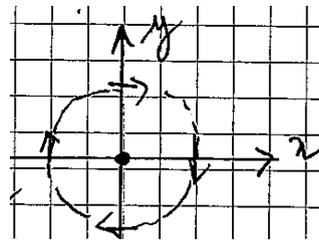


FIGURE 1

Dans le cas général d'un potentiel $U(x)$, les niveaux d'énergie sont donnés par :

Par exemple, pour le pendule où l'espace tangent est la sphère $M = S^d \subset \mathbb{R}^d$ en x est tout simplement

$$(12) \quad T_x M = \{y \in \mathbb{R}^{d+1} \mid \langle y, x \rangle = 0\}$$

Il faut néanmoins être prudent, car toutes les variétés ne sont pas nécessairement définies comme des sous-ensembles d'un \mathbb{R}^n .

3. Généralisation : notion de flot

Les aspects géométriques que nous avons vus se généralisent facilement à n dimensions. On se donne un champ de vecteurs de composantes $\xi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$. À tout champ de vecteur, on associe le système autonome d'équations différentielles

$$(13) \quad \dot{x}_i(t) = \xi_i(x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Pour une solution $x_i(t)$ sujette aux conditions initiales $x_i(t=0) = x_i^0$, définissons l'application

$$(14) \quad F_t : (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) \rightarrow (x_1(t, \mathbf{x}^0), x_2(t, \mathbf{x}^0), \dots, x_n(t, \mathbf{x}^0))$$

qui dépend du paramètre t (il s'agit d'une translation temporelle). On apprend que pour des t petits, F_t peut être considérée comme un difféomorphisme. Ensuite, F_0 est la transformation identique et les difféomorphismes forment un groupe local :

$$(15) \quad F_{t+s} = F_t \circ F_s \quad F_{-t} = (F_t)^{-1}$$

Nous obtenons un groupe local de difféomorphismes à un seul paramètre appelé flot (associé aux équations de Newton).

Un cas important est celui des systèmes linéaires où la matrice A est constante

$$(16) \quad \dot{y} = Ay$$

avec la condition initiale $y(t_0) = x_0$. Pour tout endomorphisme M sur un espace de dimension finie, nous pouvons définir l'exponentielle comme

$$(17) \quad \exp\{M\} = \sum_{k \geq 0} \frac{M^{(k)}}{k!}$$

où $M^{(0)} = Id_V$ et $M^{(k+1)} = M^{(k)} \circ M$.

L'exponentielle d'une matrice est donc définie de la même façon. Un théorème très utile est le suivant

THÉORÈME 1.

$$(18) \quad \det(\exp\{A\}) = \exp\{\text{tr}(A)\}$$

EXERCICE 4. (1) Démontrer que si B et C sont deux matrices telles que $BC = CB$, alors

$$(19) \quad \exp\{B + C\} = \exp\{B\} \exp\{C\}$$

(2) Prendre

$$(20) \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et montrer que l'identité précédente est fausse.

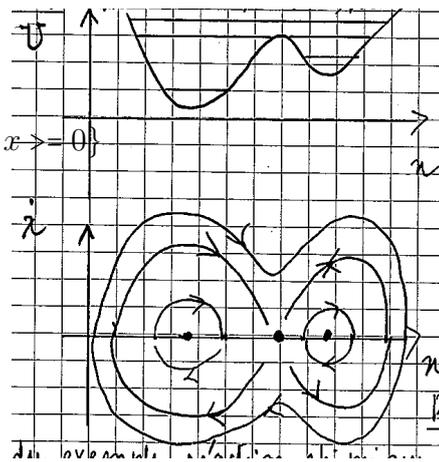


FIGURE 2

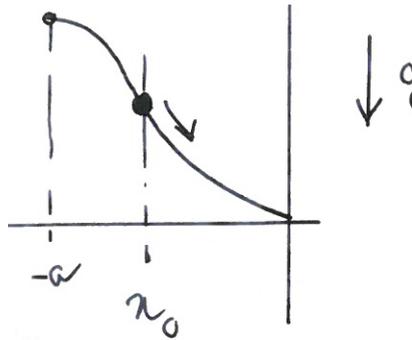


FIGURE 3 – Le problème du toboggan d’Abbel. En faisant varier le point de départ x_0 , on fait varier l’énergie totale qui est conservée dans la suite du mouvement. La connaissance du temps d’arrivée $\tau(E)$ permet-elle de reconstruire la forme du toboggan ?

On a évidemment

$$(21) \quad \exp\{A(t_1 + t_2)\} = \exp\{At_1\} \exp\{At_2\}, \quad (t_1, t_2) \in \mathbb{R}$$

Le flot solution de l’équation $\dot{x} = Ax$ est donc défini comme l’application

$$(22) \quad F_t : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad F_t(x) = \exp\{At\}x, \quad t \in \mathbb{R}$$

Les définitions suivantes sont d’usage constant :

DÉFINITION 1. (i) La matrice A d’un flot est dite hyperbolique ssi toutes ses valeurs propres $\lambda \in \mathbb{C}$ sont telles que $\Re(\lambda) \neq 0$.

(ii) L’ensemble $\{x \in \mathbb{R}^n \mid \lim_{t \rightarrow \infty} F_t(x) = 0\}$ est le sous-espace stable. Autrement, le sous-espace est dit instable.

On voit que la dynamique de Newton génère un flot et il est intéressant de savoir quelles sont les structures qui sont préservées sous l’application de ce flot.

4. Le toboggan d’Abel : un exemple de problème inverse

Nous commençons par décrire un problème mécanique simple¹. Soit $f : [-a, 0] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^1 . On suppose $f(-a) = E_0 > 0$, $f(0) = 0$ et $f'(x) < 0$, $x \in [-a, 0]$. On considère un point pesant de masse m se déplaçant sur le graphe f dans un champ de pesanteur $g = 1$.

Pour chaque valeur de l’altitude $z_0 \in [0, E_0]$, on lâche le mobile sans vitesse initiale et on repère le temps $\tau(E_0)$ au point d’arrivée en $x = 0$.

DÉFINITION 2. LE PROBLÈME D’ABEL : Est-ce que la seule connaissance du temps d’arrivée $z \rightarrow \tau(z)$ permet de reconstituer la forme du $f(x)$ du toboggan ? Avec la hypothèses, la réponse est OUI. Attention, si f n’est pas strictement monotone, i.e. le toboggan a des creux et des bosses, la réponse est NON. Quand cela est possible, on dispose de formules explicites pour reconstruire la forme du toboggan à partir de la connaissance de $\tau(E)$ C’est ce qu’on appelle un problème inverse.

Soit s l’abscisse curviligne le long du graphe de f . On suppose le mobile astreint à se déplacer sur le graphe et il ne peut donc pas décoller. Son énergie cinétique est donc $1/2m\dot{s}^2$. Les frottements étant supposés nuls, la force de réaction ne travaille pas, et on peut appliquer la conservation de l’énergie totale :

$$(23) \quad \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V(x) = E$$

1. D’après un article de Y. Colin de Verdière et de J.-P. Truc : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00400153>.

où nous avons introduit le potentiel :

$$(24) \quad V(s) = mgz(s)$$

Le temps de descente s'exprime alors par l'intégrale :

$$(25) \quad \tau(E) = \int_{x(0)}^0 \frac{dx}{\sqrt{E - V(x)}}$$

Posons $u = V(x)$, soit $x = W(u)$ où $W(u)$ est la fonction inverse (qui est définie en raison de l'hypothèse de stricte monotonie)

$$(26) \quad \tau(E) = - \int_0^E \frac{W'(u)}{\sqrt{E - u}} du$$

Reste maintenant à connaître $W(E)$ en fonction de $\tau(E)$. Pour cela nous utiliserons le résultat suivant :

THÉORÈME 2. *Soit \mathcal{L} l'opérateur linéaire définie par toute fonction u continue sur $[0, b]$ à valeurs réelles par*

$$(27) \quad [\mathcal{L}u](y) = \int_0^y dx \frac{u(x)}{\sqrt{y-x}}$$

Alors

$$(28) \quad [\mathcal{L}[\mathcal{L}u]](y) = \pi \int_0^y u(x) dx$$

En effet,

$$(29) \quad \begin{aligned} [\mathcal{L}[\mathcal{L}u]](y) &= \int_0^y dz \frac{1}{\sqrt{y-z}} \left(\int_0^z dx \frac{u(x)}{\sqrt{z-x}} \right) \\ &, = \int_0^y \left(\int_x^y \frac{dz}{\sqrt{(y-z)(z-x)}} \right) u(x) dx \end{aligned}$$

d'après le théorème de Fubini.

On rappelle les résultats suivant pour un domaine RECTANGULAIRE :

THÉORÈME 3. *Soit $f : D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ continue dans D .*

(1) *Si $D = \{(x, y) \in [a, b] \subset \mathbb{R}^2 : y \in [g_1(x), g_2(x)]\}$ où g_1 et g_2 sont toutes deux continues, alors :*

$$(30) \quad \iint_D f(x, y) d(x, y) = \int_a^b \int_{g_1(x)}^{g_2(x)} f(x, y) dx dy$$

(2) *Si $D = \{(x, y) \in [a, b] \subset \mathbb{R}^2 : x \in [h_1(y), h_2(y)]\}$ où h_1 et h_2 sont toutes deux continues, alors :*

$$(31) \quad \iint_D f(x, y) d(x, y) = \int_a^b \int_{h_1(x)}^{h_2(x)} f(x, y) dy dx$$

On obtient maintenant le résultat à partir de l'identité

$$(32) \quad \int_x^y \frac{dz}{\sqrt{(y-z)(z-x)}} = \pi$$

□

CONCLUSION : On a donc :

$$(33) \quad W(E) = -\frac{1}{\pi} [\mathcal{L}\tau](E)$$

car $\int W'(E) dE = W(E)$. D'où $V(E)$ en fonction de $\tau(E)$, c'est-à-dire en fonction du point de départ.

5. Le cas du pendule

On considère maintenant les oscillations périodiques d'un point matériel dans un potentiel $V(\theta)$ supposé de classe C^1 . L'exemple canonique est le pendule simple où l'équation du mouvement est

$$(34) \quad \ddot{\theta} = -\omega^2 \sin \theta$$

d'où, dans cet exemple, $\omega^2 V(\theta) = -\omega^2 \cos \theta$. Mais, dans le cas général, $V(\theta)$ peut être quelconque, en particulier, il peut ne pas être symétrique en $\theta \rightarrow -\theta$.

La conservation de l'énergie donne :

$$(35) \quad \frac{1}{2} \dot{\theta}^2 + \omega^2 V(\theta) = E \omega^2$$

$$(36) \quad \frac{d\theta}{dt} = \pm \omega [2(V(\theta) - E)]^{1/2}$$

où le signe + est pris sur une demi-période et le signe - correspond à l'autre demi-période, le pendule oscillant sur l'intervalle $[\theta_-, \theta_+]$, avec $\theta_- = -\theta_+$ si le potentiel (θ) est paire. La vitesse angulaire s'annulant en changeant de signe aux deux élongations θ_{\pm} , on a $V(\theta_{\pm}) = E$. On a donc la période

$$(37) \quad T(E) = \frac{\sqrt{2}}{\omega} \int_{\theta_-}^{\theta_+} \frac{d\theta}{\sqrt{V(\theta) - E}}$$

qui est une fonction de du niveau d'énergie E . Dans le cas général, plusieurs potentiels peuvent donner la même fonction $T(E)$. Parmi ceux-ci, il n'existe qu'un seul potentiel pair dans le changement $\theta \rightarrow -\theta$.

6. Intégrales elliptiques : comment connaître la période d'un pendule simple ?

REMARQUE 2. *Nous ferons quelques calculs dans ce cours. Il existe maintenant des logiciels de calcul formel qui sont très pratiques. Sagemaths <https://www.sagemath.org/fr/> est facile d'emploi et c'est logiciel libre.*

Rappelons que le mouvement du pendule est donné par l'équation différentielle

$$(38) \quad \ddot{\theta}(t) = -\frac{g}{l} \sin \theta(t) \quad \omega^2 = g/l$$

Cette équation est non-linéaire et nous n'allons pas simplifier le problème. Cette équation s'intègre immédiatement pour donner

$$(39) \quad \frac{1}{2} \dot{\theta} - \omega^2 \cos \theta = \text{const}$$

Lorsque le pendule oscille, il atteint un angle maximum α où sa vitesse s'annule en changeant de signe. Soit α cet angle. Nous avons :

$$(40) \quad \frac{1}{2} \dot{\theta}^2 = \omega^2 (\cos \theta - \cos \alpha)$$

ou

$$(41) \quad \dot{\theta} = \pm \omega \sqrt{2(\cos \theta - \cos \alpha)}$$

avec le + correspondant à la première demi-période. Nous avons donc

$$(42) \quad \omega t = \int_0^{\theta} \frac{d\phi}{\sqrt{2(\cos \phi - \cos \alpha)}} = \frac{1}{2} \int_0^{\theta} \frac{d\phi}{\sqrt{\sin^2 \alpha/2 - \sin^2 \phi/2}}$$

En substituant

$$(43) \quad z = \frac{\sin \phi/2}{\sin \alpha/2} \quad \rho = \frac{\sin \theta/2}{\sin \alpha/2} \quad e = \sin^2 \alpha/2 \in [0, 1[$$

nous obtenons :

$$(44) \quad \omega t = \int_0^{\rho} \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-ez^2)}}$$

Lorsque l'angle est maximum $\rho = 1$ et comme nous avons intégré sur 1/4 de périodes :

$$(45) \quad \frac{T}{4} = \frac{1}{\omega} \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{(1-z^2)(1-ez^2)}}$$

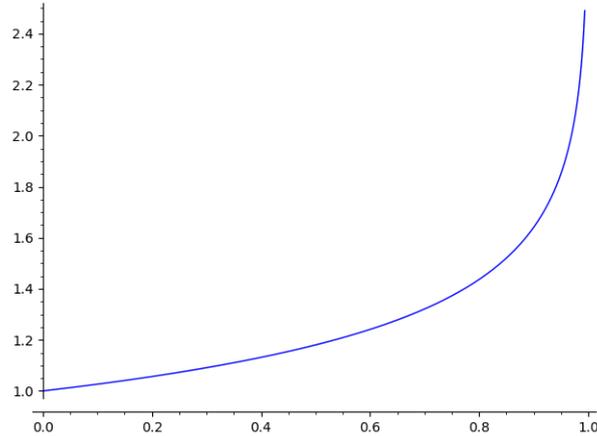


FIGURE 4 – Période du pendule simple.

qui est un exemple d'intégrale elliptique de 1^{ère} espèce.

Une écriture plus simple revient à poser $z = \sin\theta$ dans l'intégrale pour obtenir

$$(46) \quad \frac{T}{4} = \frac{1}{\omega} \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{(1 - e^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}$$

Cette intégrale est tabulée. On trouve comme une intégrale elliptique de première espèce. Le développement limité (qui n'est pas évident) donne pour la période :

$$(47) \quad \frac{T}{T_0} = 1 + \frac{e^2}{4} + \frac{9}{64}e^4 + \dots$$

où

$$(48) \quad T_0 = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$$

est la période du pendule dans l'approximation linéaire.

Le graphe T/T_0 peut être tracé en fonction de e (le \sin de l'angle max divisé par 2). On retrouve bien que la période diverge lorsque e tend vers 1.

Un problème inverse consiste à calculer θ en fonction de t en utilisant (44) (c'est-à-dire en calculant ρ en fonction de t). L'inversion conduit à la théorie des fonctions elliptiques.

DÉFINITION 3. On définit les fonctions $\operatorname{sn}(x, k)$ et $\operatorname{cn}(x, k)$ par

(1)

$$(49) \quad x = \int_0^{\operatorname{sn}(x, k)} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}}$$

(2)

$$(50) \quad x = \int_1^{\operatorname{cn}(x, k)} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(k'^2 + k^2t^2)}}$$

avec $k' = \sqrt{1-k^2}$.

THÉORÈME 4. Nous avons $\operatorname{sn}(x, 0) = \sin x$ et $\operatorname{cn}(x, 0) = \cos(x)$

THÉORÈME 5. Nous avons

$$(51) \quad \operatorname{sn}^2(x, k) + \operatorname{cn}^2(x, k) = 1$$

car

$$(52) \quad x = \int_1^v \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(k'^2 + k^2t^2)}} = \int_0^{\sqrt{1-v^2}} \frac{ds}{(1-s^2)(1-k^2s^2)}$$

en faisant $s = \sqrt{1-t^2}$. Nous avons donc $u = \sqrt{1-v^2}$.

Les intégrales elliptiques se rencontrent dans de nombreux problèmes. Il semblerait que le résultat suivant ait déjà été établi par Gauss :

THÉORÈME 6. Soient (a, b) deux nombres réels strictement positifs. Définissons $a_0 = a$ et $b_0 = b$ et les suites des moyennes arithmétiques et géométriques

$$(53) \quad a_{n+1} = \frac{a_n + b_n}{2} \quad b_{n+1} = \sqrt{a_n b_n}$$

converge vers la même limite et cette limite est

$$(54) \quad M(a, b) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{a^2 \cos^2 \phi + b^2 \sin^2 \phi}}$$

REMARQUE 3. La convention d'écriture généralement adoptée est la suivante. Soit :

$$(55) \quad K = K(k) := \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-x^2)(1-k^2x^2)}}$$

On a

$$(56) \quad \operatorname{sn}(K, k) = 1;$$

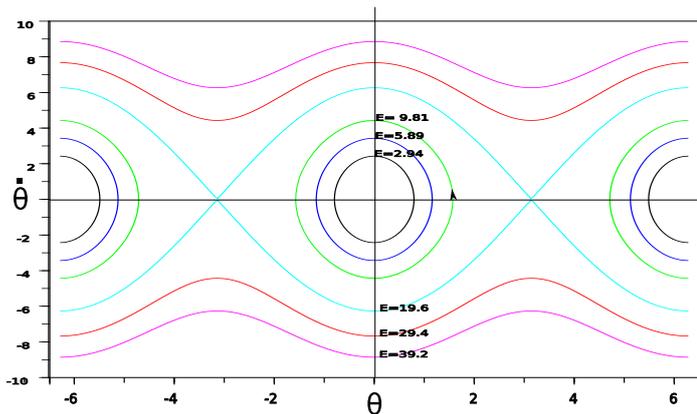
Pour le pendule, la variable k est fonction de l'angle maximum α par

$$(57) \quad k = \sin \frac{\alpha}{2}$$

Par suite, lorsque l'amplitude d'oscillations est faible $k \rightarrow 0$, alors que $k \rightarrow 1^-$ lorsque $\alpha \rightarrow \pi^-$. Les deux limites asymptotiques suivantes sont donc intéressantes :

(1) $k \rightarrow 0$ alors $K(k) \approx \pi/2$. On retrouve bien que la période du pendule est $t = T_0 2\pi/\omega$, indépendante de l'angle maximum des oscillations α (isochronisme des oscillations).

(2) $k \rightarrow 1^-$: $K(k)$ diverge : On retrouve bien le comportement sur la séparatrice entre les mouvements d'oscillation et de libration.



7. Système à deux degrés de liberté

7.1. Travail d'un champ de force sur un chemin. En mécanique, le travail infinitésimal d'une force \vec{F} sur une particule ponctuelle qui se déplace de \vec{x} à $\vec{x} + d\vec{x}$ est donné par

$$(58) \quad \begin{aligned} \delta W &= \vec{F} \cdot d\vec{x} \\ &= \|\vec{F}\| \|d\vec{x}\| \cos \varphi(x) \end{aligned}$$

où $\varphi(x)$ est l'angle entre les deux vecteurs. Si la particule va de M_0 à M sur une chemin Γ , le travail total de la force est donnée par

$$(59) \quad W(M_0 \rightarrow M) = \int_{\Gamma} \vec{F} \cdot d\vec{x}$$

La convention de signe est importante : le travail fourni de l'extérieur est égal à l'augmentation de l'énergie potentielle du point matériel AFFECTÉE du signe $-$. Si l'intégrale (59) ne dépend pas du chemin suivi, alors est bien définie la fonction de M

$$(60) \quad U(M) = - \int_{M_0}^M \vec{F} \cdot d\vec{x}$$

qui définit l'énergie potentielle à une constante près.

Intuitivement, cette formule est claire (pour un arc rectifiable). On approche Γ par une somme de petits déplacements, on calcule le travail correspondant à chacun des déplacements et on somme le tout en croisant les doigts. Cette approche est suffisante pour des intégrales curviligne sur des chemins rectifiables. Elle perd totalement son sens en dimension supérieure si l'on veut par exemple calculer des flux au travers des surfaces (cf. théorème de Stokes). Les formes différentielles sont alors nécessaires.

EXERCICE 5. *En dimension 1, tous les champs de vecteurs sont potentiels et l'intégrale (59) ne pose pas de problème. En dimension 2, c'est faux. Il suffit de prendre un champ de vortex*

$$(61) \quad F_1 = y \quad F_2 = -x$$

pour le démontrer (faire l'intégrale sur deux parcours différents, ex. un tour complet et un aller-retour le long d'un axe).

Du point de vue mathématique, le travail est une forme différentielle et le travail total est l'intégrale d'une forme différentielle le long d'une courbe. Dans la pratique, on s'en sort en paramétrisant le chemin Γ et en faisant l'intégrale sur une intervalle $[a, b]$ de \mathbb{R} . Pour une 1-forme différentielle ω

$$(62) \quad \int_{\Gamma} \omega = \int_a^b \omega_{\gamma(t)}(\gamma'(t)) dt$$

où

$$(63) \quad \gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^n$$

est la paramétrisation de l'arc Γ . La 1-forme différentielle est définie par

$$(64) \quad \omega_x = \sum_{j=1, n} \alpha_j(x) dx_j$$

avec la notation

$$(65) \quad \begin{aligned} dx_j : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R} \\ (x_1, x_2, \dots, x_n) &\rightarrow x_j \end{aligned}$$

ce qui donne

$$(66) \quad \int_{\Gamma} \omega = \sum_{j=1, n} \int_a^b \alpha_j(\gamma(t)) x'_j(t) dt$$

On peut alors revenir à la physique en définissant une 1-forme exacte. Supposons f de classe C^1 , on peut définir successivement :

$$(67) \quad \begin{aligned} \forall h = (h_1, h_2, \dots, h_n) \in \mathbb{R}^n \quad d_x f(h) &= \sum_j h_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) \\ d_x f &= \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) dx_j \\ df &= \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j} dx_j \end{aligned}$$

où :

- (1) La première égalité est une égalité entre nombres réels ;
- (2) La deuxième est est une égalité entre 1-formes ;
- (3) La troisième est une égalité entre formes différentielles. De telles formes sont dites EXACTES, car définies par les dérivées partielles de f .

Nous avons alors :

THÉORÈME 7. *Si $\vec{F} = -\nabla(U)$ peut être vue comme un gradient d'un potentiel, alors la forme différentielle*

$$(68) \quad \delta \vec{x} \rightarrow \vec{F} \cdot \delta \vec{x} = -\nabla U \cdot \delta \vec{x} = -d_x V(\delta \vec{x})$$

est EXACTE et le travail fourni de M_0 à M ne dépend pas du chemin suivi.

7.2. Moment cinétique. Nous utiliserons ici la notation nord-américaine pour le produit vectoriel de deux vecteurs. Autrement dit,

$$(69) \quad \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$$

et les vecteurs base sont $\hat{\mathbf{u}}_x, \hat{\mathbf{u}}_y, \hat{\mathbf{u}}_z$. En coordonnées polaires, on écrira $\hat{\mathbf{u}}_r, \hat{\mathbf{u}}_\phi, \hat{\mathbf{u}}_\theta$.

DÉFINITION 4. On baptise moment cinétique la quantité

$$(70) \quad \mathbf{M} = m\mathbf{r} \wedge \dot{\mathbf{r}}$$

où \mathbf{r} est le vecteur radial. Cette définition est évidemment valable en $d = 2, 3$.

Pour un mouvement plan, $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{u}}_r = r(\cos(\varphi)\hat{\mathbf{u}}_x + \sin(\varphi)\hat{\mathbf{u}}_y)$, on a $\dot{\mathbf{r}} = r\dot{\varphi}\hat{\mathbf{u}}_\phi$ d'où le moment cinétique $\mathbf{M} = mr^2\dot{\varphi}\hat{\mathbf{u}}_z$.

THÉORÈME 8. Si le mouvement a lieu dans un champ central avec pour équation du mouvement

$$(71) \quad \ddot{\mathbf{r}} = \Phi(r)\hat{\mathbf{u}}_r$$

le mouvement cinétique relatif au centre O de ce champ est constant

En effet

$$(72) \quad \frac{1}{m} \frac{d\mathbf{M}}{dt} = \dot{\mathbf{r}} \wedge \dot{\mathbf{r}} + \mathbf{r} \wedge \ddot{\mathbf{r}}$$

L'hypothèse d'un champ central entraîne que $\ddot{\mathbf{r}}$ est colinéaire à \mathbf{r} , d'où le résultat.

Calculons maintenant l'aire balayée par le rayon vecteur au cours d'une temps Δt . La variation Δt définit un triangle dont l'aire est

$$(73) \quad S(t + \Delta t) - S(t) = \frac{1}{2}r^2(t)\dot{\varphi}\Delta t$$

qui est proportionnel au moment cinétique. On a donc

$$(74) \quad \frac{dS}{dt} = \text{const.}$$

Autrement dit, l'aire balayée par le rayon vecteur pendant des intervalles de temps égaux est constant. Un satellite passe donc plus de temps loin de l'origine, c'est-à-dire à l'apocentre, que proche du péricentre où r est petit. Cette loi formulée par Kepler n'est autre que la conservation du moment cinétique et n'est valable que pour un mouvement à force centrale.

EXERCICE 6. LE PROBLÈME À FORCE CENTRALE. Dans ce cas, on montre que la dynamique du système se ramène au cas 1d. On considère un mouvement plan dans un champ à force centrale $U(r) = -GMm/r = -k/r$.

(1) Montrer que les équations du mouvement peuvent s'écrire :

$$(75) \quad \begin{aligned} 2\dot{r}\dot{\varphi} + R\ddot{\varphi} &= 0 \\ m(\ddot{r} + r\dot{\varphi}^2) &= -\frac{dU}{dr} \end{aligned}$$

(2) Montrer qu'il existe un potentiel effectif $V(r)$ tel que la dynamique puisse être écrite comme celle d'un système 1d :

$$(76) \quad m\ddot{r} = -\frac{dV}{dr}$$

(3) Après avoir intégré les équations du mouvement (t en fonction de r), montrer que :

$$(77) \quad \frac{d\varphi}{dr} = \frac{M}{r^2\sqrt{2(E - V(r))}}$$

où E est l'énergie totale.

Le changement de variable $u = 1/r$ dans cette dernière intégrale permet de se ramener à la fonction arccos(x). On trouve les trajectoires en polaire avec

$$(78) \quad \frac{1}{r} = \frac{1}{p} (1 + e \cos \phi)$$

où

$$(79) \quad p = \frac{M^2}{2mk} \quad e = \sqrt{1 + \frac{2EM^2}{mk^2}}$$

On retrouve les coniques dont l'un des foyers est pris comme origine, la trajectoire étant elliptique pour $e < 1$ et hyperbolique pour $e > 1$.

Cet exercice permet de calculer les trajectoires d'un point matériel venant de l'infini avec $e > 1$. Nous sommes intéressés au cas d'une particule diffusée par le champ de gravitation solaire (masse M_\odot). La particule approchant la vitesse de la lumière, on a pour des angles de diffusion faibles

$$(80) \quad E = \frac{1}{2}mc^2 \quad \text{avec} \quad \frac{2EM^2}{mk^2} \gg 1$$

Comparant l'équation de la conique (78) avec son analogue relativiste (456), on trouve

$$(81) \quad \frac{p}{e^2} = \frac{GM}{c^2}$$

au lieu de $2GM/c^2$. On remarque que l'angle de déviation α est indépendant de la masse m de la particule qui est diffusée par la gravitation.

$$(82) \quad \alpha = \frac{2GM}{bc^2}$$

REMARQUE 4. *Cet exercice suggère qu'il existe un lien entre les symétries continues (ici, invariance par rotation autour de l'axe z) et une quantité conservée (la composante suivant z du moment cinétique). Nous verrons que c'est le cas et qu'il s'agit d'une conséquence d'un théorème dû à E. Noether.*

Mécanique de Lagrange et calcul variationnel

1. Introduction

L'espace qui nous intéressera ici est l'espace des configurations, c'est-à-dire l'espace des positions que le système peut atteindre. Voici quelques exemples :

- (1) Le pendule planaire : c'est le cercle S^1 , car le pendule est repéré par son angle.
- (2) Le pendule sphérique : c'est la sphère.
- (3) Le double pendule : $S^1 \times S^1$ (un tore).

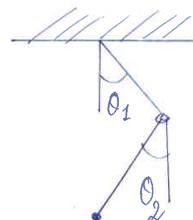


FIGURE 1

La dimension de cet espace des configurations est appelée nombre de degrés de liberté. On munira cet espace d'une structure de variété différentiable et riemannienne en introduisant des coordonnées. Cette variété est plongée dans un espace euclidien. Si cette variété de dimension k n'est pas pathologique, on peut définir en chaque point un espace tangent de dimension égale à la variété. Les déplacements infinitésimaux, et donc les vecteurs vitesses, parcourent cet espace tangent. L'union de tous les espaces tangents à une variété en tous points est baptisé fibré tangent.

On définit une courbe paramétrée sur cette variété par l'ensemble $\gamma = \{t, \mathbf{x} : \mathbf{x} = \mathbf{x}(t), t_0 \leq t \leq t_1\}$. Il est alors naturel de considérer les applications $L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t)$ où $L(a, b, c)$ (qui va du fibré dans \mathbb{R}) est une fonction de trois variables qui, à une courbe, associent un nombre réel. Une courbe étant donnée par une fonction, nous avons :

DÉFINITION 5. On appelle fonctionnelle toute application de l'espace des courbes sur la droite réelle. C'est donc une fonction de fonctions.

EXEMPLE 2. Soit (t_0, t_1) deux instants. L'application qui associe à chaque courbe la longueur de l'arc entre t_0 et t_1 :

$$(83) \quad \Phi[\gamma] = \int_{t_0}^{t_1} (1 + \dot{\mathbf{x}}^2)^{1/2} dt$$

est une fonctionnelle.

QUE VEUT-ON FAIRE ? Nous nous intéresserons aux fonctionnelles du type

$$(84) \quad \Phi[\gamma] = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) dt$$

Que vaut alors la variation de $\Phi[\gamma + h]$ lorsque la courbe est variée de γ à $\gamma + h$? Répondre à cette question généralise le calcul différentiel usuel. Nous savons que pour une fonction de variable réelle, nous avons $f(x + \epsilon) = f(x) + \epsilon f'(x) + o(\epsilon^2)$. Il faut donc définir l'équivalent de la dérivée $f'(x)$ pour une fonctionnelle. Cet équivalent sera donné par la dérivée fonctionnelle.

THÉORÈME 9. $\Phi[\gamma]$ est différentiable et sa différentielle est donnée par

$$(85) \quad F(h) = \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right] h(t) dt + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} h \right) \Big|_{t_0}^{t_1}$$

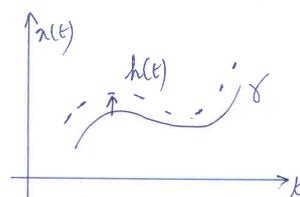


FIGURE 2

En effet :

$$(86) \quad \Phi[\gamma + h] - \Phi[\gamma] = \int_{t_0}^{t_1} dt [L(x + h, \dot{x} + \dot{h}, t) - L(x, \dot{x}, t)]$$

$$(87) \quad = \int_{t_0}^{t_1} dt \left[h \frac{\partial L}{\partial x} + \dot{h} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right] + O(h^2)$$

et on obtient le résultat par intégration par parties.

THÉORÈME 10. Une condition nécessaire et suffisante pour qu'une courbe soit extrémale sur l'espace des courbes passant par les points $x(t_0) = x_0$ et $x(t_1) = x_1$ (attention pas de variation aux deux extrémités) est que $x(t)$ soit solution de l'équation d'Euler :

$$(88) \quad \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0$$

sachant que les conditions aux limites en x_0 et x_1 sont données.

Compte tenu de ce qui précède, il suffit de démontrer :

THÉORÈME 11. Si $f(t)$ est une fonction continue et si pour toutes fonctions continues $h(t)$ telles que $h(t_0) = h(t_1) = 0$

$$(89) \quad \int_{t_0}^{t_1} dt f(t)h(t) = 0$$

alors, $f(t)$ est identiquement nulle.

La démonstration est simple. Il suffit de raisonner par l'absurde en supposant qu'il existe un point t^* avec $f(t^*) > 0$. Comme $f(t)$ est continue, il existe un voisinage Δ de t^* où $f(t) > 0$. On prend alors

$$(90) \quad \begin{aligned} h(t) &= 1 & \text{si } t \in \Delta/2 \\ h(t) &= 0 & \text{si } t \notin \Delta \end{aligned}$$

en complétant par continuité entre Δ et $\Delta/2$. On a alors

$$(91) \quad \int_{t_0}^{t_1} f(t)h(t)dt > \int_{t^*-\Delta/2}^{t^*+\Delta/2} f(t)dt$$

Mais la dernière intégrale est nécessairement positive, d'où la contradiction.

EXERCICE 7. Utiliser ce théorème pour obtenir l'équation d'une droite en coordonnées polaires.

On a donc la définition suivante :

DÉFINITION 6. Si

$$(92) \quad \Phi = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$$

où $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_n)$ sont des variables INDÉPENDANTES, on appelle équation d'Euler-Lagrange l'ensemble des n équations

$$(93) \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

EXERCICE 8. Supposer que nous voulions rendre extrémale la fonctionnelle suivante :

$$(94) \quad \Phi = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \ddot{\mathbf{q}}, t) dt$$

Montrer que les équations d'Euler-Lagrange de ce problème sont

$$(95) \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \ddot{q}_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Comparons maintenant les équations de la dynamique de Newton

$$(96) \quad \frac{d}{dt} [m_i \dot{q}_i] + \frac{\partial U}{\partial q_i} = 0$$

avec les équation d'Euler-Lagrange. Nous avons le principe de moindre action de Hamilton :

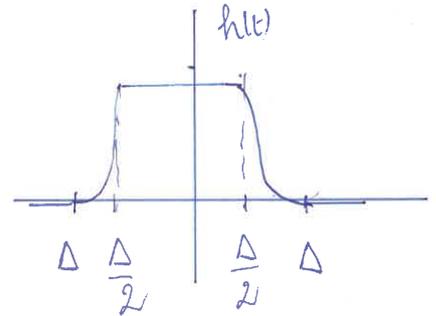


FIGURE 3

THÉORÈME 12. Les mouvements du système mécanique (96) coïncident avec les extrémals de la fonctionnelle

$$(97) \quad \Phi = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$$

où $L = T - U$ est la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle. Ce dernier théorème s'appelle aussi le principe du moindre action de Hamilton, car le mouvement $\mathbf{q}(t)$ minimise l'action $\int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt$. En mécanique, on appelle IMPULSION GÉNÉRALISÉE la quantité

$$(98) \quad p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

où q_i est la coordonnée généralisée.

EXERCICE 9. Considérer le double pendule de la figure 4 avec les masses $m_{1,2}$ dans un champ de gravité g . La rigidité des ressorts k est prise à 0. Établir les équations d'Euler-Lagrange. Noter que la méthode d'Euler-Lagrange est beaucoup plus simple que celle des forces dans l'équations de Newton, car nous n'avons pas à nous poser la question des signes pour les forces.

EXERCICE 10. On considère une perle de masse m astreinte à se déplacer sur un cercle vertical de rayon r . La gravité est dans la direction z . Le cercle tourne autour de z avec une vitesse angulaire ω . Il sera utile d'utiliser les coordonnées polaires.

- (1) Quelle est la vitesse. En déduire le Lagrangien ;
- (2) Quelles sont les positions d'équilibre ?
- (3) Quelles sont les équations du mouvement ?
- (4) En linéarisant le système différentiel autour des positions d'équilibre, étudier les petits mouvements au voisinage de ces positions. Montrer qu'il existe une valeur critique de la vitesse angulaire ω où le système change de comportement de façon continue (la valeur critique est donnée par $\sqrt{g/r}$).

2. Symmétries, Théorème de Noether

Commençons par :

EXERCICE 11. Soit un système abstrait possédant un Lagrangien $L(x, \dot{x})$ et donc une action

$$\int_{t_1}^{t_2} dt L(x, \dot{x})$$

On se donne une fonction $K(x, t)$. Démontrer que les équations d'Euler Lagrange pour le système possédant le Lagrangien $L(x, \dot{x})$ et pour le système ayant $L(x, \dot{x}) + dK/dt$ pour lagrangien sont les mêmes. Cette propriété montre qu'un lagrangien n'est défini qu'à une dérivée totale par rapport au temps près. C'est ce que nous avons déjà vu dans le cas de l'invariance de jauge pour le champ de Maxwell. On appelle ces symétries de symétries de jauge et elle joue un rôle fondamental en physique des hautes énergies. Nous n'aborderons pas ce point ici.

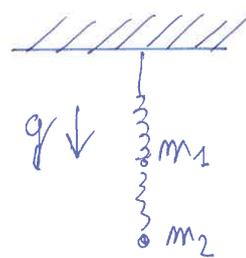


FIGURE 4 – Les équations d'Euler Lagrange permettent de s'affranchir du problème des signes dans le calcul des forces.

Donnons l'exemple d'un possédant une symétrie simple. Il sera utile de considérer un potentiel CENTRAL $V(r = \|\vec{x}\|)$. La particule étant de masse m , l'action est donnée par :

$$(99) \quad S[\vec{x}] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) \text{ avec } L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - V(\vec{x})$$

Les équations d'Euler-Lagrange sont alors

$$(100) \quad \frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0 \Leftrightarrow m \ddot{x}_i = - \frac{\partial}{\partial x_i} V(\vec{x}) \quad i = 1, 2$$

Considérons maintenant la transformation :

$$(101) \quad \vec{x} \rightarrow \vec{u} = -\vec{x}$$

Les équations du mouvement écrites avec \vec{u} au lieu de \vec{x} ont la même forme que (100)

$$(102) \quad m\ddot{u}_i = -\frac{\partial}{\partial u_i} V(\vec{u}) \quad i = 1, 2$$

car les dépendances fonctionnelles sont les mêmes (le potentiel est à force centrale, donc indépendant du signe), il n'y a pas de nouveau préfacteur etc. La substitution $x \rightarrow u$ est directe.

Si les équation du mouvement ont la même forme, leur solution sont identiques. On dit que l'opération $\vec{x} \rightarrow \vec{u}$ est une symétrie du système. Cette définition est générale. La transformation $\vec{x} \rightarrow u$ est a priori quelconque. Il s'agit ici d'une évidence mais qu'il peut être utile de formaliser en adoptant deux points de vue :

— POINT DE VUE PASSIF. On se donne un système et deux observateurs \mathcal{O} et \mathcal{O}' qui utilisent des règles différentes pour mesurer les positions. Si \mathcal{O} attribue \vec{x} , on supposera que \mathcal{O}' attribue au même point \vec{x}' . Chaque observateur calcule l'action dans son propre référentiel. Nous avons :

— D'une part, $S_{\mathcal{O}} = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\vec{x}, \dot{\vec{x}})$;

— Et, d'autre part, $S_{\mathcal{O}'} = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\vec{x}', \dot{\vec{x}}')$.

Une condition suffisante pour que la transformation $\mathcal{O} \rightarrow \mathcal{O}'$ réalise une opération de symétrie est que les lagrangiens ne diffèrent que d'une dérivée totale par rapport au temps (Cf. exercice plus haut)

$$(103) \quad L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}) = L(\vec{x}', \dot{\vec{x}}') + \frac{dK(\vec{x}')}{dt}$$

EXEMPLE 3. Pour le potentiel à force centrale les deux lagrangiens dans le système x et dans le système $u = -x$ ont même dépendance fonctionnelle

$$(104) \quad L(\dot{x}, x) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$$

$$(105) \quad L(\dot{u}, u) = \frac{1}{2}m\dot{u}^2 - V(u)$$

Mais il n'est pas évident dans le cas général que $V(x)$ ait la même forme fonctionnelle que $V(u)$.

Cette condition nous assure que les équations du mouvement sont effectivement invariantes et qu'elles gardent la même forme sous la transformation.

NOTE 1. Évidemment, toute opération n'est pas une opération de symétrie. Pour une transformation quelconque les deux observateurs peuvent calculer une action propre à leur système de référence et en déduire les équations du mouvement. Nécessairement, les actions ont les mêmes dans les deux repères (le système est identique, seuls les observateurs changent).

$$(106) \quad S_{\mathcal{O}} = S_{\mathcal{O}'}$$

car la transformation $\mathcal{O} \rightarrow \mathcal{O}'$ ne revient qu'à un simple changement de variable $\vec{x} \rightarrow \vec{x}'$ pour calculer l'intégrale. Mais les deux lagrangiens sont en général différents.

— POINT DE VUE ACTIF. Ici nous n'avons qu'un SEUL OBSERVATEUR. La transformation $\vec{x} \rightarrow \vec{x}''$ est une transformation effectuée dans le même système de référence lié à l'observateur. Ce dernier point de vue est généralement mieux adapté aux symétries continues qui peuvent être variée continûment en fonction d'un paramètre.

Voici maintenant quelques transformations simples :

(1) L'inversion $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. Cette transformation n'est pas continue.

(2) Une translation de vecteur $\epsilon\hat{c}$: $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \epsilon\hat{c}$. Cette transformation est continue car ϵ est aussi petit que l'on veut.

(3) Une rotation d'angle $\delta\omega$ autour d'un axe de vecteur unitaire \hat{a} :

$$(107) \quad \vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta\omega \vec{x} \wedge \hat{a}$$

Cette transformation est aussi continue, car elle dépend de deux paramètres $\delta\omega$.

On remarque que les deux dernières transformations peuvent être rendues infinitésimales (i.e. $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta\vec{x}$ par un choix convenable de ϵ ou de $\delta\omega$). On dit qu'il s'agit d'une TRANSFORMATION CONTINUE par opposition à une TRANSFORMATION DISCRÈTE comme l'inversion $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ qui ne possède pas de petit paramètre pouvant être varié. Dans ce dernier cas, la transformation

est discrète. Ces deux types de transformation peuvent être considérés du point de vue des symétries, mais les transformations continues permettent d'établir des propriétés importantes. CONCLUSION. Dans le point de vue actif, l'observateur associe un point \vec{x} à un point \vec{x}'' du même système de référence. On utilise donc le même Lagrangien où les coordonnées et les vitesses sont exprimées dans le repère ". Nous avons donc des équations du mouvement :

$$(108) \quad \frac{\partial L}{\partial x_i''} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i''} = 0$$

Mais si x_i'' est solution de cette équation, il n'est pas toujours vrai que x_i le soit. Si il l'est, nous avons une symétrie. Nous ne pouvons pas distinguer le graphe de $x(t)$ et le graphe de $x''(t)$. Autrement dit, pour que $\vec{x} \rightarrow \vec{x}''$ soit une symétrie, il faut que l'action soit égale pour les deux points associés par la transformation (à une dérivée totale par rapport au temps près) de telle manière que l'extremum de l'une soit aussi un extremum de l'autre :

$$(109) \quad S[\vec{x}] = S[\vec{x}''(\vec{x})] + \frac{dK}{dt}$$

EXEMPLE 4. EXEMPLE DES ROTATIONS

Considérons :

$$(110) \quad \vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{x} \text{ où } \delta\vec{x} = \delta\omega\vec{x} \wedge \hat{\mathbf{a}}$$

et calculons la variation infinitésimale du Lagrangien :

$$(111) \quad L(\vec{x}'', \dot{\vec{x}}'') = L(\vec{x} + \delta\vec{x}, \dot{\vec{x}} + \delta\dot{\vec{x}})$$

D'où :

$$(112) \quad \delta L = \delta\vec{x} \cdot \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} + \delta\dot{\vec{x}} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}}$$

avec

$$(113) \quad \delta\vec{x} \cdot \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} = \sum_i \delta x_i \frac{\partial L}{\partial x_i}$$

Mais :

$$(114) \quad \frac{d}{dt} \left[\delta x_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right] = \delta \dot{x}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} + \delta x_i \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right]$$

avec sommation sur les indices i . D'où (112) s'écrit :

$$(115) \quad \sum_i \delta x_i \left[\frac{\partial L}{\partial x_i} - \sum \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right] \right] + \sum \frac{d}{dt} \left[\delta x_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right]$$

Supposons maintenant que la rotation soit une symétrie du système. Alors les Lagrangien sont les mêmes et x_i est solution des équations du mouvement. La fonction dans la dérivée totale dans (115) conduit en effet à une variation de l'action si les instants t_1 et t_2 sont arbitraires (Voir ci-dessus). D'où :

$$(116) \quad \sum_i \frac{d}{dt} \left[\delta x_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right] = \frac{d}{dt} \left[\delta\vec{x} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \right] = 0$$

Mais

$$(117) \quad \begin{aligned} \delta\vec{x} &= \delta\omega\vec{x} \wedge \hat{\mathbf{a}} \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} &= m\dot{\vec{x}} \end{aligned}$$

Mais (pour vérifier cette égalité, prendre $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$).

$$(118) \quad [\vec{x} \wedge \hat{\mathbf{a}}] \cdot \dot{\vec{x}} = -\hat{\mathbf{a}} \cdot \vec{x} \wedge \dot{\vec{x}}$$

et donc d'après (117)

$$(119) \quad \frac{d}{dt} [x \wedge \dot{x}] = 0$$

La quantité qui est conservée n'est autre que le MOMENT CINÉTIQUE.

3. Théorème d'Émilie Noether

Ce théorème établi en 1918 par Émilie Noether exprime l'équivalence entre les lois de conservation et l'invariance des lois physiques due aux symétries. Il s'applique à la fois à des systèmes décrits par la mécanique lagrangienne (équations différentielles) et à des systèmes décrits par une théorie des champs (équations aux dérivées partielles). Ce théorème peut être énoncé de façon très simple. Auparavant, nous définissons :

DÉFINITION 7. *Un groupe de symétries continues est un groupe de symétries qui dépend d'un petit paramètre qui peut varier de façon infinitésimale. Par exemple, pour les rotations infinitésimales :*

$$(120) \quad \vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{x} \text{ où } \delta\vec{x} = \delta\omega\vec{x} \wedge \hat{\mathbf{a}}$$

le petit paramètre est l'angle $\delta\omega$ autour de l'axe de vecteur unitaire $\hat{\mathbf{a}}$. Nous avons aussi pour une translation infinitésimale de vecteur $\hat{\mathbf{a}}$:

$$(121) \quad \vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{x} \text{ où } \delta\vec{x} = s\hat{\mathbf{a}}$$

avec s comme paramètre aussi petit que désiré.

On peut donc dire que si $x(s)$, $\dot{x}(s)$ sont suffisamment régulières (la dérivée est prise par rapport au temps), il y a symétrie si

$$(122) \quad \left. \frac{\partial}{\partial s} L(x(s), \dot{x}(s), t) \right|_{s=0} = 0$$

où nous avons laissé tombé le terme de dérivée totale par rapport au temps.

THÉORÈME 13. *À tout groupe de symétries CONTINUES (qui peut donc être rendue infinitésimale), on peut trouver une quantité conservée (version mécanique). Quelques exemples : invariance du comportement sous rotation (moment cinétique), invariance du comportement sous translation dans l'espace (quantité de mouvement), invariance du comportement sous translation dans le temps (énergie totale).*

THÉORÈME 14. *On définit la charge de Noether comme*

$$(123) \quad Q = \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial q}{\partial s} \right|_{s=0}$$

Alors :

$$(124) \quad \left. \frac{dQ}{dt} = \frac{\partial L}{\partial s} \right|_{s=0} = 0$$

Autrement dit, Q est conservée (c'est une intégrale première).

En effet,

$$(125) \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial q}{\partial s} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \cdot \frac{\partial q}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial \dot{q}}{\partial s}$$

Utilisant les équation de Lagrange, cette quantité est égale à

$$(126) \quad \frac{\partial L}{\partial q} \cdot \frac{\partial q}{\partial s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \cdot \frac{\partial \dot{q}}{\partial s} = \frac{\partial L}{\partial s}$$

où la dernière propriété découle des règles de dérivées en chaîne. On obtient alors le résultat en prenant $s = 0$ dans l'équation précédente.

4. Géodésiques

Nous collons un élastique sur une surface de forme quelconque (c'est-à-dire une variété). Nous chauffons : l'élastique se contracte et si les deux points A et B des deux extrémités sont fixes, l'élastique prendra la forme de la courbe de plus court chemin entre A et B . Pour les avions, c'est le même problème : comment minimiser le temps de vol entre la ville de départ et la destination ? Lorsque la variété est une sphère, la réponse est donnée par le plus petit arc du grand cercle passant par ces deux points. Nous désirons calculer ce chemin dans le cas général.

Une courbe sur une variété est paramétrée $\{x_\alpha(\tau)\}$, où τ est le paramètre servant à localiser un point sur la courbe. L'abscisse curviligne est donnée par la métrique

$$(127) \quad ds = \sqrt{g_{\alpha\beta} \dot{x}_\alpha \dot{x}_\beta} d\tau$$

où les dérivées sont prises par rapport au paramètre τ . Par convention, on note pour simplifier les sommations

$$(128) \quad g_{\alpha\beta}\dot{x}_\alpha\dot{x}_\beta = \sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha\beta}\dot{x}_\alpha\dot{x}_\beta$$

La longueur de la courbe entre A et B est donc

$$(129) \quad \int_{\tau_A}^{\tau_B} ds = \int_{\tau_A}^{\tau_B} \sqrt{g_{\alpha\beta}\dot{x}_\alpha\dot{x}_\beta} d\tau$$

On note

$$(130) \quad L = \sqrt{g_{\alpha\beta}\dot{x}_\alpha\dot{x}_\beta}$$

le lagrangien curviligne. Par définition, si nous choisissons a posteriori de paramétrer la courbe par son abscisse curviligne s , alors

$$(131) \quad \sqrt{g_{\alpha\beta}\dot{x}_\alpha\dot{x}_\beta} = 1 = \text{const.}$$

où les dérivées sont maintenant prises par rapport à s . Ce choix simplifiera les équations le moment venu, mais pour l'instant, nous prenons un paramètre τ arbitraire. Le problème est donc de minimiser (129) et on écrit les équations d'Euler-Lagrange pour les n coordonnées x_α

$$(132) \quad \frac{\partial L}{\partial x_\alpha} - \frac{d}{d\tau} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\alpha} \right] \quad \alpha = 1, 2, \dots, n$$

La variété étant quelconque (c'est quand même une variété de Riemann pas trop singulière!), la métrique $g(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ où \mathbf{u} et \mathbf{v} sont deux vecteurs tangents dépend du point P . On a (en s'armant de courage) :

$$(133) \quad \frac{\partial}{\partial x_\alpha} [g_{\mu\nu}\dot{x}^\mu\dot{x}^\nu] = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} [g_{\mu\nu}] \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu$$

soit

$$(134) \quad \frac{\partial L}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{2L} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} [g_{\mu\nu}] \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu$$

Le tenseur $g_{\mu,\nu}$ étant symétrique

$$(135) \quad \frac{\partial}{\partial \dot{x}^\alpha} [g_{\mu\nu}\dot{x}^\mu\dot{x}^\nu] = 2g_{\alpha\mu}\dot{x}^\mu$$

On en déduit :

$$(136) \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^\alpha} = \frac{1}{L} g_{\alpha\mu}\dot{x}^\mu$$

Dérivant par rapport au paramètre τ

$$(137) \quad \frac{d}{d\tau} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^\alpha} \right] = -\frac{1}{L^2} \frac{dL}{d\tau} g_{\alpha\mu}\dot{x}^\mu + \frac{1}{L} \frac{\partial g_{\alpha\mu}}{\partial x^\nu} \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu + \frac{1}{L} g_{\alpha\mu}\ddot{x}^\mu$$

En écrivant

$$(138) \quad \begin{aligned} \frac{\partial g_{\alpha\mu}}{\partial x^\nu} \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g_{\alpha\nu}}{\partial x^\mu} \dot{x}^\nu\dot{x}^\mu + \frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial x^\nu} \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g_{\alpha\nu}}{\partial x^\mu} + \frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial x^\nu} \right) \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu \end{aligned}$$

l'équation d'Euler-Lagrange se met sous la forme

$$(139) \quad g_{\alpha\mu}\ddot{x}^\mu + \Gamma_{\mu\nu}^\alpha \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu = \frac{1}{L} \frac{dL}{d\tau}$$

où la connexion (symboles de Christoffel) est définie par rapport à la métrique :

$$(140) \quad \Gamma_{\mu\nu}^\alpha = \frac{1}{2} g^{\alpha\sigma} [\partial_\mu g_{\nu\sigma} + \partial_\nu g_{\mu\sigma} - \partial_\sigma g_{\mu\nu}]$$

Supposons maintenant que nous connaissions la solution $x_\alpha(\tau)$ des n équations différentielles du problème intermédiaire

$$(141) \quad g_{\alpha\mu}\ddot{x}^\mu + \Gamma_{\mu\nu}^\alpha \dot{x}^\mu\dot{x}^\nu = 0$$

alors la substitution $x(\tau) \rightarrow x(s)$, où s est l'abscisse curviligne de cette solution intermédiaire, donne la solution de (139) sous forme paramétrée

$$(142) \quad s \rightarrow (x^1(\tau(s)), x^2(\tau(s)), \dots, x^n(\tau(s)))$$

car lorsque τ est l'abscisse curviligne s , L est constant et donc de dérivée nulle.

Du point de vue pragmatique, (141) permet de remplir un fichier à deux colonnes τ, x . On calcule pour chaque point l'abscisse curviligne que l'on met en colonne 3. L'association de la colonne 3 à la colonne 2 donne le résultat.

Remarquons finalement que le tenseur métrique g (donc l'équation des géodésiques) ne contient de l'information que sur la géométrie de la variété. Elle en contient aucune information quant à l'espace où cette variété est plongée. On peut donc étudier les géodésiques sur des variétés Riemanniennes (c'est-à-dire équipées d'une tenseur métrique) indépendamment de tout plongement. Cet aspect est remarquable est utilisé en relativité.

EXERCICE 12. On se donne les coordonnées polaires (r, ϕ) .

(1) Quel est le la fonction de Lagrange $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} \|\dot{x}\|^2$ dans ce système de coordonnées ?

(2) Calculer le tenseur métrique et les symboles de Christoffel.

(3) Quelles sont alors les équations de Lagrange des géodésiques ?

5. Quelques problèmes variationnels

5.1. Loi de Snell-Descartes. Selon le principe de Fermat la lumière traverse l'espace entre un point A et B en un temps *minimal*. Dans ce cas, les chemins virtuels correspondent aux trajectoires des rayons lumineux pour lesquels le temps de parcours serait plus long. Par suite, le principe de Fermat est un principe d'extremum, et nous montrons que la loi de réfraction de la lumière est une conséquence de l'équations d'Euler.

Si l'espace est homogène et isotrope, le chemin réel est une droite. Par contre, si l'espace est inhomogène, comme c'est le cas pour deux milieux d'indices optiques différents, ou si il est anisotrope, comme c'est le cas dans les cristaux, la trajectoire des rayons lumineux n'est plus une droite. Pour un milieu inhomogène, la vitesse dépend du point, alors que pour un milieu anisotrope, elle dépend de la direction.

Prenons deux milieux d'indice respectif n_1 et n_2 . Pour simplifier les notations, nous supposons que l'interface correspond au plan $x = 0$. Montrons qu'à l'interface 1-2

$$(143) \quad n_1 \sin(\phi_1) = n_2 \sin(\phi_2)$$

Plaçons nous dans le plan des rayons lumineux, et donnons nous 2 points A et B quelconques, mais dont les coordonnées sont fixées une fois pour toutes. Considérons une courbe joignant A et B , et dont un élément d'arc est donné par ds . Le temps mis par la lumière pour parcourir cet arc est

$$(144) \quad t_{A \rightarrow B} = \int_A^B \frac{ds}{v}$$

Par définition de l'abscisse curviligne, ds est reliée à l'équation de la courbe $y(x)$ par

$$(145) \quad ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = dx \sqrt{1 + \dot{y}^2}$$

D'autre part, la vitesse de la lumière dans un indice de réfraction $n(x)$ est $c(x) = \frac{c}{n(x)}$, de telle sorte que le temps mis par la lumière pour parcourir la distance AB sur l'arc $y = y(x)$ est

$$(146) \quad t_{A \rightarrow B} = \int_{x_A}^{x_B} \frac{c}{n(x)} \sqrt{1 + \dot{y}^2} dx$$

Écrivons l'équation d'Euler, ce qui donne la trajectoire comme une solution de l'équation différentielle

$$(147) \quad \frac{d}{dx} \left[\frac{n(x)}{c} \frac{\dot{y}}{\sqrt{1 + (\dot{y})^2}} \right] = 0$$

L'interprétation géométrique de cette équation est donnée par l'angle entre la tangente à la courbe $y(x)$ et l'axe ox . Par définition,

$$(148) \quad \tan(\phi(x)) = \frac{dy}{dx}$$

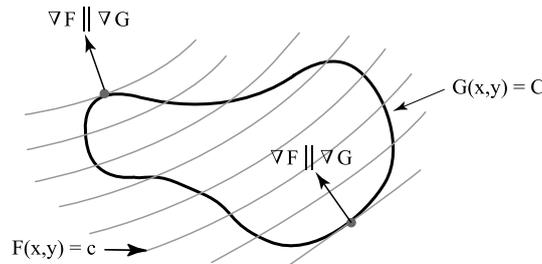


FIGURE 5 – On cherche le maximum de $F(x, y)$ lorsqu'on parcourt la courbe $G(x, y) = \text{const.}$ Les extrema sont atteints lorsque $G(x, y) = \text{const.}$ est tangente à une ligne de niveau, car on approche le point de tangente en restant du MÊME côté de la courbe de niveau. Dans ce cas, les vecteurs gradients qui sont normaux aux courbes sont nécessairement colinéaires au point où F est extremum lorsqu'on parcourt G . Cette condition de co-linéarité est donnée par un multiplicateur de Lagrange.

Utilisant cette définition, l'équation d'Euler revient donc à

$$(149) \quad \frac{d}{dx} [n(x) \sin(\phi(x))] = 0$$

Si le milieu a un indice de réfraction constant, on retrouve que les chemins optiques sont des droites. Par contre, à l'interface $x = 0$ de deux milieux d'indice n_1 et n_2 , on obtient une variation de l'angle d'incidence ϕ qui compense la variation de l'indice de refraction n

$$(150) \quad \frac{\Delta [n(x) \sin(\phi(x))]}{\Delta x} = 0$$

soit

$$(151) \quad n_1 \sin(\phi_1) = n_2 \sin(\phi_2)$$

qui est la loi cherchée.

5.2. Variation sous contraintes.

THÉORÈME 15. *On rappelle le problème suivant : Nous désirons trouver les extrema de fonction de deux variables $F(x, y)$ sous la contrainte $G(x, y) = \text{const.}$ Le raisonnement de la figure 5 démontre que ce problème revient à trouver la solution de :*

$$(152) \quad \begin{cases} \nabla F = \lambda \nabla G \\ G(x, y) = C \end{cases}$$

où λ est le coefficient de proportionnalité entre les deux normales. Dans la pratique, la première équation est un système de deux équations à deux inconnues pour un λ donné. On trouve la valeur du multiplicateur de Lagrange λ en utilisant la dernière équation.

L'interprétation géométrique de cette propriété est illustrée en Fig. 5. Pour que le problème admette une solution, il faut que les vecteurs normaux aux deux variétés soient colinéaires. Passons maintenant au problème variationnel qui nous intéresse mais qui diffère du problème précédent au sens suivant. On cherche la fonction $y_0(x)$ rendant stationnaire la fonctionnelle

$$(153) \quad F[y] = \int_{x_0}^{x_1} \mathcal{F}[y(x), \dot{y}(x)] dx$$

mais sous la contrainte suivante

$$(154) \quad G[y] = \int_{x_0}^{x_1} \mathcal{G}[y(x), \dot{y}(x)] dx = C$$

où C est une constante imposée par l'expérience. La différence par rapport au cas précédent est due à la contrainte : celle-ci restreint l'espace des déplacements virtuels possibles, puisque la variation $y(x) = y_0(x) + \epsilon(x)$ satisfait à l'équation (154). Nous allons montrer que pour résoudre ce problème, il suffit d'introduire un problème intermédiaire avec des multiplicateurs de Lagrange.

Pour résoudre ce type de problème, on introduit la fonctionnelle annexe

$$(155) \quad W[y, \lambda] = F[y] + \lambda G[y]$$

où λ est un nombre réel. Les équations de Lagrange pour la fonctionnelle W

$$(156) \quad \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial (\mathcal{F} + \lambda \mathcal{G})}{\partial \dot{y}} \right] - \frac{\partial (\mathcal{F} + \lambda \mathcal{G})}{\partial y} = 0$$

ont pour solutions des familles à deux paramètres qui dépendent évidemment du nombre réel λ . Notons $y_n(x, \lambda)$ ces solutions, l'indice n servant à indexer les différentes familles. Le multiplicateur de Lagrange λ est choisi pour que les solutions satisfassent à la contrainte. Autrement dit, λ est solution de

$$(157) \quad \int_{x_0}^{x_1} \mathcal{G} [y_n(x, \lambda), \dot{y}_n(x, \lambda)] dx = C$$

DÉMONSTRATION. Considérons un déplacement virtuel δy . Au premier ordre en δy , les fonctionnelles F et G varient comme

$$(158) \quad \begin{aligned} \delta F &= \int_{x_0}^{x_1} \delta y(x) [\mathcal{F}]_y dx \\ \delta G &= \int_{x_0}^{x_1} \delta y(x) [\mathcal{G}]_y dx \end{aligned}$$

où nous avons employé la notation

$$(159) \quad [\mathcal{F}]_y = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \dot{y}} \right]$$

pour la dérivée fonctionnelle. Pour poursuivre, transformons les intégrales en sommes discrètes avec un pas Δx . Les variations δF et δG sont nulles, si les valeurs δy_i des déplacements virtuels prises au points x_i , $x_0 \leq x_i \leq x_N$ obéissent simultanément aux deux équations ($y_i = y(x_i)$)

$$(160) \quad \begin{aligned} \sum_i \delta y_i [\mathcal{F}]_{y_i} &= 0 \\ \sum_i \delta y_i [\mathcal{G}]_{y_i} &= 0 \end{aligned}$$

Du point de vue géométrique, les deux équations précédentes décrivent deux hyperplans dans l'espace des coordonnées δy_i . Donnons nous un déplacement virtuel $(\delta y_i)_{1 \leq i \leq N}$ respectant la contrainte, c'est-à-dire appartenant au deuxième hyperplan. Pour que la variation de F soit aussi nulle, il faut que ce déplacement appartienne aussi au premier hyperplan, décrit par la première équation. Cette condition ne peut être satisfaite que si les deux hyperplans sont identiques, c'est-à-dire que si les coefficients $[\mathcal{F}]_{y_i}$ et $[\mathcal{G}]_{y_i}$ sont proportionnels. Pour que le problème ait une solution, il faut donc qu'il existe un réel λ tel que

$$(161) \quad \begin{aligned} [\mathcal{F}]_y + \lambda [\mathcal{G}]_y &= 0 \\ \text{avec } \int_{x_0}^{x_1} \mathcal{G} [y(x), \dot{y}(x)] dx &= C \end{aligned}$$

Nous avons discuté le cas du calcul variationnel sous une seule contrainte. Certaines situations peuvent exiger qu'il faille chercher les extrema d'une fonctionnelle sous plusieurs contraintes. Dans ce cas, on introduit autant de multiplicateurs de Lagrange qu'il y a de contraintes. Celles-ci sont toutes ajustées pour que la solution satisfasse aux contraintes.

6. Lagrangien d'une particule chargée dans un champ électromagnétique

Nous considérons une particule chargée (charge q) dans un \mathbf{E} , \mathbf{B} . La particule est donc soumise à une force de Lorentz :

$$(162) \quad m\ddot{\mathbf{x}} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B}$$

Nous cherchons un Lagrangien effectif tel que les équations (162) correspondent aux équations d'Euler d'une action. Ce lagrangien n'est pas immédiat, car la force de Lorentz dépend de la vitesse \mathbf{v} de la particule. Nous démontrons que ce est :

$$(163) \quad L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - U(\mathbf{v}, \mathbf{B})$$

avec un potentiel effectif :

$$(164) \quad U(\mathbf{v}, \mathbf{B}) = q(\Phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$$

On remarque que le potentiel effectif dépend des deux potentiels scalaires et vectoriels (Φ , \mathbf{A}) et non directement des champs (\mathbf{E} , \mathbf{B}). Dans l'énergie potentielle, la particule interagit avec les par un terme qui multiplie le courant, proportionnel à la vitesse, aux potentiels.

DÉMONSTRATION. On introduit les potentiels de jauge

$$(165) \quad \begin{aligned} \mathbf{B} &= \nabla \wedge \mathbf{A} \\ \vec{E} &= -\nabla\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \end{aligned}$$

Nous avons :

$$(166) \quad \begin{aligned} \mathbf{v} \wedge (\nabla \wedge \mathbf{A}) &= \vec{\nabla}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{v} \cdot \vec{\nabla})\mathbf{A} \\ &= \frac{\partial}{\partial \vec{x}}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \vec{x}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \vec{x}}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \vec{x}} \end{aligned}$$

Cette dernière égalité nous permet de transformer l'équation du mouvement

$$(167) \quad \begin{aligned} m\ddot{\mathbf{x}} &= q \left(-\frac{d\Phi}{d\vec{x}} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + q \frac{\partial}{\partial \vec{x}}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) - q \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \vec{x}} \\ &= q \left(-\frac{\partial}{\partial \vec{x}} [\Phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}] - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \vec{x}} \right) \\ &= q \left(-\frac{\partial}{\partial \vec{x}} [\Phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}] - \frac{d\mathbf{A}}{dt} \right) \end{aligned}$$

Enfin :

$$(168) \quad \mathbf{A} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - \Phi)$$

car Φ ne dépend pas de \mathbf{v} . D'où :

$$(169) \quad m\ddot{\mathbf{x}} = q \left(-\frac{\partial}{\partial \vec{x}} [\Phi - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}] - \frac{d}{dt} [\Phi - \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}] \right)$$

qui sont les équations du mouvement obtenues à partir du Lagrangien où le potentiel \mathbf{A} interagit avec le courant $q\mathbf{v}$:

$$(170) \quad L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - q\phi(t, \vec{x}) + q\mathbf{A}(t, \vec{x}) \cdot \mathbf{v}$$

REMARQUE 5. *En électromagnétisme, les équations de Maxwell sont invariantes sous le changement de jauge.*

$$(171) \quad \begin{aligned} \Phi &\rightarrow \Phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \\ \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi \end{aligned}$$

Comme les champs restent inchangés sous cette transformation, la force de Lorentz, elle aussi, est nécessairement invariante de jauge. Qu'en est-il du principe de moindre action ? Celui est-il aussi invariant de jauge ?

Écrivons l'action en séparant le terme d'interaction S_I de la particule avec les potentiels de jauge.

$$(172) \quad S = S_0 + S_I = S_0 - q \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\Phi - \mathbf{A} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} \right]$$

Il sera utile de considérer la notation des quadrivecteurs empruntée à la relativité (0 est pour la partie scalaire et $i = 1, 2, 3$ pour la partie vectorielle) :

$$(173) \quad u_\alpha v^\alpha = u_0 v^0 + \sum_{i=1,3} u_i v^i$$

avec

$$(174) \quad \partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$$

Nous avons donc

$$(175) \quad S_I = -q \int_{t_1}^{t_2} dx^\alpha A_\alpha$$

avec

$$(176) \quad A_\alpha = (-\phi, \mathbf{A}) \text{ et } A^\alpha = (\phi, \mathbf{A})$$

$$(177) \quad dx^\alpha = (dt, dx, dy, dz) \text{ et } dx_\alpha = (-dt, dx, dy, dz)$$

$$(178) \quad J^\alpha = (\rho, \vec{J}) \text{ pour le quadri-vecteur courant}$$

Avec ses notations, un changement de jauge prend une forme très simple

$$(179) \quad A_\alpha \rightarrow A_\alpha + \partial_\alpha \chi$$

et la partie d'interaction se transforme comme

$$(180) \quad S_I \rightarrow S_I + q \int \partial_\alpha \chi dx^\alpha = S_I + q(\chi(B) - \chi(A))$$

Car la dernière intégrale n'est autre que l'intégrale d'une dérivée. Elle est donc immédiatement intégrée ! En conclusion, sous transformation de jauge, S_I n'est modifié que par une constante. Or, une constante ne peut pas changer la condition d'extremum (rajouter une constante à la fonction $f(x)$ ne change pas la position de son extremum). On dira que le principe de moindre action est invariant de jauge car la condition d'extremum ne peut être modifiée par l'ajout de cette constante.

7. L'instabilité d'Euler

On considère une tige élastique encastree à l'extrémité O dans un plan horizontal. La tige ne se déforme que dans le plan Oxy . On note l sa longueur. Cette tige supporte en son extrémité A une masse très grande devant la masse de la tige qui sera donc négligée par la suite. Nous paramétrisons la flèche à l'aide l'angle θ entre la tangente et l'axe Oy . Nous désirons connaître la forme de la tige en fonction de la masse m .

La forme de la tige minimise l'énergie potentielle de l'ensemble tige + masse. Nous allons faire le calcul en utilisant l'approche variationnelle. Cette énergie potentielle est la somme de deux termes :

- (1) D'une part, une énergie de flexion de la tige qui résiste à la flexion (courbure) ;
- (2) Une énergie potentielle de gravité, d'autre part, due au poids de la masse en A .

L'énergie de flexion dépend de la dérivée de l'angle $\theta(s)$ prise suivant l'abscisse curviligne s : une droite d'angle $\theta(s)$ constant ne coûte rien en énergie de flexion et tout est dans la dérivée ! Autrement dit, la courbure est une variation d'angle lorsqu'on se déplace sur la tige et c'est cette variation d'angle en fonction de l'abscisse curviligne qui compte. Nous arrivons donc à cette conclusion : l'énergie de flexion dépend de $\dot{\theta}(s)$ intégrée sur la tige. Par ailleurs, cette énergie de flexion est nécessairement invariante sous le changement $\theta(s) \rightarrow -\theta(s)$, car fléchir la tige dans le sens horaire ou antihoraire coûte la même énergie. Autrement dit, l'énergie de flexion est une fonctionnelle de $\dot{\theta}(s)^2$, car elle est invariante sous la symétrie $\theta(s) \rightarrow -\theta(s)$. Sommant

$$(181) \quad E_{flexion} = \frac{1}{2} \kappa \int_0^l ds \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2$$

où κ est une constante qui dépend du matériau. Par ailleurs, l'énergie potentielle due à la gravité est $+mgy(l)$ et cette énergie potentielle est bien minimale pour $y = 0$. Comme nous voulons avoir une fonctionnelle de l'angle $\theta(s)$, écrivons :

$$(182) \quad E_{potentielle} = mgy(l) = mg \int_0^l ds \frac{dy}{ds} = mg \int_0^l ds \cos \theta(s)$$

L'énergie potentielle totale est donc bien une fonctionnelle de l'angle $\theta(s)$:

$$(183) \quad E_{totale}[\theta] = mg \int_0^l ds \cos \theta(s) + \frac{1}{2} \kappa \int_0^l ds \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2$$

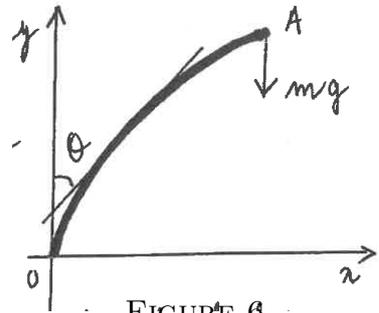


FIGURE 6

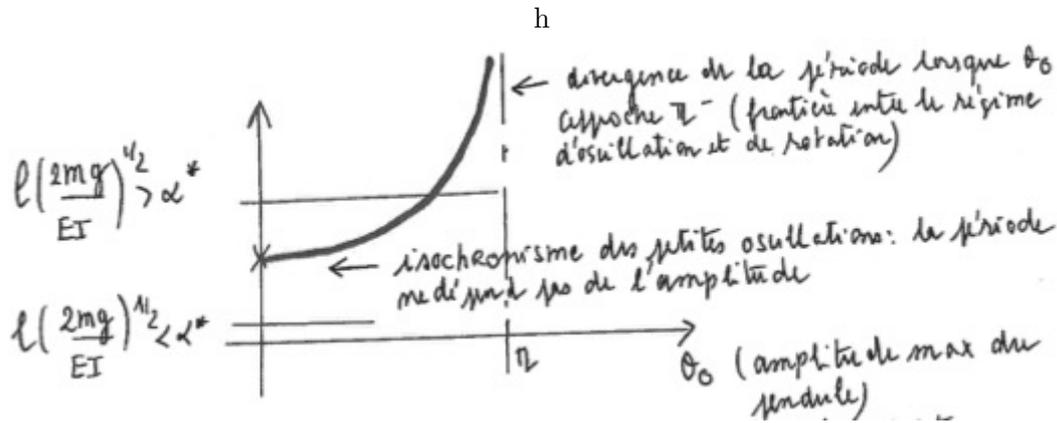


FIGURE 7 – Par définition, $\kappa = EI$ où E est le module d'Young et I le moment d'inertie.

Le calcul variationnel permet de déterminer l'angle $\theta(s)$ qui rend cette fonctionnelle extrémale. Avant de pousser le calcul plus loin, il est impératif de connaître les conditions aux limites, car ce sont elles qui vont fixer les variations $\delta\theta$ admissibles.

- En $s = 0$ la tige est encastée (sinon, le problème perd évidemment tout son sens). L'angle est donc fixé en O et la variation $\theta \rightarrow \theta + \delta\theta$ ne peut changer cet angle. D'où : $\delta\theta(s = 0) = 0$;
- En A , l'extrémité est libre. Il n'y a pas de moment qui fixe la variation de $\theta(l)$ en A . On ne pince pas la tige ! Nous admettrons que cette condition revient à imposer $\dot{\theta}(s = l) = 0$. Donc, $\delta\dot{\theta}(s = l) = 0$.

Au premier ordre dans les variations, nous avons :

$$(184) \quad \begin{aligned} 2 \int_0^l \dot{\theta}(s) \delta\theta(s) &= 2 [\dot{\theta}(s) \delta\theta(s)]_0^l - 2 \int_0^l ds \ddot{\theta}(s) \delta\theta(s) \\ \int_0^l \cos(\theta + \delta\theta(s)) &= \int_0^l \cos \theta(s) - \int_0^l ds \delta\theta(s) \sin \theta(s) \end{aligned}$$

En raison des conditions aux limites, le premier terme entre crochets sur la première ligne est nul. L'angle $\theta(s)$ rend donc l'énergie potentielle extrémale, si $\theta(s)$ satisfait à l'équation différentielle

$$(185) \quad \kappa \ddot{\theta}(s) + mg \sin \theta(s) = 0$$

qui n'est autre que l'équation du pendule. Comme auparavant, il suffit de multiplier les deux membres par $\dot{\theta}(s)$. Si θ_0 est l'angle de la flèche en A

$$(186) \quad \frac{1}{2} \dot{\theta}(s)^2 = \frac{mg}{\kappa} (\cos \theta(s) - \cos \theta_0)^{1/2}$$

ou, en prenant la racine carrée,

$$(187) \quad l \left(\frac{2mg}{\kappa} \right)^{1/2} = \int_0^{\theta_0} \frac{d\theta}{(\cos \theta - \cos \theta_0)^{1/2}}$$

L'intégrale de droite est tracée en Fig. 7. Lorsque $\theta \approx 0$, elle atteint une valeur finie non nulle. Par contre, comme pour le pendule, lorsque θ tend vers π , l'intégrale diverge (cette intégrale donne la période du pendule, d'où la divergence). Notons α^* la valeur minimale de cette intégrale obtenue pour $\theta_0 \rightarrow 0^1$.

- Si $l \left(\frac{2mg}{\kappa} \right)^{1/2} < \alpha^*$, le problème (450) n'a pas de solution. La seule solution est évidemment $\theta_0 = 0$: la tige reste droite.
- Si $l \left(\frac{2mg}{\kappa} \right)^{1/2} > \alpha^*$, alors le problème (450) permet de déterminer une autre solution que la valeur nulle. La tige est fléchie.

1. Lorsque θ_0 est faible, l'intégrale se ramène à

$$(188) \quad \int_0^{\theta_0} \frac{\sqrt{2} d\theta}{\sqrt{\theta_0^2 - \theta^2}} = \pi / \sqrt{2}$$

indépendant de θ_0 .

EN CONCLUSION : Lorsqu'on augmente la masse m , il y a un changement d'état de l'état de la barre (bifurcation) qui passe continûment de l'état droit à l'état fléchi au-delà d'un seuil. Le fait qu'il existe un seuil pour la masse m est liée à une symétrie. L'énergie de flexion du système est invariante sous le changement $\theta \rightarrow -\theta$, mais l'état du système aura une symétrie inférieure (il choisit l'un ou l'autre des flexions). On dit que la symétrie est brisée.

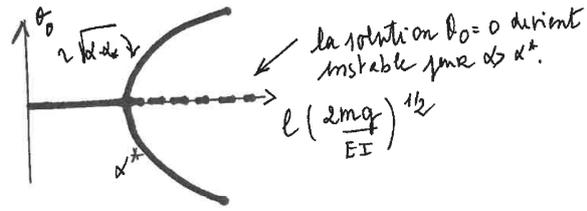


FIGURE 8

EXERCICE 13. Rappelons le problème du calcul des variations : La fonction $f(x, y, y')$ étant donnée, il s'agit de trouver la fonction $y(x)$ rendant extrémale l'intégrale :

$$(189) \quad I = \int_{x_1}^{x_2} f(x, y, y') dx$$

avec les conditions

$$(190) \quad \begin{cases} y(x_1) = y_1 \\ y(x_2) = y_2 \end{cases}$$

(1) Démontrer le théorème suivant (Beltrami) : Si la fonction $f = f(x, y, y')$ est explicitement indépendante de x pour $x \in [x_1, x_2]$, une condition nécessaire pour que l'intégrale (189) ait un extremum est qu'elle soit solution de l'équation :

$$(191) \quad y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f = C$$

où C est une constante. Cette équation est une équation différentielle du premier ordre. C'est donc un facteur intégrant de l'équation d'Euler-Lagrange qui est une équation différentielle du deuxième ordre.

EXERCICE 14. Le "Half-Pipe" de Bernoulli : nous désirons trouver la solution du problème suivant : Soient A et B deux points situés dans un plan vertical. Quelle est la courbe parcourue par un mobile sous l'action de la gravité qui relie A à B en un temps minimal ?

(1) Montrer que l'intégrale à minimiser est :

$$(192) \quad I[y] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{y}} dx$$

(2) Utilisant le théorème de Bernoulli, montrer que $y(x)$ obéit à l'équation différentielle :

$$(193) \quad \frac{dy}{dx} = \sqrt{\frac{k-y}{y}}$$

où $k = 1/C^2$.

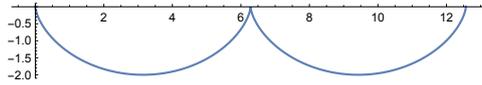
(3) Pour intégrer cette équation, on posera $y = k(\sin \phi)^2$. En déduire $x = x(\phi)$ lorsque A est choisi comme l'origine du système de coordonnées. La courbe obtenue est appelée arc de cycloïde.

EXERCICE 15. (1) La cycloïde possède une autre propriété intéressante découverte par Christian Huygens. Rappelons que celle-ci peut être paramétrisée comme :

$$(194) \quad \begin{cases} x(\theta) = a(\theta - \sin \theta) \\ y(\theta) = a(1 - \cos \theta) \end{cases}$$

Considérons un mobile astreint à se déplacer sur cette cycloïde et lâché sans vitesse initiale au point $(x(\theta_0), y(\theta_0))$. L'axe des y est orientée dans le sens de la gravité. Le mobile atteindra le point $x(2\pi - \theta)$, $y(2\pi - \theta)$ pour ensuite revenir. Le but du problème est de montrer que la période d'oscillation est indépendante de θ_0 .

$$(195) \quad T(\theta_0) = 4\pi \sqrt{\frac{a}{g}}$$

FIGURE 9 – Deux arcs de cycloïde pour $\theta \in [0, 4\pi]$.

(2) Soit $v_y(\theta)$ la composante de la vitesse du mobile suivant y au point d'abscisse θ . Rappelons :

$$(196) \quad v_y(\theta) = v(\theta) \sin \phi$$

où ϕ est l'angle de la tangente avec Ox . Utilisant la conservation de l'énergie, montrer :

$$(197) \quad v(\theta) = \sqrt{2ga} \sqrt{\cos \theta_0 - \cos \theta}$$

et

$$(198) \quad v_y(\theta) = \sqrt{ga} \sqrt{\cos \theta_0 - \cos \theta} \sqrt{1 + \cos \theta}$$

(3) La période est égale à $4\tau(\theta_0)$ où $\tau(\theta_0)$ est le temps mis pour parcourir l'intervalle $[\theta_0, \pi]$, où $\theta = \pi$ est le point le plus bas sur la cycloïde. On a

$$(199) \quad \tau(\theta_0) = \int_0^{\tau(\theta_0)} dt = \int_{y(\theta_0)}^{y(\pi)} \frac{dy}{v_y(\theta)} = \int_{\theta_0}^{\pi} \frac{1}{v_y(\theta)} \frac{dy}{d\theta} d\theta$$

En déduire :

$$(200) \quad \tau(\theta_0) = \sqrt{\frac{a}{g}} I(\theta_0)$$

où

$$(201) \quad I(\theta_0) = \int_{\theta_0}^{\pi} \frac{\sin \theta/2}{\sqrt{\cos^2 \theta_0/2 - \cos^2 \theta/2}}$$

(4) Faire le changement de variable

$$(202) \quad u = \frac{\cos \theta}{\cos \theta/2}$$

et conclure.

Nous donnons sans démonstration le théorème suivant :

THÉORÈME 16. Une fonction $y(x)$ est un extremum de la fonctionnelle

$$I = \int_{x_1}^{x_2} f(x, y, y') dx$$

sous la contrainte :

$$J = \int_{x_1}^{x_2} g(x, y, y') dx = C$$

si :

(1) $y_\lambda(x)$ rend la fonctionnelle

$$(203) \quad F = \int_{x_1}^{x_2} [f(x, y, y') - \lambda g(x, y, y')] dx$$

extrémale. Donc, f est solution des équations d'Euler-Lagrange pour le problème F où λ est un paramètre.

(2) Le paramètre λ est calculé pour satisfaire à la contrainte

$$(204) \quad \int_{x_1}^{x_2} g(x, y_\lambda, y'_\lambda) dx = C$$

Même si nous ne donnons pas de démonstration, nous pouvons comprendre pourquoi ce théorème PEUT être vrai. Si f rend la fonctionnelle F extrémale quelque soit λ , alors f rend F extrémale vis-à-vis de toutes les variations. En particulier, f rend F extrémale vis-à-vis des variations qui respectent la contrainte J . Si λ est ajusté pour que f respecte la contrainte, alors nous avons la solution de notre problème, car dans ce sous-espace, les variations de F et celles de I sont identiques.

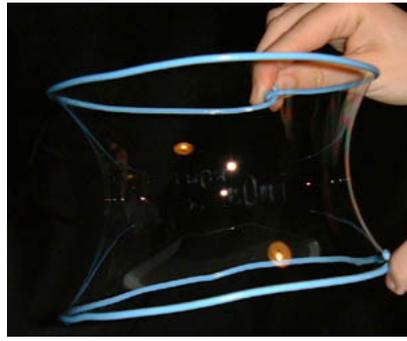


FIGURE 10 – Deux cercles parallèles, coaxiaux, en fil de fer... ou de cuivre ...
Trempez dans l'eau savonneuse, vous aurez une Caténoïde!

REMARQUE 6. *Il est évident que ce théorème est aveugle au cas où le minimum de la fonctionnelle est un minimum de bord (une fonction définie sur un intervalle peut avoir son minimum localisé sur l'une des bornes de l'intervalle, sans que la dérivée s'annule).*

EXERCICE 16. : FORME D'UNE CÂBLE PESANT. *On considère un câble pesant de densité linéaire σ (masse par unité de longueur) et de longueur l est suspendu sur deux points en $x_1 = -a$ et $x_2 = +a$ à hauteur $h = 0$. Quelle est la forme que prend le câble? On introduira un multiplicateur de Lagrange T . Quelle est l'interprétation que vous pouvez donner à T ? (il sera utile de tracer à la main le graphe de l en fonction de T).*

EXERCICE 17. *Il s'agit de trouver la surface d'aire minimale qui s'appuie sur deux cercles de rayon R (Problème de Plateau). On cherchera les solutions à symétries de révolution. Il s'agit de trouver les solutions qui rendent extrémale la fonctionnelle*

$$(205) \quad \mathcal{A} = 2\pi \int_{-x_1}^{+x_1} y(1+y'^2)^{1/2} dx$$

(1) *Au risque de tuer le suspens, montrer que la caténoïde*

$$(206) \quad y(x) = a \cosh(x/a)$$

est solution (on prend une origine située à la distance d des deux cercles).

(2) *Cette solution est-elle unique?*

(3) *Y-a-t-il toujours une solution?*

(4) *Utilisez le logiciel "Evolver" pour faire l'expérience.*

Dynamique des champs classiques : passage au continuum et symétries

1. Introduction

Nous considérons une chaîne de masses m dont les positions sont équidistantes avec un pas du réseau a . Chaque masse indiquée par un entier n est reliée à ses proches voisines par un ressort. Enfin, la chaîne est supposée infinie. On note q_n le déplacement relatif de la masse n par rapport à sa position d'équilibre. Une fois la position d'une masse n perturbée, une onde se propage le long de la chaîne. On s'intéresse ici à la variation $q_n(t)$, $-\infty < n < +\infty$, le long de la chaîne et nous écrirons les équations du mouvement pour un indice n quelconque.

Dans la limite où la longueur d'onde caractéristique de cette onde est grande devant le pas du réseau, la position $q_n(t)$ peut être vue comme une fonction de la position x avec $q(x, t)$, où x parcourt la droite réelle. Du point de vue des équations du mouvement, nous sommes passés d'un système avec un Lagrangien ayant un nombre arbitrairement grand mais DISCRET de degrés de liberté $L(\dots, \dot{q}_n, \dots)$ à un Lagrangien qui est une fonctionnelle de la position et de ses dérivées $L[q(x, t), \dot{q}_x(x, t), \dot{q}_t(x, t)]$. Ce passage du cas discret au cas continu (les variables dynamiques deviennent des champs) est l'objet de ce chapitre. Nous désirons établir les équations du mouvement à partir du principe d'extremum de l'action en utilisant les résultats du chapitre sur le calcul variationnel.

2. Chaîne de masses

Le milieu étant élastique, chaque atome i est connecté aux deux proches voisins $i - 1$ et $i + 1$ par un potentiel de Hooke, c'est-à-dire un ressort. L'énergie potentielle de l'atome i est donc :

$$(207) \quad \frac{1}{2}m\nu^2 (q_{i-1} - q_i)^2 + \frac{1}{2}m\nu^2 (q_{i+1} - q_i)^2$$

qui définit une constant élastique de rigidité $m\nu^2$ (c'est le "k" dans $1/2kx^2$). Le Lagrangien total est donc la somme des énergies potentielles sur les LIAISONS et non sur les atomes. On vérifie que la lagrangien total est :

$$(208) \quad L = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \left[\frac{1}{2}m\dot{q}_n^2 - \frac{1}{2}m\nu^2 (q_{n+1} - q_n)^2 \right]$$

Pour établir les équations du mouvement, on utilise les équations d'Euler. Chaque déplacement q_i étant un degré de liberté :

$$(209) \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = -\infty, \dots, 1, 2, \dots, \infty$$

qui donne :

$$(210) \quad m\ddot{q}_i = m\nu^2 (q_{i+1} + q_{i-1} - 2q_i), \quad i = -\infty, \dots, 1, 2, \dots, \infty$$

EXERCICE 18. *Démontrer cette dernière égalité*

Ces équations du mouvement admettent pour solution des ondes planes :

$$(211) \quad q_n(t) = A \cos(kx_n - \omega t)$$

si et seulement si le vecteur d'onde k et la pulsation ω sont liés par la relation de dispersion :

$$(212) \quad \omega^2 = 2\nu^2 (1 - \cos(k.a))$$

EXERCICE 19. *À vérifier de façon explicite.*

Il sera maintenant utile de considérer la limite des grandes longueurs d'onde, c'est-à-dire :

$$(213) \quad k.a \ll 1$$

Comme $\cos \epsilon \approx 1 - \frac{1}{2}\epsilon^2 + \dots$, la relation de dispersion devient :

$$(214) \quad \omega = \pm \nu a \cdot k$$

qui est linéaire en k .

EXERCICE 20. Généraliser au cas où les déplacements peuvent avoir lieu dans le plan x, y (deux dimensions).

3. Chaîne continue

Pour passer à la limite du continuum, $a \rightarrow 0$, introduisons d'une part la densité de masse

$$(215) \quad \rho = \frac{m}{a}$$

D'autre part, nous supposons que la vitesse de propagation de l'onde approche une constante c

$$(216) \quad \omega = c \cdot k \text{ avec } \nu a \rightarrow c$$

dont la signification physique est que le constante de raideur des ressorts de la chaîne discrète est inversement proportionnelle à a .

Pour obtenir l'énergie potentielle nous faisons le développement de Taylor à l'ordre 1 :

$$(217) \quad q_{n+1}(t) - q_n(t) = q((n+1)a, t) - q(na, t) = a \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x_n=na}$$

d'où :

$$(218) \quad \begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \frac{1}{2} m \nu^2 [q_{i+1} - q_i]^2 &= \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \frac{1}{2} \rho c^2 a \left[\frac{\partial q}{\partial x} \right]^2 \\ &= \frac{1}{2} \rho c^2 \int_{x=-\infty}^{x=+\infty} dx \left[\frac{\partial q}{\partial x} \right]^2 \end{aligned}$$

D'où la définition :

DÉFINITION 8. Dans la limite du continuum, le lagrangien est une intégrale sur la variable d'espace x :

$$(219) \quad L \left[q, \frac{\partial q}{\partial x}, \frac{\partial q}{\partial t} \right] = \int_{x=-\infty}^{x=+\infty} dx \left[\frac{1}{2} \rho \left[\frac{\partial q}{\partial t} \right]^2 - \frac{1}{2} \rho c^2 \int_{x=-\infty}^{x=+\infty} dx \left[\frac{\partial q}{\partial x} \right]^2 \right]$$

DÉFINITION 9. Dans la limite du continuum, les équations du mouvement sont obtenues en rendant l'action extrémale :

$$(220) \quad S[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt L \left[q, \frac{\partial q}{\partial x}, \frac{\partial q}{\partial t} \right]$$

avec des conditions aux frontières $q(x, t_1)$ et $q(x, t_2)$ données (on remarque que c'est la valeur de la fonction $q(x, t)$ qui est donnée en $t_{1,2}$ quelque soit x). Nous pouvons ainsi réécrire le lagrangien dans cette limite. Pour l'énergie cinétique :

$$(221) \quad \begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_n^2 \right] &= \frac{m}{a} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_n^2 \right] a \\ &= \frac{m}{a} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_n^2 \right] \Delta x_n \rightarrow \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho [\dot{q}(x, t)]^2 \end{aligned}$$

D'où :

$$(222) \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}$$

dont la solution représentant une onde progressive :

$$(223) \quad q(x, t) = A \cos(k \cdot x - \omega t)$$

donne la relation de dispersion :

$$(224) \quad \omega = \pm ck$$

Nous avons donc le résultat suivant

THÉORÈME 17. Dans une théorie continue, la densité lagrangienne $L(\phi, \partial_\mu \phi)$ dépend non seulement de la dérivée temporelle, mais aussi de toutes les dérivées suivant l'espace (d'où la notion, μ en indice indique à la fois le temps et l'espace. C'est une tradition. Si on se restreint uniquement aux dérivées spatiales, la tradition veut que l'on utilise les indices en alphabet latin : j ou i .)

Le champ ϕ rend l'action extrémale :

$$(225) \quad S(\epsilon) = \int d^4x L(\phi_0 + \epsilon\eta, \partial_\mu \phi_0 + \epsilon\partial_\mu \eta)$$

avec

$$(226) \quad \phi(t, \mathbf{x}) = \phi_0(t, \mathbf{x}) + \epsilon\eta(t, \mathbf{x})$$

si et seulement si ϕ_0 satisfait à l'équation différentielle

$$(227) \quad \frac{\partial L}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu \phi)} = 0$$

avec une sommation sous-entendue sur l'indice μ .

EXERCICE 21. Montrer que les équations du mouvement (210) se ramènent à (222). On fera le développement de Taylor de $q(x_n, t)$ pour $a \rightarrow 0$.

NOTE 2. On remarque que (220) a une allure relativiste. Introduisons la densité lagrangienne \mathcal{L} en trois dimensions pour l'espace physique

$$(228) \quad L = \int d^3\vec{x} \mathcal{L}$$

L'action S est donc une intégrale à 4 dimensions (3 sur l'espace et 1 sur le temps) :

$$(229) \quad S = \int_\Omega d^4x \mathcal{L}$$

On en déduit la règle relativiste : pour que les équations du mouvement ne dépendent pas de l'observateur, il suffit que la densité Lagrangienne \mathcal{L} soit un scalaire de Lorentz (invariant sous une transformation de Lorentz)

NOTE 3. Généralisation : il peut être intéressant de considérer des champs avec plusieurs composantes ϕ_a avec $a = 1, 2, \dots, n$ (l'aimantation dans un solide a trois composantes suivant les trois axes). Chaque composante évolue avec sa propre équation d'Euler :

$$(230) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} = 0$$

EXERCICE 22. Expliciter toutes les dérivées intervenant dans (230) ainsi que leur signe.

EXERCICE 23. CHAÎNE DE PENDULES DE TORSION : Nous reprenons l'exemple d'une chaîne discrète mais, cette fois, un pendule pesant de masse m et de longueur l est articulé en $x_n = na$ (voir la figure ?? du chapitre 1). Le seul degré de liberté de chaque pendule est l'angle φ_n avec la verticale (voir Figure du chapitre 1). Le but de ce problème est d'établir le lagrangien et les équations du mouvement dans la limite où $\varphi(x, t)$ devient une fonction de la variable réelle x .

- (1) En supposant qu'il existe un couplage de TORSION entre les pendules, donner la forme de l'énergie potentielle liée au site i . On donnera l'expression la plus simple qui respecte les SYMÉTRIES. On appellera C la constante élastique de torsion.
- (2) En déduire la partie potentielle du Lagrangien.
- (3) Déterminer la partie cinétique du Lagrangien.
- (4) En déduire les équations du mouvement dans le cas discret.
- (5) En procédant par analogies avec le cours, déterminer la limite du continuum du Lagrangien. En déduire les équations du mouvement.
- (6) Montrer que ces équations sont les approximations des équations établies dans le cas discret et qu'il suffit de considérer la limite des grandes longueurs d'onde.
- (7) Rajouter la gravité au problème. Montrer que la gravité dans la limite des petites variations pour $\varphi(x, t)$ donne un terme en φ^2 .

4. Qu'est-ce qu'une symétrie ?

DÉFINITION 10. On appelle symétrie d'une théorie des champs, toute opération qui laisse invariante l'action. En particulier, si le jacobien de la transformation est égal à l'unité, cette opération de symétrie préserve le lagrangien

EXEMPLE 5. Nous verrons plus loin le cas des translations dans le temps et dans l'espace. Nous étudions ici le cas d'une transformation d'échelle sur les coordonnées

$$(231) \quad x \rightarrow D[x] = \lambda x$$

Pour trouver la loi de transformation sur les champs

$$(232) \quad \phi \rightarrow D[\phi]$$

nous exprimons que $D[\phi]$ et ϕ mesurent la même chose au même endroit :

$$(233) \quad D[\phi](D[x]) = \phi(x)$$

D'où

$$(234) \quad D[\phi](x) = \phi(x/\lambda)$$

PROPRIÉTÉ 1. En théorie des champs, si il existe une symétrie continue, alors il existe un courant conservé. L'analogie est la conservation de la charge électrique

$$(235) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{j}$$

qui résulte elle aussi d'une symétrie (facteur de phase dans le champ complexe qui est l'analogie de la fonction d'onde de Schrödinger). Ce théorème permet de construire une théorie à partir des quantités qui sont conservées expérimentalement. Il est généralisable en mécanique quantique et en relativité.

EXERCICE 24. On considère une chaîne de masses m connectées à leurs plus proches voisins avec des ressorts anharmoniques dont la relation force, F , déplacement, x , est donnée par

$$(236) \quad F(x) = -kx - \alpha kx^2$$

(1) Écrire le Lagrangien du système.

(2) Démontrer que l'équation du mouvement pour le ressort j est

$$(237) \quad m \frac{d^2 y_j}{dt^2} = k(y_{j+1} + y_{j-1} - 2y_j) + k\alpha [(y_{j+1} - y_j)^2 - (y_j - y_{j-1})^2]$$

(3) Pour passer à la limite du continuum, on désigne par a la distance entre deux voisins. En développant $y_{j\pm 1}$ en série de Taylor au voisinage de y_j , démontrer que les équations du mouvement sont au troisième ordre en a données par

$$(238) \quad \omega_0^{-2} y_{tt} = y_{xx} + \epsilon y_x y_{xx} + \frac{a^2}{12} y_{xxxx}$$

où $\epsilon = 2\alpha a$. On donnera ω_0 .

(4) Dans la suite, on posera $\omega_0 = 1$. On fait le changement de variable :

$$(239) \quad \xi = x - t; \tau = \frac{1}{2}\epsilon t$$

et on cherche une solution sous la forme

$$(240) \quad y(x, t) = \psi(\xi, \tau)$$

On remarque que ϵ impose une échelle de temps et nous nous placerons dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$. En négligeant les termes d'ordre le plus élevé en ϵ (justifier soigneusement votre calcul), démontrer que la fonction $u = \psi_x$ satisfait l'équation (de Korteweg et de Vries)

$$(241) \quad u_\tau + uu_\xi + \delta^2 u_{\xi\xi\xi} = 0$$

où $\delta^2 = a^2/12\epsilon$.

(5) On cherche à trouver la solution à 1 soliton de l'équation :

$$(242) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

qui est du type précédent. Nous cherchons une solution sous la forme $u(x, t) = z(\xi = x - vt)$.
Démontrer qu'il existe alors deux constantes réelles A, B telles que :

$$(243) \quad -\frac{v}{2}z^2 + z^3 \frac{1}{2} \left(\frac{dz}{d\xi} \right)^2 - Az = B$$

(6) La solution qui nous intéresse est telle que $z(\xi)$ et toutes ses dérivées s'annulent à l'infini. En déduire que la valeur de A et celle de B .

(7) Montrer que pour ce choix particulier des conditions aux limites :

$$(244) \quad \left(\frac{dz}{d\xi} \right)^2 = z^2 (v - 2z)$$

(8) L'équation différentielle précédente est donc ramenée à calculer l'intégrale :

$$(245) \quad \int_{z_0}^z \frac{ds}{s\sqrt{v-2s}} = \int_{\xi_0}^{\xi} ds$$

Pour intégrer, faire le changement de variable $s = v/(2 \cosh^2 w)$ et donner la solution.

Solitons

1. Introduction

La non-linéarité des équations de propagation est un problème difficile mais qui conduit à de nouveaux types de solutions. Dans ce chapitre, nous étudions quelques solutions de type SOLITON. Ces ondes sont des ondes progressives à une vitesse v qui peut être arbitraire. On peut les visualiser comme une paroi de domaine se propageant dans la direction de leur normale.

2. Équation de Sine-Gordon

Considérons à nouveau la chaîne d'aiguilles couplées entre elles par une interaction de torsion. Rappelons le Lagrangien :

$$(246) \quad L = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{1}{2} \rho l^2 \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^2 - \frac{1}{2} \sigma \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right]^2 - \rho g l (1 - \cos \phi) \right]$$

avec la fonction de Hamilton

$$(247) \quad H = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{1}{2} \rho l^2 \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} \right]^2 + \frac{1}{2} \sigma \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right]^2 + \rho g l (1 - \cos \phi) \right]$$

Pour simplifier, posons pour le potentiel :

$$(248) \quad U(\phi) = \rho g r (1 - \cos \phi)$$

ce qui permettra d'avoir des résultats valides, en fait, quelque soit $U(\phi)$. Notons que $U(\phi)$ est périodique car la substitution $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$ ne change rien.

En coordonnées réduites, c'est-à-dire en unités appropriées pour ramener toutes les constantes à un, les équations du mouvement sont solutions de l'équation d'Euler :

$$(249) \quad -\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial x^2} = U'(\phi)$$

qui est une équation aux dérivées partielles non-linéaire car $U'(\phi_1 + \phi_2) \neq U'(\phi_1) + U'(\phi_2)$. Si nous approximons ce potentiel dans la limite des petits angles :

$$(250) \quad U'(\phi) \approx \phi$$

l'équation du mouvement devient une équation linéaire. On dit que les champs sont « libres » et toute solution est la superposition linéaire d'ondes planes :

$$(251) \quad \phi(x, t) = \sum_k A_k \cos(kx - \omega_k t)$$

Ces solutions sont caractérisées par une distorsion de l'angle $\phi(x, t)$ qui couvre la droite réelle sur $[-\infty, +\infty]$ de façon périodique. Toutes les parties de la chaîne voient donc « passer » un train d'onde oscillant et ces ondes sont délocalisées.

2.1. Mise en forme. Considérons maintenant le cas non-linéaire. Nous allons montrer qu'il existe une onde PROGRESSIVE qui se propage à la vitesse v . Cette solution interpole entre deux limites asymptotiques pour $x \rightarrow \pm\infty$ avec une différence de $2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$:

$$(252) \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x, t) = 0 [2\pi], \forall t.$$

Pour chercher ces solutions qui s'apparentent à une paroi mobile, nous cherchons les solutions sous la forme :

$$(253) \quad \phi(x, t) = f(x - vt)$$

avec le seul argument naturel :

$$(254) \quad \xi = x - vt$$

qui contient à la fois la coordonnée d'espace x et celle de temps t . Les conditions aux limites deviennent alors :

$$(255) \quad \lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} \phi(x, t) = \phi_{\pm\infty}$$

L'équation aux dérivées partielles devient alors une équation différentielle ordinaire :

$$(256) \quad (1 - v^2) \frac{d^2 f}{d\xi^2} = U'(f)$$

qui devient en multipliant par $df/d\xi$:

$$(257) \quad (1 - v^2) \frac{d^2 f}{d\xi^2} \frac{df}{d\xi} = U'(f) \frac{df}{d\xi} \Rightarrow \frac{1}{2} (1 - v^2) \left(\frac{df}{d\xi} \right)^2 = U(f) + C$$

où C est une constante d'intégration qui est déterminée en fonction des conditions aux limites.

Nous cherchons des solutions dont l'énergie est finie. Mais :

$$(258) \quad \mathcal{E} = \int dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + U(\phi) \right]$$

et donc :

$$(259) \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$$

pour que l'intégrale converge avec :

$$(260) \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(\phi) = 0 \Rightarrow \phi_{\pm\infty} = 2k\pi, k \in \mathbb{Z}.$$

Ce qui permet de démontrer que $C = 0$ dans (257). Posons :

$$(261) \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}}$$

où $v < 1$. Nous verrons dans l'exercice suivant qu'il est toujours possible de trouver des solutions pour $v > 1$ (appelées tachyons), mais celles-ci s'avèrent instables (elles se désagrègent très rapidement en plusieurs solutions avec $v < 1$). On remarque l'allure relativiste de ces solutions, car $v = 1$ fixe une borne supérieure que l'onde ne peut pas dépasser. Donc :

$$(262) \quad \frac{df}{(2U(f))^{1/2}} = \pm \gamma d\xi$$

qui permet d'avoir $\xi(f)$ et donc $f(\xi)$. L'Éq. (262) est donc la solution de l'onde. Celle-ci peut encore s'écrire :

$$(263) \quad \int^f \frac{du}{(2U(u))^{1/2}} = \pm \gamma (\xi - \xi_0)$$

2.2. Comportement asymptotique : soliton et anti-soliton. Pour connaître les solutions, il est utile de développer $U(\phi)$ au voisinage d'un minimum qui peut être

$$(264) \quad \phi_0 = 0, 2\pi, \dots, 2k\pi$$

L'important est que la différence des valeurs de $\phi(x, t)$ en $\pm\infty$ soit un multiple de 2π .

Au voisinage d'un minimum ϕ_0 :

$$(265) \quad U(u) \approx \frac{1}{2} U''(\phi_0) (u - \phi_0)^2$$

D'où :

$$(266) \quad \pm \gamma (\xi - \xi_0) \approx \int^f \frac{du}{(U''(\phi_0) (u - \phi_0)^2)^{1/2}}$$

d'où :

$$(267) \quad \pm \gamma (\xi - \xi_0) \approx \pm \frac{\ln(|f - \phi_0|)}{[U''(\phi_0)]^{1/2}}$$

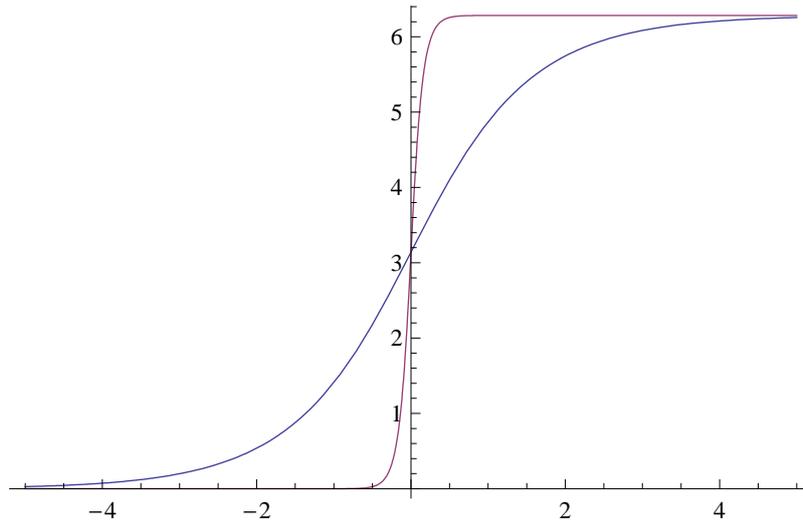


FIGURE 1 – Solution de type « kink » pour deux valeurs de γ . On remarque que la pente à l'origine (ξ_0 dans le texte) croît avec γ . Le soliton transporte donc une énergie infinie lorsque γ tend vers l'infini (ou $v \rightarrow 1^-$), ce qui fixe une valeur limite à la vitesse v .

qui implique un comportement exponentiel au voisinage des deux asymptotes :

$$(268) \quad |f(\xi) - \phi_0| \approx e^{\pm\gamma[U''(\phi_0)]^{1/2}(\xi - \xi_0)}, \text{ avec } \xi \rightarrow \pm\infty$$

CONCLUSION : Nous avons deux types d'onde suivant le \pm .

- (1) Le « kink » où la solution monte de 0 à 2π ;
- (2) L' « anti-kink » descend de 2π à 0.

2.3. Solution exacte interpolant entre 0 et 2π . En fait, nous pouvons intégrer pour avoir la solution exacte lorsque l'expression du potentiel est suffisamment simple. Pour le cas qui nous intéresse :

$$(269) \quad U(u) = 1 - \cos u$$

et

$$(270) \quad \int_{\pi}^f \frac{du}{\sqrt{2}(1 - \cos u)^{1/2}} = \int_{\pi/2}^{f/2} \frac{du}{[\frac{1}{2}(1 - \cos 2u)]^{1/2}} = \int_{\pi/2}^{f/2} \frac{du}{\sin u} = \ln \left[\tan \frac{f}{4} \right]$$

Nous avons donc les deux solutions :

$$(271) \quad \phi_{\text{kink}}(x, t) = 4 \arctan [\exp [\gamma (x - vt - \xi_0)]]$$

$$(272) \quad \phi_{\text{anti-kink}}(x, t) = 4 \arctan [\exp [-\gamma (x - vt - \xi_0)]]$$

dont le domaine de variation principal est fixé par le paramètre γ . Plus la vitesse v de l'onde s'approche de 1, plus γ est grand et, donc, plus grande est la valeur de la pente en ξ_0 où l'angle est fixé à π . On s'attend donc à ce que l'énergie transportée par l'onde croisse avec la vitesse v et qu'elle diverge lorsque $v \rightarrow 1$.

2.4. Calcul de l'énergie. Pour calculer l'énergie d'un soliton, ré-écrivons :

$$(273) \quad \mathcal{E} = \int dx \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + U(\phi) \right]$$

$$(274) \quad = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{1}{2\gamma^2} \left(\frac{df}{d\xi} \right)^2 + U(f) \right]$$

Mais :

$$(275) \quad \left(\frac{df}{d\xi} \right)^2 = 2\gamma^2 U(f) \text{ ou } U(f) = \frac{1}{2\gamma^2} \left(\frac{df}{d\xi} \right)^2$$

Comme

$$(276) \quad \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] = \left(1 - \frac{1}{2\gamma^2} \right) \left(\frac{df}{d\xi} \right)^2$$

D'où :

$$(277) \quad \mathcal{E}_{\text{kink}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left[\frac{df}{d\xi} \right]^2 = \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{df}{d\xi} (2U(f))^{1/2}$$

$$(278) \quad = \gamma \int_{\phi_{-\infty}}^{\phi_{+\infty}} (2U(f))^{1/2} df$$

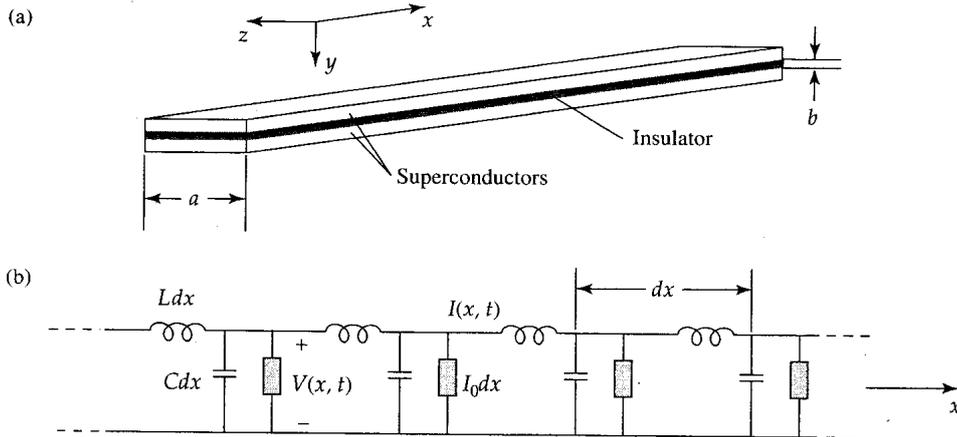
car, dans la dernière intégrale, nous pourrions intégrer sur f et non sur ξ . Pour calculer l'énergie, nous n'avons donc pas besoin de connaître la solution exacte ! Il suffit de connaître les deux valeurs du champ lorsque $\xi \rightarrow \pm\infty$.

Pour $U(f) = 1 - \cos f = 2 \sin^2 f/2$, on trouve :

$$(279) \quad \mathcal{E}_{\text{kink}} = 2\gamma \int_0^\pi \sin u \, du = 4\gamma$$

qui diverge bien lorsque v approche 1 par valeur inférieure.

EXERCICE 25. D'après A. Scott. Nous considérons la ligne de transmission supraconductrice de la figure ci-dessous. Un matériau isolant est pris en sandwich entre deux couches supraconductrices. Nous supposons que ce dispositif peut être schématisé par un circuit électrique équivalent où L est l'inductance et C la capacitance par unité de longueur.



Nous admettons que les équations de conservation du flux magnétique et celle de la charge électrique conduisent au système suivant :

$$(280) \quad \begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial x} &= -L \frac{\partial I}{\partial x t} \\ \frac{\partial I}{\partial x} &= -C \frac{\partial V}{\partial t} - I_0 \sin \phi \end{aligned}$$

où V est la d.d.p. aux bornes de l'isolant. Le terme $I_0 \sin \phi$ représente la transmission Josephson au travers de l'isolant et il est d'origine quantique. La phase ϕ est celle de la fonction d'onde supraconductrice macroscopique et elle est reliée à V par :

$$(281) \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{2e}{\hbar} V$$

où e est la charge électrique d'un électron (remarquer le facteur 2).

(1) Montrer que :

$$(282) \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{2eL}{\hbar} I$$

(2) Montrer que :

$$(283) \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{1}{\lambda_J^2} \sin \phi$$

où on donnera c et λ_J .

(3) En déduire en renormalisant les distances et le temps par des facteurs appropriés que l'équation de propagation se ramène à :

$$(284) \quad u_{xx} - u_{tt} = \sin u$$

(4) Introduire la solution de propagation d'une onde $u(x, t) = \tilde{u}(x - vt)$ et montrer

$$(285) \quad \frac{1}{2} (1 - v^2) [\tilde{u}']^2 = A - \cos u$$

(5) En déduire que la solution est :

$$(286) \quad u(x, t) = 4 \operatorname{Arctang} \left[e^{\pm \left(\frac{x-vt-x_0}{\sqrt{1-v^2}} \right)} \right]$$

à condition que $v^2 < 1$.

(6) Montrer que cette équation est invariante sous la substitution :

$$(287) \quad (x, t) \rightarrow (\xi, \tau)$$

avec :

$$(288) \quad \begin{aligned} \xi &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \\ \tau &= \frac{\tau - vx}{\sqrt{1 - v^2}} \end{aligned}$$

Déterminer la pente à l'origine et montrer que celle-ci tend vers l'infini quand $v \rightarrow 1^-$.

(7) Dessiner ces solutions pour différentes valeurs de v et comparer les domaines de variation lorsque $v \rightarrow 1^-$.

(8) Ces solutions ne sont possibles que si $|v| < 1$. Montrer que

$$(289) \quad u(x, t) = 4 \operatorname{Arctang} \left[e^{\pm \left(\frac{x-vt-x_0}{\sqrt{v^2-1}} \right)} \right] + \pi$$

est solution pour $|v| > 1$. Ces solutions sont instables (ne pas démontrer).

(9) Nous désirons étudier les solutions périodiques

$$(290) \quad \tilde{u}(\theta) = \tilde{u}(\theta + 2\pi) \operatorname{Mod} 2\pi$$

où $\theta = \omega t - \beta x$ avec une valeur local pour la vitesse $v = \omega/\beta$.

(a) Supposer $A > 1$ et $|v| < 1$. Montrer :

$$(291) \quad \sqrt{\beta^2 - \omega^2} \int^{\tilde{u}} \frac{dy}{\sqrt{2(A - \cos y)}} = \theta$$

La variation de \tilde{u} est-elle monotone avec θ ?

(b) En utilisant la même démarche, démontrer que la solution $1 > A > -1$ oscille.

3. Solutions multi-solitons et transformation de Bäcklund

Nous nous intéressons à l'équation de Sine-Gordon et nous montrons qu'il existe une transformation permettant de ramener le problème de la recherche des solutions « multi-solitons » à une algèbre. Cette approche permet de construire une par une toute les familles de solitons.

Introduisons les nouvelles variables :

$$(292) \quad \begin{aligned} x_+ &= \frac{1}{2}(x + t) \\ x_- &= \frac{1}{2}(x - t) \end{aligned}$$

D'où les dérivées partielles :

$$(293) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_+} &= \frac{\partial t}{\partial x_+} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial x_+} \frac{\partial}{\partial x} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

et

$$(294) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_-} &= \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_- \partial x_+} &= \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \end{aligned}$$

D'où l'équation du mouvement équivalente à l'équation de Sine-Gordon :

$$(295) \quad \partial_+ \partial_- \phi = \sin \phi$$

Considérons maintenant le système d'équation différentielle du 1^{er} ordre suivant où les inconnues sont ϕ_0 et ϕ_1 .

$$(296) \quad \begin{aligned} \partial_+ \left[\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} \right] &= a \sin \left[\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right] \\ \partial_- \left[\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right] &= \frac{1}{a} \sin \left[\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} \right] \end{aligned}$$

où a est un nombre réel.

Supposons maintenant que (ϕ_0, ϕ_1) soit solution de ce système. Utilisant la première équation :

$$(297) \quad \partial_- \partial_+ \left[\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} \right] = \cos \left[\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right] \sin \left[\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} \right]$$

Et en utilisant la seconde :

$$(298) \quad \partial_- \partial_+ \left[\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right] = \sin \left[\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right] \cos \left[\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} \right]$$

D'où :

$$(299) \quad \partial_- \partial_+ \left[\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} + \frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right] = \partial_+ \partial_- \phi_1 = \sin \phi_1$$

EN CONCLUSION : Si (ϕ_0, ϕ_1) sont solutions du système (296), alors (ϕ_0, ϕ_1) sont aussi solution de l'équation de Sine-Gordon. Nous avons donc trouvé l'équivalent d'une intégrale première, car l'équation de Sine-Gordon est une équation du 2^e ordre, alors que le système (296) est un système du 1^{er} ordre.

Cette propriété peut alors être utilisée pour construire une solution à partir d'une solution déjà connue : Supposons que nous connaissons ϕ_0 , alors l'Eq. (296) est une équation pour ϕ_1 qui dépend de ϕ_0 . Nous notons :

$$(300) \quad \phi_1 = B_a(\phi_0)$$

où B_a est une application qui à ϕ_0 associe ϕ_1 . D'après ce qui précède, $B_a(\phi_0)$ est solution de l'équation de Sine Gordon.

NOTE 4. *Il est utilisé d'illustrer cette propriété en prenant ϕ_0 identiquement nul (qui est solution de Sine-Gordon). Nous allons déterminer ϕ_1 à partir du système (296).*

Si $\phi_0 = 0$, nous avons :

$$(301) \quad \begin{aligned} \partial_+ \phi_1 &= 2a \sin \frac{\phi_1}{2} \\ \partial_- \phi_1 &= \frac{2}{a} \sin \frac{\phi_1}{2} \end{aligned}$$

Nous changeons maintenant de variable :

$$(302) \quad \begin{aligned} \xi &= ax_+ + \frac{1}{a}x_- \\ \eta &= ax_+ - \frac{1}{a}x_- \end{aligned}$$

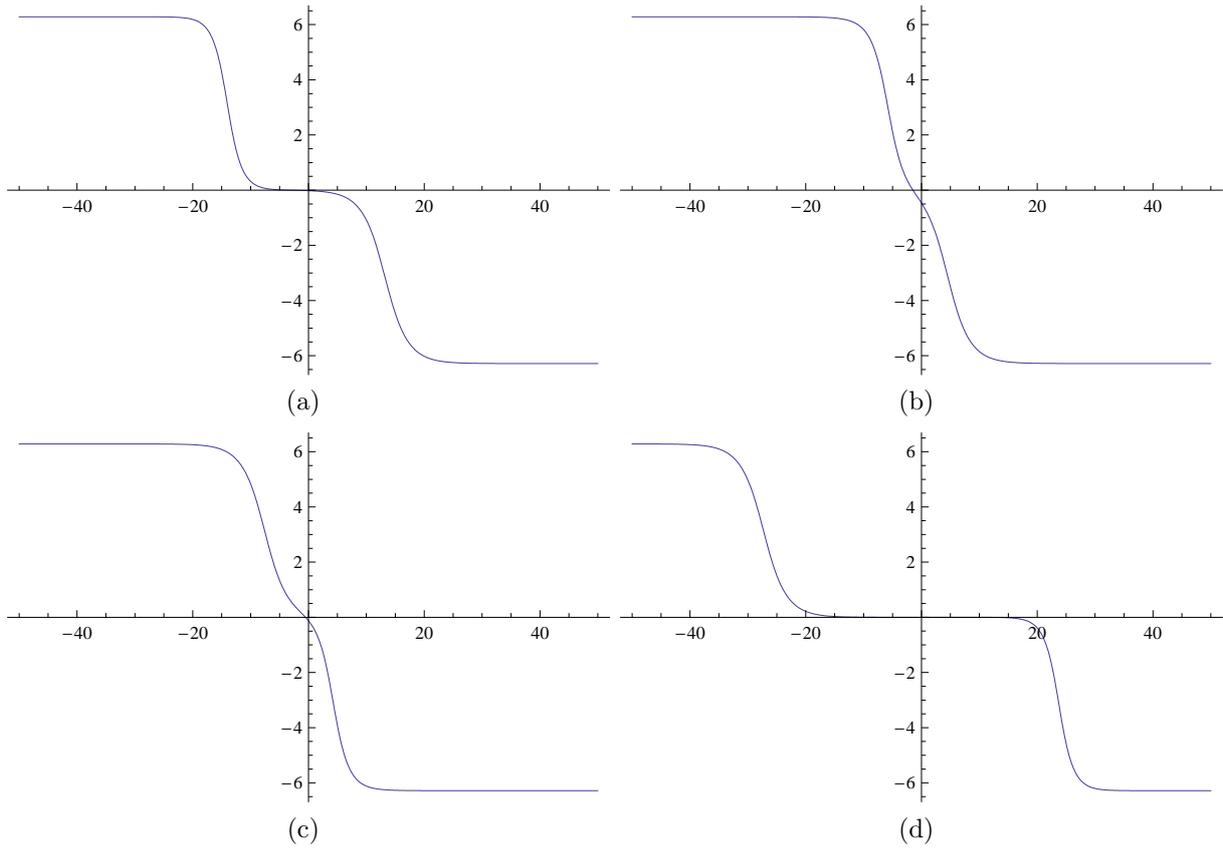


FIGURE 2 – Solution OSCILLANTE à deux solitons se propageant à des vitesses de signe opposé ($t = -100, -10, 10, 100$).

D'où :

$$(303) \quad \begin{aligned} \partial_{\xi} \phi_1 &= 2 \sin \frac{\phi_1}{2} \\ \partial_{\eta} \phi &= 0 \end{aligned}$$

qui redonne la solution connue

$$(304) \quad \tan \frac{\phi}{4} = \exp\{[\xi - \xi_0]\} = \exp\{[\gamma(x - vt - \xi_0)]\}$$

avec :

$$(305) \quad v = \frac{1/a - a}{1/a + a}$$

Donc $B_1(\phi_0)$ est la solution à un soliton de l'équation de Sine-Gordon.

En règle générale, il sera utile d'utiliser le théorème suivant dû à Bianchi (donné ici sans démonstration). Si :

$$(306) \quad \begin{aligned} \phi_1 &= B_{a_1}[\phi_0] \\ \phi_2 &= B_{a_2}[\phi_0] \end{aligned}$$

Alors, les opérations commutent :

$$(307) \quad \phi_3 = B_{a_2}[\phi_1] = B_{a_1}[\phi_2]$$

avec :

$$(308) \quad B_{a_1} \circ B_{a_2} = B_{a_2} \circ B_{a_1}$$

On démontre de plus :

$$(309) \quad \tan \frac{\phi_3 - \phi_0}{4} = \frac{a_2 + a_1}{a_2 - a_1} \tan \left[\frac{\phi_2 - \phi_1}{4} \right]$$

C'est précisément cette égalité qui a été utilisée pour construire la solution oscillante de la figure (2) en utilisant $\phi_0 = 0$ et deux solutions de type soliton pour ϕ_1 et ϕ_2 . En conclusion, l'égalité (309) permet de déterminer explicitement une solution à partir de deux autres solutions.

Mécanique de Hamilton

Pour des raisons diverses, il est souvent utile non pas d'étudier une trajectoire, mais un faisceau de trajectoires. Rappelons que pour un système à n degrés de libertés, les équations d'Euler-Lagrange donnent un système de n équations différentielles du deuxième ordre. Pour étudier ce faisceau de trajectoires, il est plus aisé de travailler avec un système de $2n$ équation différentielles du 1^{er} ordre.

Rappelons aussi que l'impulsion généralisée est définie par la dérivée du Lagrangien par rapport aux coordonnées généralisées $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_n)$

$$(310) \quad p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

On a alors

THÉORÈME 18. *Le système de n équations différentielles de Lagrange est équivalent au système de $2n$ équations différentielles de Hamilton*

$$(311) \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \dot{q}_i = +\frac{\partial H}{\partial p_i}$$

où

$$(312) \quad H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$$

On se rappelle des signes en prenant une particule libre. La fonction H est la fonction de Hamilton ou Hamiltonien.

Limitons-nous à un sel degré de liberté. la différentielle du Hamiltonien est donnée par

$$(313) \quad dH = \frac{\partial H}{\partial p} dp + \frac{\partial H}{\partial q} dq + \frac{\partial H}{\partial t} dt$$

Mais

$$(314) \quad H = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t)$$

d'où

$$(315) \quad \begin{aligned} dH &= \dot{q}dp + pd\dot{q} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} d\dot{q} - \frac{\partial L}{\partial q} dq - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \dot{q}dp - \frac{\partial L}{\partial q} dq - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned}$$

d'où en identifiant

$$(316) \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{et} \quad \frac{\partial L}{\partial q} = \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

où on a utilisé les équations d'Euler-Lagrange dans la dernière égalité.

1. Rappels sur la transformée de Legendre

La fonction de Hamilton peut être vue comme la transformée de Legendre du Lagrangien. Nous nous limitons à une seule variable. On se donne un fonction convexe $f(x)$ et on trace la droite $y = px$. Formons la quantité $px - f(x)$ et cherchons, pour une valeur de p , $x(p)$ comme le point où la distance entre la droite et la fonction $f(x)$ est maximale. Ce point $x(p)$ est solution de

$$(317) \quad p - f'(x) = 0$$

dont la solution est $x(p)$. La fonction

$$(318) \quad g(p) = px(p) - f(x(p))$$

est la transformée de Legendre de f . On démontre que la transformée de Legendre est involutive.

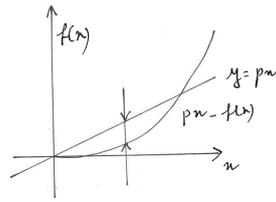


FIGURE 1 – Transformée de Legendre d'une fonction convexe.

EXEMPLE 6. Quelques exemples :

(1) Si $f(x) = \frac{1}{2}mx^2$ alors $g(p) = p^2/2m$;

(2) Si $f(x) = \frac{x^\alpha}{\alpha}$ alors $g(p) = \frac{p^\beta}{\beta}$ où $1/\alpha + 1/\beta = 1$.

EXERCICE 26. Lorsque le potentiel dépend des vitesses, l'impulsion généralisée n'est pas la quantité de mouvement. Considérez une particule dans un champ magnétique. Le Lagrangien est

$$(319) \quad L(\vec{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - q\Phi(\vec{x}, t) + q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}$$

Montrer que le moment conjugué est :

$$(320) \quad \vec{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$$

et que le Hamiltonien est

$$(321) \quad H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi$$

2. Fonction de Hamilton et énergie

THÉORÈME 19. Supposons que l'énergie potentielle $U(\mathbf{q})$ ne dépende ni du temps, ni des vitesses (ce point est important). Alors la quantité

$$(322) \quad H = T + U$$

est l'énergie totale du système. Nous avons

$$(323) \quad \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q} \frac{dq}{dt} = 0$$

d'après les équations de Hamilton. Autrement dit, l'énergie est conservée (c'est une intégrale première).

COROLLAIRE 1. Une autre propriété qui permet d'intégrer les équations du mouvement dans quelques cas est la suivante. Si une coordonnée, mettons q_1 n'apparaît pas dans le Lagrangien (elle est alors dite coordonnée cyclique), alors l'impulsion p_1 correspondante est aussi conservée.

REMARQUE 7. Le fait que la fonction de Hamilton H soit conservée et que H soit l'énergie du système sont deux choses indépendantes. Considérons l'exemple de la figure 2 où un oscillateur est accroché à une plateforme animée d'une vitesse v constante (il y a donc un dispositif qui maintient cette vitesse constante). Si x est la position du mobile dans un repère fixe, le Lagrangien est écrit comme

$$(324) \quad L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{k}{2}(x - vt)^2$$

La fonction de Hamilton est alors

$$(325) \quad H(x, p, t) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{k}{2}(x - vt)^2$$

qui est l'énergie du système.

Supposons maintenant que nous formulions le problème en fonction de la coordonnée relative $x' = x - vt$. Dans ce système de coordonnées, le Lagrangien est

$$(326) \quad L(x', \dot{x}') = \frac{1}{2}m\dot{x}'^2 + m\dot{x}'v + \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{2}kx'^2$$

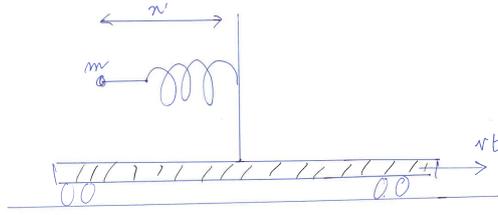


FIGURE 2 – Exemple d'un système où la fonction de Hamilton dans le repère mobile n'est pas l'énergie du système.

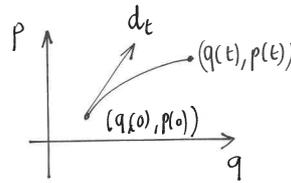


FIGURE 3 – Flot dans l'espace des phases

Nous pouvons alors calculer la nouvelle fonction de Hamilton

$$(327) \quad H'(x', p') = \frac{1}{2m}(p' - mv)^2 + \frac{1}{2}kx'^2 - \frac{1}{2}mv^2$$

Clairement, puisque $H'(x', p')$ est indépendante de t , cette fonction de Hamilton est conservée. Mais, H' n'est pas l'énergie du système !

3. Flot et espace des phases

Nous nous plaçons dans l'espace (q, p) (espace des phases). Regardons la fonction de Hamilton comme un fonction suffisamment régulière de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ dans \mathbb{R}^n . Nous avons une équation différentielle donnée par

$$(328) \quad \dot{z} = -J\nabla H(z)$$

où la matrice J a la forme

$$(329) \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$

Cette écriture permet d'écrire les équation de Hamilton sous forme compact, mais elle permet aussi de les écrire comme un flot. En chaque point, la particule bouge dans la direction du champ de vecteur. En raison de la matrice J , la direction du flot est perpendiculaire au gradient de H . Autrement dit, le flot est tangent aux lignes de niveau de H (que l'on peut voir comme les lignes d'iso énergie).

4. Théorème de Liouville

Traçons une courbe fermée dans le plan des phases. Cette courbe délimite une surface d'aire $D_{t=0}$ et chaque point de cette surface peut être considéré comme conditions initiales. Laissons maintenant évoluer le système pour chacune des conditions initiales. Au bout d'un instant t , chacun de ces points est situé dans un nouveau domaine D_t . Quelle est la surface S_{d_t} de ce domaine ? Réponse :

$$(330) \quad S_{d_t} = S_{d_0}$$

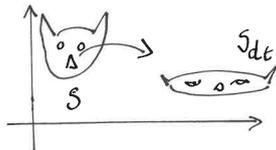


FIGURE 4 – Le flot préserve le volume (d'après Arnold).

Bien que ce théorème reste vrai en dimension quelconque, nous pouvons simplifier les notations en raisonnant dans le plan. Considérons deux instants voisins t_0 et $t_1 = t_0 + \delta t$. Nous voulons comparer les deux surfaces

$$(331) \quad \iint dp_{\delta t} dq_{\delta t} = \iint dp_0 dq_0 ?$$

Considérons la première intégrale. Nous allons faire un changement de variables et il faut donc calculer le Jacobien de la transformation. Faisons le développement limité de $q(t + \delta t)$ et de $p(t + \delta t)$. Utilisant les équations de Hamilton, il vient

$$q_{\delta t} = q_0 + \delta t \frac{\partial H}{\partial p_0} + O(\delta t^2)$$

$$(332) \quad p_{\delta t} = p_0 - \delta t \frac{\partial H}{\partial q_0} + O(\delta t^2)$$

Ce qui permet de calculer le Jacobien comme

$$(333) \quad \frac{\partial(p_{\delta t}, q_{\delta t})}{\partial(p_0, q_0)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial q_{\delta t}}{\partial q_0} & \frac{\partial p_{\delta t}}{\partial q_0} \\ \frac{\partial q_{\delta t}}{\partial p_0} & \frac{\partial p_{\delta t}}{\partial p_0} \end{vmatrix} = 1 + O(\delta t^2)$$

Et donc,

$$(334) \quad \begin{aligned} \iint dp_{\delta t} dq_{\delta t} &= \iint \frac{\partial(p_{\delta t}, q_{\delta t})}{\partial(p_0, q_0)} dp_0 dq_0 \\ &= \iint dp_0 dq_0 + O(\delta t^2) \end{aligned}$$

En conséquence, la différence de surface est au plus d'ordre δt^2 .

Considérons maintenant deux instants t_0 et t_1 quelconques. Posons $T = t_1 - t_0$. Divisons en N intervalles de longueur $\frac{T}{N}$. Alors nous avons par sauts successifs de longueur $\frac{T}{N}$

$$(335) \quad \begin{aligned} \iint dp_{t_1} dq_{t_1} &= \iint dp_{t_1 - \frac{T}{N}} dq_{t_1 - \frac{T}{N}} + O\left(\frac{T^2}{N^2}\right) \\ &= \iint dp_{t_1 - 2\frac{T}{N}} dq_{t_1 - 2\frac{T}{N}} + 2 \times O\left(\frac{T^2}{N^2}\right) \\ &= \iint dp_{t_0} dq_{t_0} + N \times O\left(\left[\frac{T}{N}\right]^2\right) \end{aligned}$$

Comme N est arbitraire, nous pouvons le prendre aussi grand que loisible, de telle sorte que la correction en $\frac{T^2}{N}$ soit nulle. Ceci achève la démonstration.

Remarque. Le théorème de Liouville n'est vrai que dans la représentation (q, p) . Dans la représentation de Lagrange, (q, \dot{q}) , le flot associé aux équations de Lagrange ne préserve pas la surface.

5. Rapports : formes différentielles

Soit $(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$ l'espace des phases assimilé à \mathbb{R}^{2n} . Suivant le contexte, il sera plus facile d'employer la notation u_1, \dots, u_{2n} .

PROPRIÉTÉ 2. Si f est une forme linéaire de \mathbb{R}^{2n} dans \mathbb{R} , alors f se décompose de manière unique comme

$$(336) \quad f = \sum_i \alpha_i du_i$$

où $dp_i(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) = p_i$. Les dp_i et dq_i sont donc les bases des formes linéaires et il existe une correspondance unique entre les vecteurs (q_i, p_i) de l'espace des phases et les formes linéaires, puisqu'on peut toujours associer de façon biunivoque un vecteur de \mathbb{R}^{2n} à une forme linéaire (et réciproquement). Cette correspondance est appelée dualité. Les du_i sont appelées les formes fondamentales.

DÉFINITION 11. On définit les k -formes linéaires sur l'espace des phases $\mathbb{R}^{2n} \times \dots \times \mathbb{R}^{2n}$ sur \mathbb{R} de manière équivalente. Le produit scalaire est donc une 2-forme et le déterminant de 3 vecteurs (volume élémentaire) est une 3-forme.

DÉFINITION 12. Parmi les k -formes linéaires, nous nous intéresserons à celles qui sont alternées.

$$(337) \quad f(u_1, \dots, u_i, \dots, u_j, \dots, u_n) = -f(u_1, \dots, u_j, \dots, u_i, \dots, u_n)$$

Le déterminant est donc une forme alternée.

DÉFINITION 13. On définit le produit extérieur d'une k -forme alternée φ et d'une p -forme alternée ψ comme une $(k+p)$ -forme linéaire

$$(338) \quad \varphi \wedge \psi(u_1, u_2, \dots, u_{k+p}) = \sum_{\sigma} \epsilon(\sigma) \varphi(u_{\sigma(1)}, \dots, u_{\sigma(k)}) \psi(u_{\sigma(k+1)}, \dots, u_{\sigma(k+p)})$$

où σ est une permutation des indices. Par définition, $\epsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation. En conclusion, $\varphi \wedge \psi$ est une $(k+p)$ -forme alternée.

PROPRIÉTÉ 3. Toute k -forme alternée peut s'écrire de manière unique comme combinaison linéaire de produits extérieurs de k 1-formes fondamentales.

Considérons une fonction H (qui est une 0-forme, car c'est comme cela qu'on définit les 0-formes). Définissons la dérivée extérieure de H comme la 1-forme

$$(339) \quad dH = \sum_i \frac{\partial H}{\partial u_i} du_i$$

En se rappelant de la correspondance entre vecteur et 1-forme, on voit que dH est ce que l'on appelle en fait un gradient en physique.

Une forme différentielle est une forme linéaire alternée qui dépend du point

$$(340) \quad \omega = w_{u_1, \dots, u_r} du_1 \wedge \dots \wedge du_r$$

et la dérivée extérieure est définie comme

$$(341) \quad d\omega = \sum \left(\frac{\partial}{\partial u_\nu} w_{u_1, \dots, u_r} \right) du_\nu \wedge du_1 \wedge \dots \wedge du_r$$

et en raison de l'antisymétrie

$$(342) \quad d(d\omega) = 0$$

En particulier si $\omega = w_q dq + w_p dp$

$$(343) \quad d\omega = \left(\frac{\partial w_p}{\partial q} - \frac{\partial w_q}{\partial p} \right) dq \wedge dp$$

Pour toute k -forme α et toute forme β , nous avons la formule

$$(344) \quad d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^k \alpha \wedge d\beta$$

ce qui permet de démontrer que la dérivée extérieure d'une k -forme est une $(k+1)$ -forme. En particulier, si

$$(345) \quad \omega = b_1 du_1 + b_2 du_2$$

alors

$$(346) \quad d\omega = db_1 \wedge du_1 + db_2 \wedge du_2$$

qui peut être facilement calculé, car les b_i sont des 0-formes.

Pour donner un exemple en mécanique, posons $\theta = qdp$. Si $\omega = d\theta$, alors

$$(347) \quad \omega = d\theta = dq \wedge dp$$

est la 2-forme symplectique

$$(348) \quad \omega(v, w) = v_q w_p - v_p w_q$$

6. Crochets de Poisson

Soit une fonction $F(q_k, p_k, t)$, fonction des variables canoniques. Nous allons montrer que nous pouvons calculer la dérivée totale de F par rapport à t sous une forme qui rappelle le formalisme de la Mécanique quantique.

Nous avons

$$(349) \quad \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left[\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} \right]$$

Utilisant maintenant les équations de Hamilton, il vient

$$(350) \quad \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left[-\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} \right]$$

Définissons alors le crochet de Poisson de deux fonctions arbitraires des variables canoniques comme

$$(351) \quad [F, G] \equiv \sum_i \left[\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right]$$

On peut donc écrire

$$(352) \quad \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F, H]$$

Reprenons l'analogie de la Mécanique des fluides pour interpréter cette expression. Considérons un fluide en mouvement. Sa densité de masse par unité de volume est ρ . La dérivée convective totale $\frac{d\rho}{dt}$ rapportée à la variation de masse volumique d'un élément matériel de fluide *en mouvement*. Dans le langage Hamiltonien, l'élément de fluide suit donc les lignes de flot. Par contre, la dérivée partielle $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ se rapporte à la variation de masse d'un volume élémentaire qui ne se déplace pas.

En particulier si $F(q, p) = q$ et $G(q, p) = p$

$$(353) \quad \begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \{q, H\} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = \{p, H\} \end{aligned}$$

Définition. Les crochets de Poisson définissent une algèbre de Lie pour les fonctions qui dépendent des variables canoniques. Cette algèbre a les propriétés suivantes

$$(354) \quad [F, G] = -[G, F]$$

$$(355) \quad [F + K, G] = [F, G] + [K, G]$$

$$(356) \quad [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

où la dernière propriété est connue sous le nom d'identité de Jacobi. On connaît de nombreux exemples d'algèbre de Lie. Par exemple, le produit vectoriel de deux vecteurs définit une telle algèbre

$$(357) \quad [\mathbf{a}, \mathbf{b}] = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$$

Comme deuxième exemple prenons le cas des matrices $N \times N$. On définit l'algèbre de Lie de deux matrices en prenant leur commutateur

$$(358) \quad [A, B] = AB - BA$$

En mécanique quantique, on associe un opérateur à un observable. Cet opérateur définit une matrice dans l'espace des états du système et son évolution au cours du temps est donné par une équation similaire à 352. Dans cette représentation, le crochet de Poisson est défini à l'aide des matrices et on a

$$(359) \quad \frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{1}{\hbar} [F, H] + \langle \dot{F} \rangle$$

On passe donc de la Mécanique Classique à la Mécanique quantique en changeant la représentation de l'algèbre de Lie. D'un côté, on utilise des crochets de Poisson, mais de l'autre on la définit à l'aide des commutateurs de matrices!

Cette correspondance est encore plus frappante si nous calculons le crochet de Poisson de deux variables conjuguées. Par définition, on a

$$(360) \quad [q_l, p_l] = \sum_i \frac{\partial q_l}{\partial q_i} \frac{\partial p_l}{\partial p_i} - \frac{\partial q_l}{\partial p_i} \frac{\partial p_l}{\partial q_i} = 1$$

Alors que le principe d'incertitude de la mécanique quantique exige que

$$(361) \quad [q_l, p_l] = \hbar!$$

EXERCICE 27. On appelle *intégrale première* une fonction qui ne varie pas le long de la trajectoire. Si f ne dépend pas explicitement du temps, alors on a : $[f, H] = 0$. Démontrer le théorème suivant :

THÉORÈME 20. Si f, g sont deux intégrales premières, démontrer que $[f, g]$ l'est aussi.

7. Lien entre le flot Hamiltonien et la 2-forme symplectique

Soit $\omega(v, w)$ la 2-forme symplectique définie plus haut. Associons à chaque vecteur v tangent en (q, p) à l'espace des phases la 1-forme.

$$(362) \quad \omega_v(w) = \omega(v, w)$$

Cette association permet de construire un isomorphisme entre l'espace des vecteurs tangents et celui des 1-formes et donc d'identifier les vecteurs tangents avec les 1-formes. À partir d'une 1-forme, nous pouvons donc construire un vecteur, et si nous pouvons construire un vecteur, nous pouvons construire un flot.

Considérons la fonction de Hamilton $H(q, p)$. En considérant sa dérivée extérieure comme une 1-forme, voir (339)

$$(363) \quad dH = \frac{\partial H}{\partial q} dq + \frac{\partial H}{\partial p} dp$$

qui est réécrit comme

$$(364) \quad dH(w) = \omega(v, w), \forall w$$

où

$$(365) \quad v_q = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{et} \quad v_p = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Reste maintenant à faire le lien avec les crochets de Poisson. Soient $f(q, p), g(q, p)$ deux fonctions. Comme auparavant notons $u = (q, p)$. On construit les vecteurs $\nabla_x f, \nabla_x g$ et nous avons

$$(366) \quad \omega(\nabla_x f, \nabla_x g) = \{f, g\}$$

8. Théorème du retour de Poincaré

Considérons un système Hamiltonien conservatif, tel que les vitesses et positions soient bornées. Autrement dit, nous considérons un flot comme une application g^t conservant les volumes et associant à lui-même un domaine limité $D : g^t D = D$. Le théorème de retour dû à Poincaré établit la propriété suivante : lâchons le système à l'instant initial en (q_0, p_0) . Définissons un voisinage U de ce point dans l'espace des phases. Alors le système repassera à un instant ultérieur dans le voisinage de ce point. C'est-à-dire que le système reviendra aussi proche que l'on veut de ses conditions initiales.

C'est l'exemple de la boule sur un billard parfait et sans frottement. Cette boule repassera "un jour" près du point initial avec une quantité de mouvement proche de celle qu'elle avait au départ.

Démonstration. Les vitesses et les positions restant bornées, le mouvement dans l'espace des phases se fait à l'intérieur d'un domaine fermé. Donc son volume est fini. Photographions le système à tous

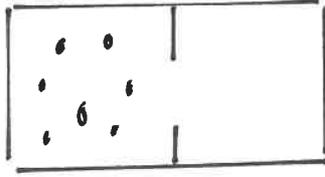


FIGURE 5 – Les molécules reviendront dans le compartiment de gauche.

les instants $t, t+h, t+2h \dots$. Tout domaine entourant les conditions initiales a pour image un nouveau domaine à l'instant $+h$. Appelons g^h l'application qui à U associe ce nouveau domaine $g(U)$. Par définition, l'image du domaine à l'instant $+kh$ est donné par $g^k(U)$.

D'après le théorème de Liouville, tous les domaines $g^l(U)$ ont même volume. Mais comme le volume total est fini, nous savons qu'il existe k et l tels que

$$(367) \quad g^k(U) \cap g^l(U) \neq \emptyset$$

Autrement, les vitesses et les positions ne seraient pas bornées. Donc si $l \geq k$, on a

$$(368) \quad U \cap g^{l-k}(U) \neq \emptyset$$

Donc, au bout du temps $(l-k)h$ nous sommes revenus proches des conditions initiales. Mais cela ne veut pas dire que nous sommes revenus aux conditions initiales.

APPLICATION

Le paradoxe de Poincaré pose le problème suivant. Les particules d'un gaz sont rassemblées dans la partie droite d'une boîte à deux compartiments. À l'instant initial, on ouvre la cloison entre les deux compartiments. Il existe alors un temps au bout duquel les particules se rassembleront toutes dans le compartiment initial! La résolution de ce paradoxe est que ce temps est très long et, pour une molle de gaz, il dépasse l'âge de l'univers!

9. Approche Hamiltonienne (cas continu)

Par analogies avec une particule, on définit le Hamiltonien en prenant la transformée de Legendre :

$$(369) \quad H = \frac{\partial L}{\partial (\partial_0 \varphi)} - L \quad (\text{l'indice } 0 \text{ est pour le temps})$$

En règle générale, H doit être défini positif.

EXERCICE 28. *Champ de Klein-Gordon : considérer le Lagrangien :*

$$(370) \quad L = -\frac{1}{2}(\partial_u \varphi)(\partial^\mu \varphi) - \frac{1}{2}m^2 \varphi^2$$

(1) *Expliciter L en fonction des dérivées.*

(2) *Montrer que*

$$(371) \quad H = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + (\vec{\nabla} \varphi)^2 + m^2 \varphi^2 \right]$$

qui est positif sauf si φ est identiquement nul.

Structure de l'espace-temps - Introduction à la relativité

1. Notion de variété

L'objectif est ici d'introduire la cadre mathématique de la mécanique. Pour repérer les positions d'un ensemble de points matériels, nous aurons besoin de la notion de variété différentiable. Cela permettra de définir l'espace sur lequel agit le lagrangien (ou fonction de Lagrange, voir chapitre suivant).

En mécanique classique (Galiléenne), le temps apparaît comme une coordonnée singulière (c'est-à-dire à part) pour repérer un évènement dans l'espace-temps. La fusion entre coordonnées spatiale et temporelle n'apparaît qu'en relativité qui sera abordée de façon très superficielle à titre d'exemple¹. Il y a donc trois coordonnées (x^1, x^2, x^3) pour un point matériel (par exemple les coordonnées cartésiennes (x, y, z) ou sphériques (r, θ, ϕ)). Ici, l'espace-temps est tout simplement assimilé au produit cartésien $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3$.

Pour définir l'espace des configurations (i.e. l'espace des états possibles), nous utiliserons la notion de variété différentiable. Au risque de verser dans la banalité, une variété de dimension n est quelque chose qui ressemble localement à \mathbb{R}^n de telle sorte que l'on puisse étiqueter les points par n nombres ($n = 3$).

EXERCICE 29. Donner l'espace des configurations du pendule plan et du pendule sphérique.

DÉFINITION 14. Une variété est un espace topologique tel qu'en chacun de ses points, on peut définir un voisinage homéomorphe \mathbb{R}^3 .² Rappelons qu'un homéomorphisme est une application continue dont l'inverse est aussi continue.

DÉFINITION 15. On appelle système de coordonnées (ou carte) sur une partie ouverte U , tout homéomorphisme

$$(372) \quad \begin{aligned} \Phi : U \subset E &\rightarrow \Phi(U) \subset \mathbb{R}^3 \\ P &\rightarrow (x^1, x^2, x^3) \end{aligned}$$

Il convient de souligner que la ressemblance locale à \mathbb{R}^3 s'arrête à l'étiquetage des points. Le système de coordonnées est complètement libre et on peut en changer (heureusement!). Toutefois, on ne peut pas en général repérer tout point P de la variété par un système de coordonnées unique. Il faut en un système de cartes dont chacune recouvre une partie de la variété et qui se raccordent entre elles, l'ensemble de ces cartes formant un atlas. D'où la définition :

DÉFINITION 16. On appelle atlas tout ensemble de couples (U_k, Φ_k) tels que cette ensemble recouvre E

$$(373) \quad \bigcup_{i=1}^n U_k = E$$

1. La présentation est celle d'Éricourgoulhon, <https://luth.obsppm.fr/luthier/gourgoulhon/> et les illustrations sont celles du livre de Stéphane Collion, Voyage dans les mathématiques de l'espace-temps

2. La définition fait aussi apparaître des propriétés supplémentaires permettant d'éviter des cas pathologiques : il doit être séparable et doté d'une base dénombrable.

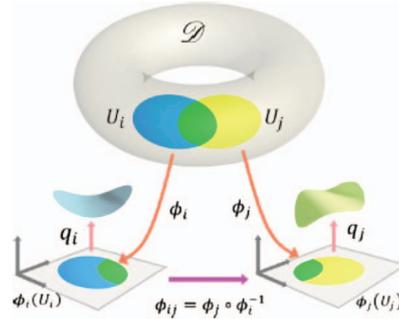


FIGURE 1

On peut alors définir la notion de variétés différentiables à partir de la notion de différentielle dans \mathbb{R}^3 si pour l'intersection non vide de deux cartes, disons U_i et U_j :

$$(374) \quad \Phi_i \circ \Phi_j^{-1} : \Phi_j(U_i \cap U_j) \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \Phi(U_i \cap U_j) \subset \mathbb{R}^3$$

car cette application va d'un sous-ensemble de \mathbb{R}^3 dans un sous-ensemble de \mathbb{R}^3 .

EXEMPLE 7. L'espace euclidien est une variété dont l'atlas est composé d'une seule carte ...

EXEMPLE 8. Considérons un pendule plan. Son espace des configurations est un cercle. Pour des raisons de continuité, son atlas est défini par sa coordonnée angulaire φ avec deux cartes $U_1 = [-\pi/2 - \epsilon, \pi/2 + \epsilon]$ et $U_2 = [\pi/2 - \epsilon, 3\pi/2 + \epsilon]$ avec ϵ petit mais non nul.

EXEMPLE 9. L'espace des configurations du pendule double plan est le produit cartésien de deux cercles, c'est-à-dire un tore.

CONCLUSION 1. L'espace des configurations est une variété différentielle et sa dimension est appelée NOMBRE DE DEGRÉS DE LIBERTÉ. Mais, sur une variété différentielle, il n'y a pas de notion de distance, ni de volume, ni d'angle ... et toutes ces choses sont quand même utiles ! Il faut en fait considérer que l'espace des configurations a une structure d'espace de Riemann douée d'une métrique. Toutes ses grandeurs s'expriment en fonction des vecteurs tangents et en fonction d'une forme quadratique positive sur chaque espace tangent. Encore faut-il savoir ce qu'est un espace tangent sur une variété ...

2. Courbes et vecteurs sur une variété

On introduit généralement la notion de vecteurs en se plaçant dans \mathbb{R}^n . Cette notion qui revient à joindre deux points par une flèche n'est pas généralisable aux variétés sans faire appel à l'espace dans lequel est plongée cette variété. Pour les exemples de variétés, comme une sphère ou un tore, le vecteur joignant deux points sort de la variété. Peut-on alors définir la notion de vecteur sans faire appel à l'espace dans lequel la variété serait plongée ?

Il existe ici une notion parfaitement définie sur une variété E : c'est celle d'une courbe différentiable C paramétrée par un paramètre λ . Pour un espace de dimension n , la courbe est donnée par n fonctions où les coordonnées sont définies comme des fonctions du paramètre λ

$$(375) \quad C : x^i = X^i(\lambda) \quad i = 1, \dots, n$$

Pour motiver la définition que nous donnerons plus tard, considérons d'abord le cas d'une courbe dans le plan. Le vecteur tangent en un point P est donné par

$$(376) \quad \bar{\mathbf{v}} = (\dot{X}(\lambda), \dot{Y}(\lambda))$$

qui n'est rien d'autre que la vitesse si λ est le temps t . Pour un champ scalaire f allant de \mathbb{R}^2 dans \mathbb{R} , l'accroissement élémentaire le long de la courbe est donné par

$$(377) \quad df \Big|_C = \frac{\partial f}{\partial x} \dot{X} d\lambda + \frac{\partial f}{\partial y} \dot{Y} d\lambda$$

soit,

$$(378) \quad \frac{df}{d\lambda} \Big|_C = \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla f$$

où ∇f est le gradient de f de coordonnées $(\partial f / \partial x, \partial f / \partial y, \partial f / \partial z)$. On peut donc voir le vecteur tangent $\bar{\mathbf{v}}$ comme l'opérateur qui à tout champ scalaire fait correspondre la dérivée $df/d\lambda$ le long de la courbe

$$(379) \quad \bar{\mathbf{v}}(f) = \frac{df}{d\lambda} \Big|_C$$

Revenons à (375) pour une variété de dimension n et appliquons la même recette quelque soit le champ scalaire f . Baptisons la quantité suivante $\bar{\mathbf{v}}(f)$:

$$(380) \quad \bar{\mathbf{v}}(f) = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x^i} \frac{dX^i}{d\lambda}$$

Il existe des courbes privilégiées : par exemple, nous pouvons garder constant $x_i = \text{const.}$ pour $i > 1$ et faire varier x_1 qui joue alors le rôle du paramètre λ . Nous pouvons donc évaluer un accroissement dans chacune des directions et définir la quantité

$$(381) \quad \vec{\partial}_\alpha(f) = \left. \frac{df}{dx^\alpha} \right|_{x_i = \text{const. avec } i \neq \alpha}$$

Autrement dit, nous obtenons la décomposition de $\vec{v}(f)$

$$(382) \quad \forall f \quad \vec{v}(f) = \dot{X}^\alpha \vec{\partial}_\alpha(f) \quad \text{avec} \quad \dot{X}^\alpha = \frac{dX^\alpha}{d\lambda}$$

ou, en faisant plus court

$$(383) \quad \vec{v} = \dot{X}^\alpha \vec{\partial}_\alpha$$

DÉFINITION 17. Nous définirons un vecteur comme un opérateur de dérivée directionnelle : ces vecteurs sont les vecteurs tangents à l'ensemble des courbes passant par P et ils existent indépendamment du système de coordonnées choisi. La formule précédente définit un espace vectoriel tangent au point P et cet espace vectoriel a la même dimension que la variété, car les vecteurs $\vec{\partial}_\alpha$ constituent une base naturelle. En règle générale, pour une variété, les vecteurs ne sont que dans l'espace tangent et non dans la variété elle-même. La formule précédente définit ce qu'on appelle un vecteur contravariant.

REMARQUE 8. Les vecteurs sur une variété sont donc des opérateurs de dérivation directionnelle. Il est facile de se rendre compte que cette définition coïncide avec le cas où la variété de dimension n est plongée dans \mathbb{R}^{n+1} , car les coordonnées sont tout simplement les mêmes dans les deux cas.

DÉFINITION 18. Il y a autant d'espaces tangents que de points sur la variété. L'union des espaces tangents s'appelle le FIBRÉ TANGENT à la variété E et se note

$$(384) \quad TE = \bigcup_{P \in E} T_P E$$

Pour un système mécanique de coordonnées spatiales \mathbf{q} et de vitesse $\dot{\mathbf{q}}$, on verra que le Lagrangien $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ est une application qui va du fibré tangent dans \mathbb{R} .

EXERCICE 30. Les coordonnées sphériques sont définies à partir des coordonnées cartésiennes à partir des relations :

$$(385) \quad \begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

Les vecteurs étant des opérateurs de dérivation directionnelle, nous avons

$$(386) \quad \vec{\partial}_r(f) = \frac{\partial f}{\partial r} \quad \vec{\partial}_\theta(f) = \frac{\partial f}{\partial \theta} \quad \vec{\partial}_\phi(f) = \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

En utilisant les lois de composition des dérivées, démontrer la décomposition sur la base :

$$(387) \quad \begin{aligned} \vec{\partial}_r &= \sin \theta \cos \phi \vec{\partial}_x + \sin \theta \sin \phi \vec{\partial}_y + \cos \theta \vec{\partial}_z \\ \vec{\partial}_\theta &= \dots \\ \vec{\partial}_\phi &= \dots \end{aligned}$$

3. Forme multilinéaire et tenseur

Une opération fondamentale sur les vecteurs consiste à leur associer un nombre, et ce de façon linéaire. C'est ce qu'on appelle une forme linéaire, autrement dit une application de l'espace tangent au point P , T_P , dans \mathbb{R}

$$(388) \quad \begin{aligned} \omega : T_P &\rightarrow \mathbb{R} \\ \vec{v} &\rightarrow \omega(\vec{v}) \end{aligned}$$

qui vérifie quelque soit le réel λ et le couple (\vec{u}, \vec{v})

$$(389) \quad \omega(\lambda \vec{u} + \vec{v}) = \lambda \omega(\vec{u}) + \omega(\vec{v})$$

Les 1-formes sont appelées vecteurs covariants L'espace des formes linéaires constitue un espace vectoriel de même dimension que la variété que l'on appelle l'espace dual T_P^* . On appelle ces formes On peut donc

définir des formes multilinéaires sur le produit cartésien (k fois l'espace dual, l fois l'espace tangent) qui dépend du point.

$$(390) \quad T_P^* \times \dots \times T_P^* \times T_P \times \dots \times T_P \rightarrow \mathbb{R}$$

Un champ tensoriel de type (k, l) peut alors être vu comme une forme multilinéaire qui dépend de façon différentielle du point.

4. Exemples de tenseur

Nous introduisons quelques exemples de tenseurs en nous nous intéressant à ce qui se passe lorsqu'on change de système de coordonnées

$$(391) \quad (z^1, z^2, z^3) \rightarrow (x^1, x^2, x^3)$$

soit,

$$(392) \quad x^i = x^i(z^1, z^2, z^3) \quad i = 1, 2, 3$$

- (1) Un scalaire est un exemple bateau de tenseur. Il est évidemment invariant sous changement de coordonnées ;
- (2) Pour une courbe paramétrée $z^i(t)$, on peut calculer les coordonnées du vecteur vitesse dans les deux systèmes. Posant :

$$(393) \quad (\eta^1, \eta^2, \eta^3) = \left(\frac{dz^1}{dt}, \frac{dz^2}{dt}, \frac{dz^3}{dt} \right) \quad \text{et} \quad (\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \left(\frac{dx^1}{dt}, \frac{dx^2}{dt}, \frac{dx^3}{dt} \right)$$

Nous avons la formule de changement de coordonnées

$$(394) \quad \xi^i = \sum_j \eta^j \frac{\partial x^i}{\partial z^j}$$

- (3) Le gradient d'une fonction numérique f en coordonnées cartésiennes s'écrit

$$(395) \quad \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x^1}, \frac{\partial f}{\partial x^2}, \frac{\partial f}{\partial x^3} \right) = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$$

En faisant à nouveau le changement de coordonnées $x^i(z^1, z^2, z^3)$,

$$(396) \quad \frac{\partial f}{\partial z^i} = \eta_i = \sum_j \frac{\partial f}{\partial x^j} \frac{\partial x^j}{\partial z^i}$$

d'où

$$(397) \quad \eta_i = \sum_j \xi_j \frac{\partial x^j}{\partial z^i}$$

Les formules (394) et (397) ne sont pas les mêmes. On dira que le vecteur tangent est un vecteur alors que le gradient est un covecteur (d'où la position des indices, en haut, pour covariant, ou en bas, pour contravariant). Les deux sont des tenseurs. Par définition, le vecteur est un tenseur $(1, 0)$ alors qu'un covecteur est un tenseur $(0, 1)$. Démontrer que la condition pour laquelle les vecteurs et les covecteurs se transforment par la même loi est que la matrice de passage

$$(398) \quad A = (a_j^i) = \left(\frac{dx^i}{dz^j} \right)$$

soit orthogonale

$$(399) \quad AA^T = 1$$

- (4) La loi de composition des dérivées partielles donne directement que le symbole de Kronecker

$$(400) \quad \sum_j \frac{\partial x^i}{\partial z^j} \frac{\partial z^j}{\partial x^k} = \delta_k^i$$

est aussi un tenseur. On a la définition usuelle

$$(401) \quad \delta_k^i = 1 \quad \text{ssi } i = k \quad 0 \quad \text{autrement}$$

- (5) On pourrait croire que tout est tenseur. C'est faux. Tout est dans la formule de changement de coordonnées. Les symboles de Christoffel, par exemple, ne sont pas des tenseurs.

5. Métrique riemannienne

Comme nous l'avons vu, des grandeurs métriques comme des longueurs et des angles sont introduites en se donnant un ensemble de fonction $g_{ij}(x)$. Cette grandeur est définie en tout point sur les vecteurs vitesses et, par définition, la longueur d'une courbe est

$$(402) \quad l = \int_a^b \sqrt{\sum_{i,j} g_{ij}(x(t)) \dot{x}^i \dot{x}^j} dt$$

où la forme quadratique

$$(403) \quad \sum_{i,j} g_{ij} \xi^i \xi^j = g_{ij} \xi^i \xi^j \quad \text{avec la convention de sommation d'Einstein}$$

est positive. Pour que la longueur de la courbe ne dépende pas du système de coordonnées utilisé pour la calculer, les composantes de la métrique se transforment suivant la loi

$$(404) \quad \tilde{g}_{ij}(z) = \sum_{k,l} g_{kl}(x) \frac{\partial x^k}{\partial z^i} \frac{\partial x^l}{\partial z^j} = g_{kl}(x) \frac{\partial x^k}{\partial z^i} \frac{\partial x^l}{\partial z^j}$$

Ce qui signifie que la distance est un scalaire. Elle est donc invariante sous changement de base $x \rightarrow z$ avec

$$(405) \quad ds'^2(z) = ds^2(x)$$

pour la longueur d'un intervalle élémentaire.

EXERCICE 31. Vérifier en utilisant les lois de composition des dérivées partielles

$$(406) \quad \frac{\partial x^i}{\partial z^j} \frac{\partial z^j}{\partial x^l} = \delta_l^i$$

que les matrices inverses (attention à la position des indices) sont liées par

$$(407) \quad \tilde{g}^{ij}(z) = g^{kl}(x) \frac{\partial z^i}{\partial x^k} \frac{\partial z^j}{\partial x^l} \quad \text{avec la convention de sommation d'Einstein}$$

Enfin le tenseur métrique permet de monter ou descendre les indices. Prenons un vecteur $\mathbf{x} = x^i \mathbf{e}_i$, on peut définir l'application linéaire

$$(408) \quad g(\mathbf{x}, \dots) : \quad \mathbf{y} \rightarrow g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

ce qui signifie que sur la base duale, la forme linéaire $g(\mathbf{x}, \dots)$ a pour composantes

$$(409) \quad x_j = x^i g_{ij}$$

6. Deux autres notions

6.1. Dérivé extérieure.

6.2. Dérivée de Lie.

7. Métrique de Minkowski

Le produit scalaire est le fondement de toute géométrie. En physique classique, la métrique est banale et l'espace est l'espace euclidien. En physique relativiste (relativité restreinte), la géométrie est différente :

- L'espace de base n'est plus \mathbb{R}^3 , mais une variété de dimension 4, car il incorpore le temps ;
- Le produit scalaire utilisé n'est plus euclidien, mais s'écrit

$$(410) \quad \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{v}} = -u^0 v^0 + u^1 v^1 + u^2 v^2 + u^3 v^3$$

Le couple variété + métrique est appelé espace-temps. Comme il y a 4 coordonnées mises sur le même pied, elle doivent alors avoir même dimension et on posera $(u^0, u^1, u^2, u^3) = (ct, x^1, x^2, x^3)$ où c sera identifié avec la vitesse de la lumière. Cette métrique correspond au cas de la relativité restreinte. En relativité générale, la métrique est solution d'une équation. On suppose néanmoins qu'il existe un changement de coordonnées LOCAL permettant de se ramener à cette métrique.

Il est d'usage de poser

$$(411) \quad \eta = \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

pour la métrique de Minkowski (relativité restreinte). Dans le cas général la métrique est déterminée par une équation auto-consistante et d'autres exemples sont possibles. Par exemple, la métrique de Schwarzschild (constante de gravité G)

$$(412) \quad g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta = - \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) c^2 dt^2 + \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right)^{-1} dr^2 + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2)$$

décrit la gravité suffisamment loin d'un corps de masse M (il faut que la signature $(-, +, +, +)$ soit la même d'après le théorème de Sylvester). On remarque que cette métrique est indépendante du temps (vu comme une coordonnée) et qu'elle est singulière en $R_S = 2GM/c^2$. Ceci n'est pas gênant, car ce rayon est bien plus petit que rayon des objets célestes ($R_S = 3$ km pour le soleil et $R_S = 8.9$ mm pour la terre ...). Bref, la relativité restreinte avec la métrique de Minkowski permet de décrire le mouvement des particules pourvu qu'elles ne soient pas soumises à la gravitation et la relativité générale permet d'inclure ces forces de gravitation.

Pourquoi la relativité restreinte choisit-elle cette métrique plutôt qu'une autre? La relativité restreinte part d'un postulat. Il existe une vitesse limite qu'aucun particule ne peut dépasser. On choisit cette métrique pour que ce postulat apparaisse comme une propriété géométrique de la métrique, c'est-à-dire une caractéristique structurelle de l'espace-temps.

On appelle événement un point de l'espace-temps et un référentiel inertiel est un référentiel dans lequel le mouvement de tous les corps libres (soit, non soumis à des forces extérieures) est rectiligne et uniforme. Les référentiels non inertiels sont les référentiels accélérés par rapport à un référentiel inertiel. Si deux événements \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 diffèrent par des quantités infinitésimales ($u_2^i = u_1^i + du_1^i$), la quantité

$$(413) \quad ds^2 = g_{ij} du^i du^j$$

est l'intervalle entre les deux événements.

Il est alors intéressant de changer de référentiel inertiel $(ct, x^1, x^2, x^3) \rightarrow (ct', x'^1, x'^2, x'^3)$

$$(414) \quad x'^i = \Lambda^i_j x^j + a^i$$

où a est un vecteur constant et où Λ^i_j est une matrice 4×4 .

REMARQUE 9. la métrique g est ce que l'on appelle une 2-forme, c'est-à-dire qu'en tout point p , il existe une base vectorielle de l'espace tangent T_p à p telle que

$$(415) \quad g(\vec{u}, \vec{v}) = -u^0 v^0 + u^1 v^1 + u^2 v^2 + u^3 v^3 \quad \forall (\vec{u}, \vec{v}) \in T_p$$

Le théorème d'inertie de Sylvester nous assure qu'il n'existe pas une autre base où le produit scalaire serait euclidien (c'est-à-dire avec que des signes +).

DÉFINITION 19. Les matrices de Lorentz de la relativité restreinte sont celles qui satisfont aux contraintes

$$(416) \quad g'_{k,l} = g_{k,l} = \Lambda^i_k \Lambda^j_l g_{ij}$$

sous changement de référentiel inertiel. L'intérêt de ces contraintes est de montrer l'invariance de la vitesse de la lumière sous changement de référentiel inertiel. Pour l'instant, nous avons le résultat suivant :

THÉORÈME 21. Les lois de transformations (414) avec les contraintes (416) forment un groupe appelé groupe de Poincaré³. Sous changement de référentiel $\mathcal{P}_1 \rightarrow \mathcal{P}'_1$ et $\mathcal{P}_2 \rightarrow \mathcal{P}'_2$, la distance entre \mathcal{P}_1

3. Les lois de propagation de la lumière sont invariantes sous ces changements de référentiel.

et \mathcal{P}_2 est invariante

$$(417) \quad s'^2 = g'_{ij}((x_2^i)' - (x_1^i)')((x_2^j)' - (x_1^j)') = g_{ij}(x_2^i - x_1^i)(x_2^j - x_1^j) = s^2$$

La chose importante est qu'il existe une vitesse c finie telle l'intervalle entre deux évènements soit invariant.

REMARQUE 10. La relativité générale généralise (416) à n'importe quel changement de coordonnées. D'où son nom.

EXERCICE 32. Choisissons les unités telles que $c = 1$ et considérons le changement de coordonnées

$$(418) \quad \begin{aligned} t' &= t \cosh \varphi - x \sinh \varphi \\ x' &= -t \sin \varphi + x \cosh \varphi \end{aligned}$$

où $-\infty < \varphi < +\infty$ est un paramètre.

(1) Montrer $-dt'^2 + dx'^2 = -dt^2 + dx^2$.

(2) D'après la définition de ce changement de coordonnées, nous voyons que le point défini par $x' = 0$ se déplace à la vitesse $v = x/t = \tanh \varphi$. Montrer que le changement de coordonnées peut être mis sous la forme

$$(419) \quad \begin{aligned} t' &= \gamma(t - vx) \\ x' &= \gamma(x - vt) \end{aligned}$$

où on donnera γ .

EXERCICE 33. Dans le cas où le référentiel (ct', x'^1, x'^2, x'^3) est animé d'une vitesse V suivant x , les formules de changement de base sont simples ($\gamma = (1 - V^2/c^2)^{-1/2}$, $y' = y$, $z' = z$)

$$(420) \quad \begin{aligned} t' &= \gamma(t - Vx/c^2) \\ x' &= \gamma(x - Vt) \end{aligned}$$

Montrer

$$(421) \quad v' = \frac{dx'}{dt'} = \frac{v - V}{1 - Vv/c^2}$$

ce qui démontre que la vitesse de la lumière est constante.

8. Lignes d'univers

En relativité, une particule est représentée par une courbe et non par un point (la courbe représente le devenir de la particule au cours du temps). Cette courbe, qui est donc une variété de dimension 1 représente toutes les positions successives de la particule. Son vecteur tangent \vec{p} a la dimension d'une impulsion et il est baptisé quadri-impulsion. Il existe donc deux types de trajectoires (les courbes associées à des particules sont appelées ligne d'univers) :

- (1) Celles pour lesquelles le vecteur tangent est de norme nulle : $\vec{p} \cdot \vec{p} = 0$. Ces courbes sont des photons qui se déplacent à la vitesse de la lumière. Par définition, le long d'une trajectoire du genre lumière, $ds^2 = 0$;
- (2) Celles pour lesquelles le vecteur tangent est dit de genre temps, $\vec{p} \cdot \vec{p} < 0$, soit $ds^2 < 0$. Ces courbes, équivalentes au point matériel de la mécanique classique, correspondent à des particules ayant une masse et ne pouvant atteindre la vitesse de la lumière.

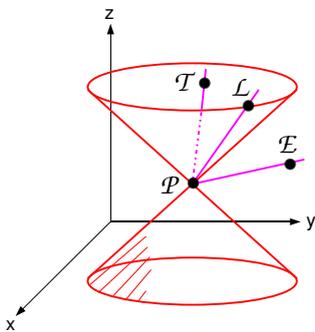


FIG. 7: Cône de lumière.

FIGURE 2 – Un évènement \mathcal{P} avec des séparations de type temporel \mathcal{T} , lumière \mathcal{L} et espace \mathcal{E} .

THÉORÈME 22. La vitesse de la lumière est la même dans tous les référentiels inertiels.

En effet, si deux évènements sont séparés par un intervalle de genre lumière dans un référentiel inertiel, ces deux évènements seront aussi séparés par un intervalle de genre lumière dans tout autre référentiel inertiel, car l'intervalle le long d'une courbe (la distance entre deux points mesurée suivant la métrique) est invariante sous changement de coordonnées.

9. Temps propre

Un point sur une ligne d'univers est appelé évènement. Entre deux points infiniment voisins sur la ligne d'univers, nous pouvons associer un 4-vecteur séparation infinitésimal \vec{dP} qui est un vecteur colinéaire au vecteur tangent \vec{v} . Pour une courbe paramétrée par λ

$$(422) \quad \vec{dP} = d\lambda \vec{v}$$

La distance entre ces deux points est nécessairement négative et la quantité

$$(423) \quad \sqrt{-\vec{dP} \cdot \vec{dP}}$$

est bien définie. En divisant par la constante c , cette constante a la dimension d'un temps $d\tau$

$$(424) \quad d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{-\vec{dP} \cdot \vec{dP}}$$

Pour une ligne d'univers paramétrée par λ , $\vec{dP} = d\lambda \vec{v}$ où \vec{v} est le vecteur tangent, on a

$$(425) \quad d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{-\vec{v} \cdot \vec{v}} d\lambda$$

donc le temps propre écoulé entre deux évènements quelconque A et B est donné par l'intégrale

$$(426) \quad \tau(A, B) = \frac{1}{c} \int_{\lambda_A}^{\lambda_B} \sqrt{-\vec{v} \cdot \vec{v}} d\lambda$$

On pourra imaginer que le temps propre est le temps ressenti par un être humain se déplaçant sur cette ligne d'univers. On pourra le vérifier en supposant que les vitesses sont beaucoup plus petites que la vitesse de la lumière de telle sorte que (426) se ramène à la définition usuelle du temps entre deux évènements. Dans le cas général, ce n'est pas le cas, car le temps ressenti par un observateur (le paramètre λ servant à paramétrer la courbe est le temps associé à un observateur) et le temps propre sont distincts (voir plus loin). Cette interprétation est validée par le fait que (426) ne dépend pas de la façon avec laquelle la courbe est paramétrée. Rappelons en effet que pour tout champ scalaire f , \vec{dP} est un opérateur défini à partir de la seule différence :

$$(427) \quad \vec{dP}(f) = f(P') - f(P)$$

qui est indépendant du choix avec lequel on paramétrise la ligne d'univers. Autrement dit, la définition du temps propre est indépendante de la définition avec laquelle on définit le temps le long d'une ligne d'univers.

La définition du temps propre permet enfin de définir le vecteur 4-vitesse

$$(428) \quad \vec{u} = \frac{1}{c} \frac{\vec{dP}}{d\tau}$$

où τ est le temps propre.

EXERCICE 34. *Nous avons les propriétés suivantes*

(1) *Vérifier*

$$(429) \quad \vec{u} \cdot \vec{u} = -1$$

(2) *Prenez pour coordonnées d'un point matériel $(ct, x = Vt, y, z)$ sachant que ce point est animé d'une vitesse V dans un référentiel suivant x . On prend t comme paramètre. Vérifier à partir du calcul du temps propre que le vecteur 4-vitesse a pour coordonnées (on explicitera la base)*

$$(430) \quad (u^0, u^x, u^y, u^z) = 1/\sqrt{1 - V^2/c^2} \left(1, \frac{V}{c}, 0, 0\right)$$

qui est bien le quadri-vecteur impulsion de la relativité restreinte si on le multiplie par mc , $\vec{p} = mc\vec{u}$.

10. Facteur de Lorentz

Le temps propre pour une particule est par définition le temps qui s'écoule entre deux évènements dans le référentiel inertiel où la particule est immobilisée. C'est précisément ce que dit l'Eq. (426). Un changement de référentiel par une matrice de Lorentz $\Lambda_j^i(v)$ a la propriété d'amener la particule au repos. Dans le référentiel au repos, la distance entre les deux évènements est simplement $-cd\tau_{A,B}$ alors qu'il vaut $-cdt_{A,B}(1 - v^2/c^2)$ dans le référentiel où la particule est animée d'une vitesse v . On en déduit

$$(431) \quad d\tau_{A,B} = dt_{A,B} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

qui montre que les durées sont toujours dilatées par rapport au temps propre.

EXERCICE 35. *Démontrer que les longueurs sont contractées par rapport aux longueurs propres.*

En conclusion, contraction des longueurs (par rapport aux longueurs propres) et dilatation des temps (par rapport au temps propre) sont des effets équivalents à des effets de parallaxe.

11. Simultanéité de deux évènements

Nous avons vu que le devenir d'une particule était représenté par une ligne d'univers. Un évènement correspond à un point de cet espace. Quand peut-on dire que deux évènements sont simultanés? La réponse est évidente en mécanique Newtonienne. En relativité, la réponse est plus nuancée (Poincaré, Einstein) et repose sur la métrique g . Pour marquer un évènement, il faut émettre un signal et les règles du jeu en relativité font que ces signaux sont des photons. Les signaux sont donc des lignes d'univers dont les vecteurs tangents sont de type lumière (donc de norme nulle).

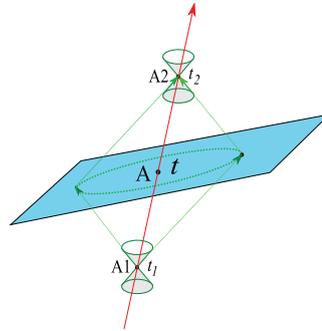


FIGURE 3

Considérons une ligne d'univers \mathcal{L} associé à une particule et considérons un évènement M , c'est-à-dire un point de l'espace, n'appartenant pas à cette ligne. Nous désirons connaître le point A de la ligne d'univers qui est simultanée à M . Supposons M proche de la ligne d'univers pour pouvoir tracer des vecteurs. Il existe deux vecteurs de type lumière dont l'un part d'un point A_1 sur \mathcal{L} et pointe vers M , alors que l'autre va de M et pointe vers un autre point A_2 de \mathcal{L} . Physiquement, nous avons envoyé un signal en A_1 vers M qui l'a immédiatement réémis pour que l'observateur parcourant \mathcal{L} le reçoive en A_2 . Nous dirons que le point A situé à mi-chemin entre A_1 et A_2 est simultanée à M . À mi-chemin signifie que le temps propre mis pour aller de A_1 à A est égal au temps propre pour aller de A à A_2 .

THÉORÈME 23. *Les évènements simultanés à A sur la ligne d'univers \mathcal{L} sont sur la variété orthogonale à \mathcal{L} en A .*

En effet, comme A_1 et A_2 sont infiniment proches de A , les vecteurs $\mathbf{A}_1\vec{A}$ et $\mathbf{A}\vec{A}_2$ sont colinéaires au vecteur tangent \vec{u} en A . Supposons $A = (ct, Vt, y, z)$ où t est le paramètre de \mathcal{L}

Les deux vecteurs $\mathbf{A}_1\vec{M}$ et $\mathbf{A}_2\vec{M}$ étant du genre lumière :

$$(432) \quad \begin{aligned} (\delta t\vec{u} + \mathbf{A}\vec{M}) \cdot (\delta t\vec{u} + \mathbf{A}\vec{M}) &= 0 \\ (\delta t\vec{u} - \mathbf{A}\vec{M}) \cdot (\delta t\vec{u} - \mathbf{A}\vec{M}) &= 0 \end{aligned}$$

qui donne

$$(433) \quad \vec{u} \cdot \mathbf{A}\vec{M} = 0$$

en soustrayant la deuxième équation à la première.

En conclusion, nous voyons qu'il existe une différence fondamentale avec la mécanique newtonienne quand il faut définir la notion de simultanéité : il faut définir une ligne d'univers, c'est-à-dire que nous

avons besoin de connaître ici tout l'historique d'un observateur. Et surtout : deux évènements qui apparaissent comme simultanés pour un observateur ne le sont pas nécessairement pour un autre observateur de déplaçant par rapport au premier.

12. Géodésiques

Dans un espace muni d'une métrique définie positive (avec une signature qui ne comprend que des +), les géodésiques sont les lignes de plus courte distance entre les points. Sur une sphère, c'est le petit arc du grand cercle joignant ces deux points. Dans le cas où la métrique n'est plus définie positive, une géodésique rend extrémale la distance entre deux points donnés

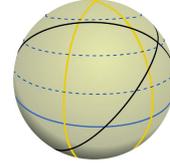


FIGURE 4

$$(434) \quad S = \int_A^B \sqrt{-g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j} d\lambda$$

Cette courbe est extrémale vis à vis de toutes les autres courbes qui passent par ces deux points, voir chapitre sur le calcul des variations. En relativité, les photons suivent les géodésiques et les particules dotées d'une masse et soumises aux seules forces de gravité aussi.

THÉORÈME 24. *On dit que que la courbe $x^i = x^i(\lambda)$ est une géodésique si elle vérifie*

$$(435) \quad \frac{d^2 x^j}{d\lambda^2} + \Gamma_{kl}^j \frac{dx^k}{d\lambda} \frac{dx^l}{d\lambda} = 0$$

où (formule de Christoffel)

$$(436) \quad \Gamma_{kl}^j = \frac{1}{2} g^{j\sigma} [\partial_k g_{l\sigma} + \partial_l g_{k\sigma} - \partial_\sigma g_{kl}]$$

Pour illustrer ce théorème, nous nous plaçons dans le référentiel localement inertiel X^α . Les symboles de Christoffel apparaissent comme des termes inertiels sous changement de référentiels.

Nous nous plaçons donc en un point évènement \mathcal{P} où la métrique est de type Minkowski. Elle diffère peu de cette métrique dans un voisinage de \mathcal{P} . Cette particule n'est soumise à aucune force gravitationnelle. Par conséquent, son équation du mouvement est

$$(437) \quad \frac{d^2 X^\alpha}{d\lambda^2} = 0 \quad \alpha = 0, 1, 2, 3$$

donc $X^0(\lambda)$ est une fonction affine de λ (λ peut être assimilé à un temps propre), utilisé comme simple paramètre. Effectuons maintenant un changement de coordonnées possédant toutes les bonnes propriétés d'inversibilité et de différenciabilité

$$(438) \quad x^\mu = x^\mu(X^\alpha) \quad \mu = 0, 1, 2, 3$$

Nous avons

$$(439) \quad \frac{d^2 X^\alpha}{d\lambda^2} = \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{\partial X^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{dx^\mu}{d\lambda} \right) = \frac{\partial^2 X^\alpha}{\partial x^\mu \partial x^\nu} \frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx^\nu}{d\lambda} + \frac{\partial X^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{d^2 x^\mu}{d\lambda^2}$$

Multipliant cette dernière équation par la matrice inverse $\partial x^\mu / \partial X^\alpha$, les équations du mouvement dans le référentiel x^μ prennent la forme :

$$(440) \quad \frac{d^2 x^\mu}{d\lambda^2} = -\Gamma_{\nu\rho}^\mu \frac{dx^\nu}{d\lambda} \frac{dx^\rho}{d\lambda}$$

où le paramètre $\Gamma_{\nu\rho}^\mu$ est défini par

$$(441) \quad \Gamma_{\nu\rho}^\mu = \frac{\partial x^\mu}{\partial X^\alpha} \frac{\partial^2 X^\alpha}{\partial x^\nu \partial x^\rho}$$

Autrement dit, par changement de référentiel, apparaissent des termes inertiels comme en mécanique de Newton et les symboles de Christoffel jouent ce rôle.

Le problème est que les paramètres $\Gamma_{\nu\rho}^\mu$ sont définis via un changement de référentiel qui va d'un référentiel inertiel X^μ à un référentiel quelconque x^μ . Nous allons le définir uniquement en fonction des x^μ .

Nous supposons que la métrique au voisinage de \mathcal{P} diffère de celle en \mathcal{P} par des termes du second ordre. Autrement dit

$$(442) \quad G_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G_{\alpha\beta}}{\partial X^\gamma \partial X^\delta} \Delta X^\gamma \Delta X^\delta + \dots$$

Nous pouvons donc calculer le tenseur métrique dans un voisinage de \mathcal{P} après changement de base

$$(443) \quad g_{\mu\nu} = \frac{\partial X^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{\partial X^\beta}{\partial x^\nu} \eta_{\alpha\beta}$$

et en particulier

$$(444) \quad \partial_\sigma g_{\mu\nu} \Big|_{\mathcal{P}} = \left(\frac{\partial^2 X^\alpha}{\partial x^\mu \partial x^\sigma} \frac{\partial X^\beta}{\partial x^\nu} + \frac{\partial X^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{\partial^2 X^\beta}{\partial x^\nu \partial x^\sigma} \right) \eta_{\alpha\beta}$$

Cette expression permet de calculer les symboles de Christoffel. En effet la matrice inverse de changement de base est calculée comme

$$(445) \quad g^{\rho\sigma} \Big|_{\mathcal{P}} = \frac{\partial x^\rho}{\partial X^\gamma} \frac{\partial x^\sigma}{\partial X^\delta} \eta^{\gamma\delta}$$

On a donc

$$(446) \quad g^{\rho\sigma} [\partial_\mu g_{\nu\sigma} + \partial_\nu g_{\mu\sigma} - \partial_\sigma g_{\mu\nu}] = 2 \frac{\partial x^\mu}{\partial X^\alpha} \frac{\partial^2 X^\alpha}{\partial x^\rho \partial x^\nu}$$

d'où le résultat.

EXERCICE 36. Vérifier le calcul

DÉFINITION 20. Nous allons définir une accélération sur une variété. En règle générale, celle-ci n'est PAS la dérivée du vecteur 4-vitesse par rapport au temps propre τ . Reprenons l'équation (440) que nous mettons sous la forme :

$$(447) \quad \frac{du^\mu}{d\tau} + \Gamma_{\nu\rho}^\mu u^\nu u^\rho = 0$$

Le premier terme est le terme d'accélération en mécanique classique. Le deuxième terme n'est nul que si la métrique est plate (c'est-à-dire constante). Il traduit donc des effets de courbure de la métrique. Pour cette raison, on définit le quadrivecteur accélération par

$$(448) \quad a^\mu = \frac{du^\mu}{d\tau} + \Gamma_{\nu\rho}^\mu u^\nu u^\rho$$

ce qui revient à dire qu'une géodésique représentant le mouvement libre d'un corps, c'est une ligne d'univers où le 4-vecteur accélération est nul.

Pour une particule soumise à une force autre que la gravité, on écrira

$$(449) \quad ma^\mu = f^\mu$$

où f^μ est le tenseur associé à la force (que l'obtient en utilisant la définition (0, \mathbf{F} dans un référentiel local inertiel à partir d'un changement de coordonnées).

13. Dérivation covariante

EXERCICE 37. Déviation de la lumière par le soleil.

(1) En utilisant l'expression des symboles de Christoffel dans l'équation des géodésiques, montrer qu'une forme équivalente de ces équations est

$$(450) \quad \frac{d}{dp} \left(g_{\mu\nu} \frac{dx^\nu}{dp} \right) = \frac{1}{2} \partial_\mu g_{\nu\rho} \frac{dx^\nu}{dp} \frac{dx^\rho}{dp}$$

On pourra utiliser (138) pour rendre symétrique les expressions intermédiaires.

(2) Montrer que ces équations sont les équations d'Euler-Lagrange d'un lagrangien (le lagrangien géodésique) $L(x, \frac{dx}{dp})$ et donner ce Lagrangien.

(3) Prouver qu'une intégrale première des équations des géodésiques est donnée par

$$(451) \quad \frac{1}{2} g_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{dp} \frac{dx^\nu}{dp} = e$$

où e est une constante le long de la trajectoire. On vérifiera directement que $de/dp = 0$ est une conséquence de (450).

(4) La constante e est en fait l'énergie le long de la trajectoire. Pour re-démontrer cette équation, calculer le moment conjugué π_μ . En déduire $H = L$ et (451).

(5) Démontrer (à partir de (450)) que si la coordonnée x^μ n'apparaît pas dans la métrique (coordonnée cyclique dans le langage hamiltonien), alors

$$(452) \quad \pi_\mu = \text{const.}$$

C'est-à-dire que son moment conjugué est une quantité conservée.

(6) Nous supposons que la métrique de Schwarzschild, cf. Eq. (412) décrit les trajectoires d'un photon au voisinage du soleil

$$(453) \quad g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta \approx - \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r} \right) c^2 dt^2 + \left(1 + \frac{2GM}{c^2 r} \right) dr^2 + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2)$$

Pour des raisons de commodités, nous utiliserons cette forme approchée en supposant le terme $U = \frac{GM}{r}$ petit (le rayon critique pour soleil vaut).

(7) Donner les équations pour les coordonnées (r, r, θ, ϕ) . Chaque fois qu'une coordonnée est cyclique, on la remplacera par une intégrale première, cf. question précédente.

(8) Montrer que $\theta = \pi/2$ est solution de l'équation sur θ .

(9) Montrer qu'il existe une constante b , telle qu'au premier ordre en U/c^2 , l'équation du moment cinétique est

$$(454) \quad r^2 \frac{d\phi}{dt} = b \left(1 - 4 \frac{U}{c^2} \right)$$

On utilisera les intégrales du mouvement déduites de l'équation pour la variable t et celle pour la variable ϕ .

(10) Utiliser maintenant l'équation sur l'énergie. Pourquoi $e = 0$?

(11) Montrer qu'au premier ordre en U/c^2

$$(455) \quad \left[\frac{d}{d\phi} \left(\frac{b}{r} \right) \right]^2 + \left(\frac{b}{r} \right)^2 = 1 + \frac{4U}{c^2}$$

(12) Quelle est la solution de la trajectoire pour $U = 0$?

(13) Montrer qu'au premier ordre en U/c^2 , la trajectoire est donnée par

$$(456) \quad \frac{b}{r} = \sin(\phi - \phi_0) + \frac{\alpha}{2} \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{4GM}{bc^2}$$

et tracer la trajectoire correspondante à cette équation. On constatera que α diffère d'un facteur 2 par rapport à l'expression classique (82).

Deuxième partie

Mécanique quantique

Introduction

La mécanique quantique a quelque chose de surprenant : beaucoup ont cherché et cherchent à tester ses principes de base sans qu'aucun n'ait jamais réussi à la mettre en défaut. C'est un peu énervant, mais force est de constater que ses prédictions sont remarquables⁴ : elles restent corroborées par l'expérience avec une précision métrologique. À l'origine, cette nouvelle mécanique développée très rapidement dans les années 1920 s'intéressait à comprendre les structures ultimes de la matière comme, par exemple, les propriétés constituants des noyaux. Elle trouve maintenant des applications au niveau des applications industrielles. Si la capacité de stockage de l'information sur les disques durs a considérablement pu être améliorée durant ces dernières années, c'est grâce à un nouveau procédé pour les têtes de lecture. L'Ipod (et les disques SSD) qui utilise la magnéto-résistance géante est un appareil quantique ! En fait, toute la micro-électronique du futur que l'on appelle la nano-électronique utilise des effets purement quantiques.

La mécanique quantique est l'oeuvre de grands noms tant en physique qu'en mathématiques. Une fois le cadre conceptuel posé, il arrive que sa puissance analytique domine notre intuition physique basée sur des expériences macroscopiques. Durant ces vingt-cinq dernières années, la situation a considérablement évolué. Nombre d'expériences qui n'étaient que des « Gedanken Experiments » ont pu être faites. Ces expériences ont pu mettre fin à des controverses vieilles de plus de cinquante ans sur la mesurabilité de la phase de la fonction d'onde et sur les interférences quantiques. Il existe maintenant de nouvelles interprétations de la mécanique quantique. Même si Einstein a eu tort sur son interprétation de la mécanique quantique, il a peut-être eu raison de penser que celle qui avait été donnée dans les années 20 n'était peut-être pas la bonne ... En privé, tout le monde espère ça ...

Quelques références :

- (1) R. Feynman, Lectures in Physics.
- (2) J.L. Basdevant et J. Dalibard, Mécanique quantique.
- (3) Michel Lebellac, Physique quantique.

Expériences des fentes d'Young : un électron, ou tout autre objet microscopique (i.e. une particule), est à la fois une onde et une particule

Nous considérons une expérience dont la réalisation date du milieu des années 70 et dont il est impossible de comprendre les résultats de façon « classique ». Cette expérience généralise l'expérience des fentes d'Young où les interférences constructives dessinent une variation sinusoïdale de l'intensité de la lumière sur un écran placé derrière les fentes. À la place de ce qu'on appelle maintenant des photons, nous utiliserons des électrons et nous montrerons qu'on construit un patron d'interférence statistique avec des électrons isolés, les électrons passant en effet UN PAR UN dans l'appareil de mesure.

Rappelons ici une propriété importante de l'expérience d'Young qui remonte à la première décennie des années 1800. Dès 1809, on sait grâce GI Taylor qu'un faisceau de lumière de très faible intensité - « *equivalent to a candle burning at a distance slightly exceeding a mile* » - est capable de produire des franges d'interférence. Ces interférences résultent d'un principe de superposition : le champ électrique total en un point x de l'écran est la somme du champ produit par le faisceau passant par le trou 1 avec celui du faisceau issu du trou 2 :

$$(457) \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$$

Et nous passons à l'intensité mesurée en prenant le module au carré du champ :

$$(458) \quad I = \left| \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 \right|^2$$

Le développement de la norme conduit au terme d'interférence qui dépend de la différence de marche entre les deux rayons lumineux qui dépend de l'altitude y sur l'écran d'observation :

$$\cos(4\pi dy/\lambda x)$$

Cette même expérience peut maintenant être reproduite dans le laboratoire à une modification importante près⁵. À la place d'un faisceau de photons, nous disposons d'électrons (ou de neutrons, ou de fluorènes C₆₀...) que nous pouvons injecter UN PAR UN dans l'appareil de mesure des trous d'Young.

4. Remarquons au passage que ne pas comprendre ne veut pas dire ne pas s'y habituer !

5. Cette expérience avait été imaginée par Feynman dans son cours. Elle est maintenant réalisable, cf.[1]

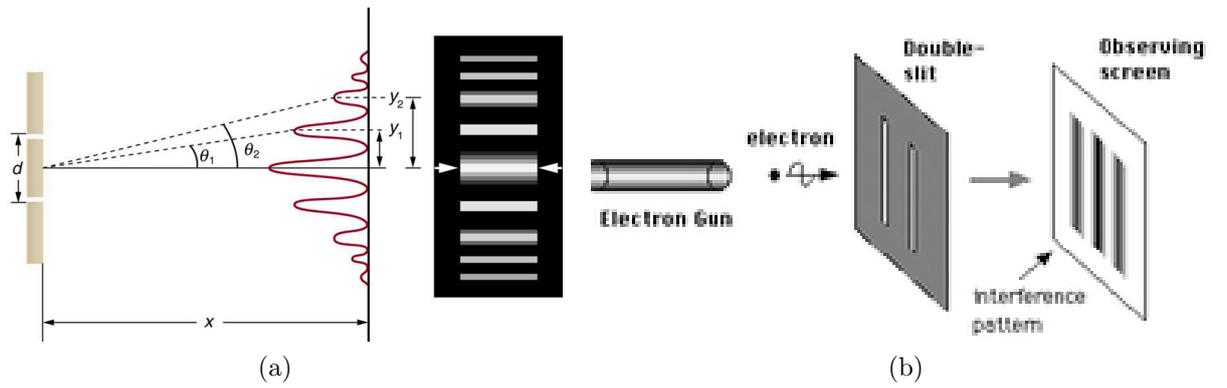


FIGURE 5 – (a) : Interférence de deux ondes en lumière partiellement cohérente.
(b) La même expérience avec des électrons lancés un par un.

La cadence est en fait de 1000 électrons par seconde. Prendre des électrons un par un nous assure qu'il ne peut pas avoir d'interaction entre eux lorsqu'ils passent dans l'appareil de mesure. Une fois passé par l'une des fentes, l'électron percute l'écran et nous pouvons repérer l'impact. Deux résultats sont patents :

- On ne peut pas prédire la position du point d'impact : Celle-ci doit donc être écrite de FAÇON STATISTIQUE.
- L'ACCUMULATION des impacts successifs dessine un patron d'interférence. Ce patron est similaire à celui produit par la lumière dont la nature ondulatoire est connue. Rappelons que, pour la lumière, le patron d'interférence est construit en bloc. Ici, le patron d'interférence est construit impact par impact.

REMARQUE 11. *Il est impossible de savoir par quel trou un électron est passé. Cette impossibilité est liée au principe de la mesure. Savoir par où un électron est passé, c'est le détecter dans un appareil et donc le retirer du système. Cette action détruit le patron d'interférence. Le patron d'interférence est détruit même si le principe de la mesure permet de détecter par quel trou l'électron est passé. On a pas besoin de le faire pour supprimer le patron d'interférences. Il suffit de savoir que l'on peut le faire !*

Qu'arrive-t-il si nous voulons moins perturber le système avec une source de lumière nous indiquant par quelle fente les électrons sont passés ?

- Nous pouvons diminuer l'intensité de la source lumineuse, c'est-à-dire envoyer moins de photons. Alors les électrons qui n'auront pas vu les photons construiront une figure d'interférence. Ceux qui ont vu les photons se comporteront de manière classique.*
- Nous pouvons augmenter la longueur d'onde des photons pour diminuer leur énergie. Mais alors nous perdons de la résolution spatiale et quand la longueur d'onde des photons sera de l'ordre de grandeur de la séparation des deux fentes, nous ne pourrons plus dire par quelle fente les électrons sont passés.*

Bref, nous sommes coincés.

CONSÉQUENCE 1. *L'interprétation de la mécanique quantique est la suivante : un électron peut passer au travers des deux fentes sous la forme d'une onde appelée « amplitude de probabilité » qui va jouer le même rôle que le champ électrique pour la lumière. La probabilité sera le carré de la norme de l'amplitude de probabilité, tout comme l'intensité de la lumière est le carré de l'amplitude du champ électrique.*

Par analogie avec les eqs. (457) et (458), nous pouvons introduire un objet baptisé AMPLITUDE DU PROBABILITÉ. Soit $a_1(x)$ l'amplitude de probabilité, choisie commun nombre complexe, que l'électron arrive en x sur le détecteur sachant que l'électron passe par le trou 1. On définit aussi $a_2(x)$ pour l'amplitude de passer par le trou 2. La PROBABILITÉ est calculée en prenant la norme de l'amplitude totale est la somme des amplitudes de chaque chemin

$$(459) \quad I(x) \propto |a_1(x) + a_2(x)|^2$$

Une formulation plus générale est la suivante : supposons que, partant d'un état initial i , nous arrivons à un état final f . on doit additionner toutes les amplitudes pour arriver en f , sachant que nous sommes partis de i

$$(460) \quad a_{i \rightarrow f} = a_{i \rightarrow f}^{(1)} + a_{i \rightarrow f}^{(2)} + \dots + a_{i \rightarrow f}^{(n)}$$

L'égalité (460) n'est rien d'autre qu'un principe de superposition et cette propriété est rencontrée dans toutes les théories linéaires. La mécanique quantique est une théorie linéaire et il est évident que les espaces vectoriels vont donc jouer un rôle. Cet espace correspondra à l'espace des états. L'état du système sera représenté par un vecteur. L'amplitude de probabilité correspondra au produit scalaire dans cet espace d'état.

Nous avons aussi la règle 2 : quand une particule passe par une voie particulière, l'amplitude pour cette voie peut être écrite comme le produit de l'amplitude de faire une partie du chemin par l'amplitude faire l'autre partie du chemin. Ainsi pour la voie 1, l'amplitude de partir de la source s et d'arriver à l'écran en x est le produit de l'amplitude de partir de s et d'arriver dans la fente 1 par l'amplitude de partir de la fente 1 pour arriver en x :

$$(461) \quad \langle x|s \rangle_1 = \langle x|1 \rangle \langle 1|s \rangle$$

avec

$$(462) \quad \langle x|s \rangle = \langle x|s \rangle_1 + \langle x|s \rangle_2$$

Cette amplitude de probabilité est donnée par un PRODUIT SCALAIRE. En effet, si $|\varphi \rangle$ représente l'état du système, et si $|\chi \rangle$ est un autre état, l'amplitude de probabilité que la mesure donne $|\chi \rangle$, i.e. passe le test $|\chi \rangle$ (c-à-d : Je cherche à déterminer si la particule est dans l'état $|\chi \rangle$), est le PRODUIT SCALAIRE

$$(463) \quad \langle \chi|\varphi \rangle$$

et la probabilité est

$$(464) \quad |\langle \chi|\varphi \rangle|^2$$

L'espace des configurations est donc un espace vectoriel, généralement de dimension infinie, dénombrable et séparable (il faudra un jour ou un autre utiliser des fonctions). Ce qui veut dire qu'il est possible de construire une suite dénombrable de vecteurs de base qui est dense. On a donc la décomposition en série convergente, mais PAS absolument convergente

$$(465) \quad x = \sum_n \langle x, e_n \rangle e_n$$

avec la formule de Parseval

$$(466) \quad \|x\|^2 = \sum_n \|x_n\|^2 = \sum_n |\langle x, e_n \rangle|^2$$

Pour les besoins de la mécanique quantique, cet espace \mathcal{H} est un espace de Hilbert :

- (1) Espace défini sur le corps des complexes (il faut avoir des interférences, donc une phase).
- (2) Un produit scalaire vérifiant

$$(467) \quad \langle \phi|\chi \rangle = (\langle \chi|\phi \rangle)^*$$

$$(468) \quad \langle \phi|\psi + a\chi \rangle = \langle \phi|\psi \rangle + a \langle \phi|\chi \rangle, \forall a \in \mathbf{C}$$

$$(469) \quad \langle \phi|\phi \rangle = \|\phi\|^2 = 0 \Rightarrow |\phi \rangle = 0$$

- (3) \mathcal{H} est complet (toute suite de Cauchy est convergente et a une limite dans \mathcal{H}).
- (4) Un espace de Hilbert est caractérisé par sa dimension. Les espaces de Hilbert en mécanique quantique sont soit de dimension finie, ou de dimension infinie mais dénombrable.

EXEMPLE 10. Nous avons :

- (1) L'espace \mathbb{C}^n muni de la forme hermitienne

$$(470) \quad \langle x, y \rangle = \sum_{j=1}^n \bar{x}_j y_j$$

(2) L'espace $l^2(\mathbb{N})$ des suites complexes $(x_n)_{n \geq 0}$ telles que $\sum_{n=0}^{\infty} |x_n|^2 < +\infty$ munies de

$$(471) \quad \langle (x_n)_{n \geq 0}, (y_n)_{n \geq 0} \rangle = \sum_{n \geq 0} \bar{x}_n y_n$$

En fait tous les espaces de Hilbert séparables se ressemblent, c'est-à-dire qu'ils sont tous isomorphes, car il sont isomorphes à $l^2(\mathbb{N})$. En effet, l'application de $l^2(\mathbb{N})$ dans \mathcal{H}

$$(472) \quad (x_n)_{n \geq 0} \rightarrow \sum_n x_n e_n$$

conserve nécessairement la distance et elle donc une application linéaire bijective (donc un isomorphisme). Nous ne considérerons que les espaces de Hilbert séparables.

EXEMPLE 11. Nous considérons l'espace des fonctions à valeurs complexes de carré sommable sur l'intervalle $[a, b]$. Ces fonctions forment un espace de Hilbert, noté $L^{(2)}[a, b]$ (L pour Lebesgue).

L'ensemble des fonctions continues sur un intervalle $[a, b]$, où a, b ne sont pas nécessairement finis, n'est pas adapté à nos besoins. En effet, si une séquence de fonctions dans $C([a, b])$ converge (dans un sens qui reste à définir), la limite n'est pas nécessairement dans $C([a, b])$. Il faut donc envisager une espace plus grand et dans cet espace, et nous ne considérerons que les fonctions pour lesquelles le produit scalaire

$$(473) \quad \langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \bar{g}(x) dx$$

est bien défini. L'inégalité

$$(474) \quad |\langle f, g \rangle| \leq \|f\| \|g\|$$

nous assure que le produit scalaire est bien défini si les fonctions sont de carré intégrable. À strictement parler, il faut considérer l'intégrale de Lebesgue, car l'intégrabilité de f^2 ou g^2 ne garantit pas l'intégrabilité de fg , mais la physique ignore généralement les fonctions qui sont intégrables au sens de Lebesgue et non au sens de Riemann!

On introduit souvent l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable sur la droite réelle. Cet espace est aussi séparable.

— Le produit scalaire de deux fonctions χ, φ est défini comme

$$(475) \quad \langle \chi | \varphi \rangle = \int_a^b dx \chi^*(x) \varphi(x)$$

— Cet espace est complet, car toutes fonctions de $L^{(2)}[a, b]$ peut s'écrire comme somme d'une série de Fourier

$$(476) \quad \varphi(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} c_n \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i n x}{b-a}}$$

où

$$(477) \quad c_n = \frac{1}{\sqrt{b-a}} \int_a^b dx e^{-\frac{2\pi i n x}{b-a}}$$

Les fonctions

$$(478) \quad \varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{b-a}} e^{\frac{2\pi i n x}{b-a}}$$

forment une base orthonormée dénombrable.

EXEMPLE 12. $L^{(2)}[a, b]$ aura un importance cruciale dans la suite. Ce sera l'espace vectoriel naturel qui nous permettra de déterminer l'état du système. En particulier, la quantification des niveaux d'énergie apparaîtra comme une conséquence du problème de Sturm-Liouville. Au risque de tuer le suspens, nous avons :

THÉORÈME 25. Un problème de Sturm-Liouville sur $[a, b] \subset \mathbb{R}$ est une équation différentielle du deuxième ordre avec des conditions aux limites en a et b :

$$(479) \quad \begin{cases} u''(x) + q(x) = \lambda u(x) & x \in [a, b] \\ u(a) \cos \alpha + u'(a) \sin \alpha = 0 \\ u(b) \cos \beta + u'(b) \sin \beta = 0 \end{cases}$$

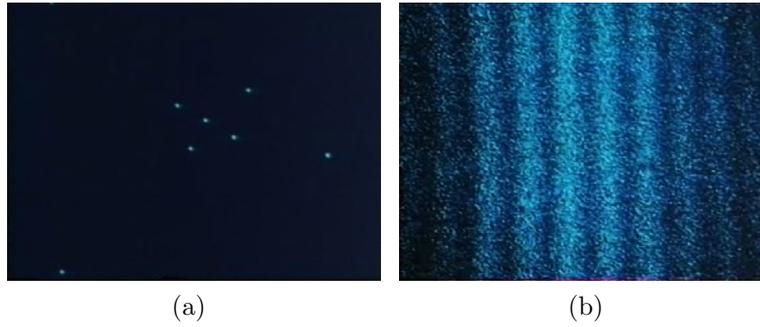


FIGURE 6 – La position de l’impact des électrons est aléatoires (a). En (b), l’accumulation des impacts construit un patron d’interférence.

où α, β sont donnés et spécifient les conditions aux limites (dérivées ou valeurs nulles aux bords de l’intervalle) Le paramètre λ suggère que nous considérons ce problème comme une sorte de problème aux valeurs propres. Pour un problème régulier, où le facteur du terme de plus haut degré ne s’annule pas, les seules valeurs de λ pour lesquelles ce problème a des solutions non-nulles (a) forment un spectre discret (b) ce spectre est borné inférieurement (c) les fonctions propres associées sont denses dans $L^{(2)}[a, b]$ et forment une base. On verra plus tard que l’équation de Schrödinger est un problème de Sturm-Liouville où la suite des $(\lambda_n)_{n \geq 0}$ pour lesquels il existe une solution non triviale (i.e. non nulle) correspond à la suite des niveaux d’énergie d’un problème quantique. Nous démontrerons ce théorème.

Nous avons en particulier l’exemple fondamental des séries de Fourier

THÉORÈME 26. Ici, $n \in \mathbb{Z}$, $H = L^2(S^1, \mathbf{C})$ et

$$(480) \quad \langle f, g \rangle = \int_{S^1} \bar{f}(t)g(t)dt$$

On prend

$$(481) \quad e_n(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-int\}$$

On a bien $\langle e_n, e_m \rangle = \delta_{n,m}$. Dans ce cas

$$(482) \quad x_n = \langle x, e_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{S^1} \bar{f}(t) \exp\{-int\} dt$$

et les x_n sont les coefficients de Fourier. La densité de l’espace engendré par les e_p entraîne le résultat suivant :

Pour f dans $L^2(S^1)$, la série de Fourier converge en moyenne quadratique :

$$(483) \quad \lim_{q \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} \left| f(t) - \sum_{n=-q}^{n=+q} c_n(f) e^{-int} \right|^2 dt = 0$$

Si f est de classe C^1 (dérivée continue), la convergence est uniforme. La continuité seule de la fonction n’est pas un critère suffisant.

Autres expériences

- *Effet photoélectrique.* Un métal est irradié par une lumière monochromatique de fréquence ν . Au-delà d’un certain seuil d’énergie (fréquence suffisamment élevée), des électrons sont éjectés (le phénomène est quasi instantané). Leur énergie est une fonction affine de la fréquence de l’onde lumineuse incidente (et non de son intensité) :

$$(484) \quad E = h(\nu - \nu_a) = \hbar(\omega - \omega_a) \text{ avec } h = 2\pi\hbar = 6.610^{-34} J.s$$

Les dimensions de la constante h indiquent que cette constante ne peut être exprimée en fonction des autres constantes fondamentales de la physique comme la vitesse de la lumière ou la charge des électrons. On trouve la même constante quelque soit le métal utilisé. Par contre, ω_a dépend de la nature de l’échantillon. Il s’agit d’un point fondamental qui démontre que cet effet ne peut pas être expliqué dans le cadre de la mécanique classique.

Cette expérience démontre par ailleurs la nature corpusculaire de la lumière (l'électron absorbe un photon et celui-ci est éjecté si l'énergie du photon est suffisante. Le fait que l'effet soit indépendant de l'intensité laisse à penser que les choses arrivent par grains élémentaires ou quanta). Comme

$$(485) \quad E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 = \hbar^2 \omega^2$$

avec une masse $m = 0$ pour les photons

$$(486) \quad pc = \hbar\omega = h\nu \implies p = \frac{h\nu}{c} = \hbar k$$

ce qui fait le lien entre la quantité de mouvement du photon et sa longueur d'onde.

- *Oscillateur harmonique.* Une expérience relativement récente⁶ concerne les molécules diatomiques. Dans une telle molécule, par exemple le monoxyde de carbone CO, les deux atomes peuvent vibrer l'un par rapport à l'autre le long de l'axe de la molécule. Pour des faibles distorsions, ces vibrations sont sinusoïdales et la fréquence de l'oscillateur harmonique correspondant est $2\pi\nu = \sqrt{k/m}$. L'expérience est capable de mesurer le spectre d'oscillation de cet oscillateur harmonique. Celles-ci sont quantifiées par niveaux équidistants :

$$(487) \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu, \quad n \geq 0$$

- *Quantification des niveaux atomiques.* En 1914, Franck et Herz font une découverte surprenante. Nous bombardons des atomes de mercure avec des électrons et nous mesurons la différence d'énergie entre les électrons incidents et les électrons sortants. Tant que l'énergie du faisceau incident est inférieure à un seuil, l'énergie du faisceau sortant est identique. Par contre, lorsque celle-ci est supérieure à un seuil, il existe des électrons sortants dont l'énergie est inférieure de 4.9 eV très exactement. À l'époque, cette expérience confirme les idées toutes récentes de Niels Bohr. Les niveaux des atomes sont quantifiés. Il faut que le faisceau incident ait au moins une énergie égale à la différence entre les deux premiers niveaux pour que le faisceau incident perde, c'est-à-dire donne, de l'énergie.

NOTE 5. *En résumé, les effets quantiques sont des phénomènes aléatoires et il va falloir employer le langage des probabilités. Mais les phénomènes d'interférences démontrent qu'il vaut mieux considérer une AMPLITUDE de probabilité qui va jouer un rôle analogue à celui du champ électrique dans les fentes d'Young. La densité de probabilité sera le carré de la norme de cette amplitude. Pour terminer, signalons :*

- *Les grandeurs physiques qui paraissent continues à l'échelle macroscopique sont discontinues, c'est-à-dire quantifiées, à l'échelle microscopique.*
- *On perturbe un système lorsqu'on fait une mesure.*
- *Les interférences quantiques ne sont pas limitées à des objets microscopiques comme des particules élémentaires (électrons, neutrons etc.). Les expériences d'interférences quantiques ont aussi été démontrées pour des objets comme des molécules de C₆₀ (Cf. Figball).*

Symétries et représentation des groupes

Nous avons vu que les symétries jouent un rôle fondamental en mécanique classique. Rappelons le théorème de Noether : si il existe une symétrie continue, c'est-à-dire qui peut être rendue infinitésimale, alors il existe une quantité conservée. L'invariance sous translation dans l'espace implique donc la conservation de la quantité de mouvement. Qu'en est-il en mécanique quantique ? Les symétries et, donc les groupes, sont en fait partout, du plus fondamental, comme la définition d'une particule élémentaire, au plus pratique. L'effet d'une perturbation sur un système quantique peut en effet prédit en examinant la structure des représentations irréductibles du groupe de symétrie de l'hamiltonien non perturbé. Dans tous les cas, il s'agit de traduire l'action d'une opération de symétrie sur les quantités physiques. L'ensemble des matrices, de dimension adaptée à la quantité physique considérée, constitue une représentation qui satisfait aux lois de composition du groupe⁷ :

$$(488) \quad \Lambda(R_i)\Lambda(R_j) = \Lambda(R_i \circ R_j)$$

Si il y a un des groupes continus, il y a donc deux choses :

6. G. J. Schulz, Phys. Rev 135, 988, 1964.

7. En mécanique quantique, le vecteur d'état n'est défini qu'à une phase près. Il faut donc modifier cette relation en ajoutant un facteur de phase, et on parle de représentation projective.

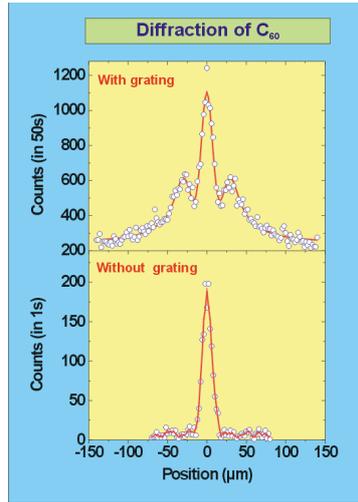


FIGURE 7 – Franges d'interférences quantiques observées avec des molécules de C_{60} (Arndt et al., 1960). La courbe en trait plein correspond au calcul et son accord avec l'expérience est remarquable.

- (1) Des générateurs infinitésimaux (d'où des identités remarquable pour les commutateurs de ces générateurs : une algèbre de Lie)
- (2) Un lien entre les propriétés d'invariance et les lois de conservation.

EXEMPLE 13. *Considérons une rotation d'angle θ autour de Oz . Cette rotation est représentée par une matrice*

$$(489) \quad R(\vec{\theta}) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et pour une rotation infinitésimale

$$(490) \quad \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\delta\theta & 0 \\ \delta\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Nous avons donc :

$$(491) \quad \delta x = -i\delta\theta \sum_{j=1,3} (J_z)_{i,j} x_j$$

où le générateur J_z est défini par :

$$(492) \quad J_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nous pourrions aussi définir des rotations autour de x et de y avec des générateurs J_x et J_y . Ces matrices de rotation infinitésimales satisfont aux relations de commutation :

$$(493) \quad [J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$$

C'est ce qu'on appelle une algèbre de Lie. Une rotation se met sous la forme d'une exponentielle

$$(494) \quad R(\vec{\mathbf{u}}, \theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - i \frac{\theta}{N} J_z \right]^N = \sum_{k \geq 0} \frac{(-i\theta)^k}{k!} J_z^k = e^{-i\theta J_z}$$

et pour une rotation quelconque

$$(495) \quad R(\vec{\mathbf{u}}, \theta) = e^{i\theta \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\mathbf{J}}}$$

En physique classique, le groupe le plus naturel est celui des transformations de Galilée. Ce sont les transformations linéaires qui conservent l'intervalle de temps entre deux événements et la distance entre deux événements (translation dans le temps, rotation, translation dans l'espace). Pour tenir compte des

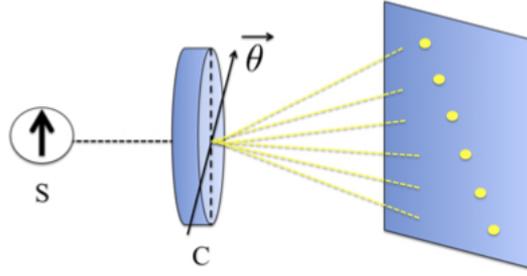


FIGURE 8 – Illustration d'un appareil de Stern et Gerlach démontrant la possibilité de 7 états internes pour une particule de spin $5/2$. Le nombre de taches ne dépend pas de l'orientation de l'appareil.

effets relativistes, il faut changer de groupe et tenir compte des transformations linéaires qui conservent l'intervalle d'univers (translation, transformations de Lorentz)

$$(496) \quad \Delta s^2 = c^2(t_1^2 - t_2^2) - (\vec{r}_1^2 - \vec{r}_2^2)$$

La classification de Wigner montre que les représentations irréductibles de ce groupe sont caractérisées par deux nombres : un nombre réel positif, appelée masse, et un nombre ne pouvant prendre que des valeurs entières ou demi-entières, nombre appelé spin. En théorie des champs, on associe à chaque particule une représentation irréductible du groupe de Poincaré. Les particules de spin entier, par exemple des photons, sont appelés bosons, les particules de spin demi-entier, par exemple les électrons, sont des fermions. Fermions et bosons ont des propriétés physique en totale opposition.

Les représentations irréductibles de $SO(3)$ sont appropriées pour décrire les dégénérescences d'états possédant une symétrie sphérique en dimension 3. Mais il existe de nombreux systèmes pour lesquels les opérations sur les coordonnées classiques ne suffisent pas et où ces opérations doivent être complétées par des opérations sur des "états internes" sans analogue en physique classique. C'est le cas pour les électrons possédant un spin $1/2$ et ayant donc $2S + 1 = 2$ états internes. Nous choisissons comme vecteur de base :

$$(497) \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Cette base d'états à deux dimensions est incompatible avec les dimensions des représentations irréductibles de $SO(3)$. Nous devons donc chercher un autre groupe et $SU(2)$ permettra de caractériser ces états internes.

$SU(2)$ est défini en demandant :

- (1) que $|x|^2 + |y|^2$ soit invariant ;
- (2) que le déterminant soit égal à 1.

La matrice de transformation doit donc avoir la forme

$$(498) \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

avec $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Le groupe a donc 3 paramètres.

Pour représenter chaque élément du groupe, nous pouvons utiliser les matrices de Pauli :

$$(499) \quad \begin{pmatrix} a_r + ia_i & b_r + ib_i \\ -b_r + ib_i & a_r - ia_i \end{pmatrix} = \underbrace{a_r}_{=1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \underbrace{ia_i}_{=\sigma_x} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \underbrace{ib_r}_{=\sigma_y} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \underbrace{ib_i}_{=\sigma_z} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Si nous définissons les matrices $X_i = -1/2i\sigma_i$, $i = 1, 2, 3$, nous avons les relations de commutations :

$$(500) \quad [X_i, Y_j] = \epsilon_{ijk} X_k$$

ce qui montre que les matrices de Pauli jouent un rôle analogue aux générateurs de $SO(3)$.

Polarisation du photon

Nous montrons dans ce paragraphe que l'état de la lumière fait naturellement intervenir un espace vectoriel de dimension 2. Notre approche utilise une analogie classique. Elle sera reprise sans analogie dans le cas d'une autre variable (le spin).

On sait que la lumière est un champ électromagnétique vibrant perpendiculairement à sa direction de propagation. Elle peut être polarisée, c'est-à-dire qu'elle vibre dans une direction particulière. Autrement dit, si z est la direction de propagation, le champ $\vec{\mathbf{E}}$ a pour composantes :

$$(501) \quad \vec{\mathbf{E}} = E_{0x} \cos(\omega t - \delta_x) \hat{u}_x + E_{0y} \cos(\omega t - \delta_y) \hat{u}_y$$

et le vecteur pertinent pour décrire un état de polarisation \hat{n}_θ est donné par l'angle θ :

$$(502) \quad \cos \theta = \frac{E_{0x}}{E_0} \quad \sin \theta = \frac{E_{0y}}{E_0}$$

avec

$$(503) \quad E_0^2 = E_{0x}^2 + E_{0y}^2$$

Cette polarisation peut être observée au moyen d'un dispositif expérimental approprié, un polarisateur, avec deux canaux de sortie. Le premier canal, appelé voie ordinaire, laisse sortir la fraction du champ électrique polarisée dans la direction de l'analyseur (signal +1). L'autre fraction du champ électrique polarisée, quant à elle, perpendiculairement à l'axe \mathbf{u} du polariseur sort dans le canal extraordinaire (signal -1).

Autrement dit, un polarisateur réalise ce qu'on appelle en mathématiques une décomposition sur une base. Si le polarisateur fait un angle α dans le plan (xoy) , seule la composante du champ électrique suivant la direction α sera transmise. Cette composante est

$$(504) \quad \cos(\theta - \alpha)$$

et l'intensité transmise est donc

$$(505) \quad \cos^2(\theta - \alpha)$$

Comme on peut aussi additionner des faisceaux (cohérents), et donc sommer des états de polarisation, l'état de polarisation est naturellement décrit par un vecteur dans un espace vectoriel de dimension 2 avec toutes les opérations mathématiques (projection, produit scalaire etc.).

Diminuons l'intensité du rayonnement pour arriver au photon unique. Un photon polarisé est un objet quantique dont voici les propriétés qui nous intéresseront par la suite :

- (1) Un photon peut être polarisé suivant un axe quelconque.
- (2) Un photon polarisé suivant un axe d'angle θ passant par un filtre polarisant dont l'axe fait un angle α aura une chance $\cos^2(\theta - \alpha)$ d'être transmis. Lorsque $\theta \neq \alpha$, la probabilité est donc non-nulle.
- (3) Lorsque la probabilité d'être transmis n'est ni 0, ni 1, le passage du photon au travers du filtre polarisant est une variable aléatoire. Lorsque l'axe de polarisation du (filtre n'est pas égal à θ , i.e. $\alpha \neq \theta$, il n'y a aucun moyen de savoir avec certitude quelle est la polarisation du photon. Cette dernière propriété est propre à un système quantique, alors que les deux premières sont du domaine classique (un photon ne peut être coupé en deux et une partie ne peut passer dans un état alors que l'autre passe dans un autre état).

Pour décrire cet objet, nous utiliserons un formalisme naturel dans le cas d'une onde monochromatique où le champ électrique $\mathbf{E}(t)$ oscille dans un plan orthogonal à la direction de propagation, disons z :

$$(506) \quad E_x = E_0 \cos \theta \cos(\omega t)$$

$$(507) \quad E_y = E_0 \sin \theta \cos(\omega t)$$

où θ est l'angle de polarisation, polarisation correspondante à la direction \hat{n}_θ . Appelons $|x\rangle$, respectivement $|y\rangle$, un état de polarisation suivant l'axe x , respectivement y . Nous utiliserons ces deux vecteurs comme base d'un espace vectoriel pour décrire l'état de polarisation θ comme la superposition d'une onde polarisée suivant x et suivant y :

$$(508) \quad |\theta\rangle = \cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle$$

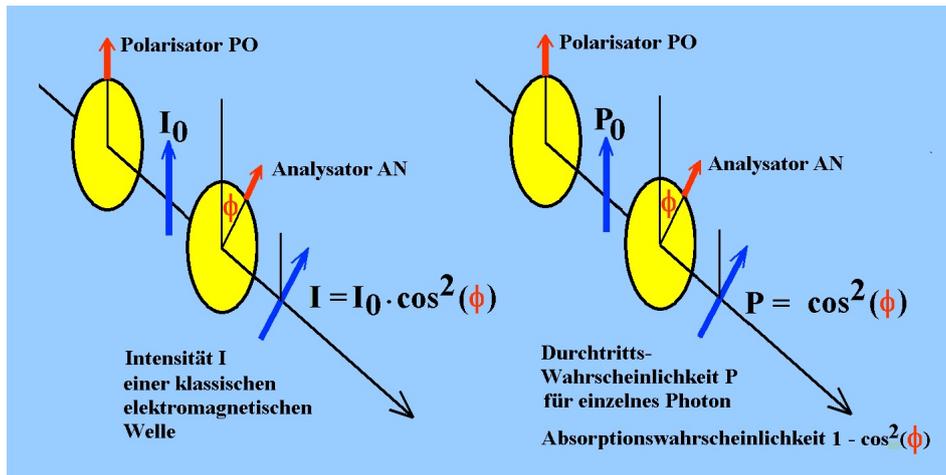


FIGURE 9 – Polarisation de la lumière (figure de gauche) et passage à la limite du photon unique (figure de droite)

L'amplitude de probabilité d'observer la polarisation suivant x est donc le produit scalaire, c'est-à-dire la projection de \mathbf{E} sur l'axe x :

$$(509) \quad \langle \theta | x \rangle = \cos \theta$$

alors que l'intensité mesurée est le carré de norme de cette projection : $\cos^2 \theta$. On retrouve naturellement pour une intensité 1

$$(510) \quad \langle \theta | \theta \rangle = 1$$

Un état du photon peut donc être représenté par un vecteur d'état

$$(511) \quad |\phi\rangle = a|x\rangle + b|y\rangle$$

et la mesure est la même pour les vecteurs d'état $|\phi\rangle$ et $e^{i\mu}|\phi\rangle$, où $\mu \in \mathbb{R}$ quelconque. Ces deux vecteurs représentent donc le même état physique puisqu'il est impossible de les distinguer dans cette expérience.

REMARQUE 12. Représenter l'état du système comme superposition de deux états de base est déjà très différent de la représentation classique. Un objet classique est représenté par un seul vecteur : un bit de stockage classique est soit à 0, soit à 1, mais pas comme une combinaison des deux !

RÈGLE DE MULTIPLICATION ET D'ADDITION DES AMPLITUDES : Revenons à l'expérience sur le polariseur avec un photon d'angle de polarisation θ . Introduisons à la suite du premier un deuxième polarisateur faisant un angle α qui sert d'analyseur. Seule sera transmise la composante du champ électrique suivant cette direction. Montrons que l'intensité transmise est $I_0 \cos^2(\theta - \alpha)$, où I_0 est l'intensité à la sortie du polariseur d'angle θ . Soient les amplitudes de probabilité déduites des règles de projection (car faire une mesure avec un polarisateur, c'est faire une projection sur l'axe du polarisateur) :

$$(1) \quad a(\theta \rightarrow x) = \cos \theta \text{ et } a(x \rightarrow \alpha) = \cos \alpha.$$

$$(2) \quad a(\theta \rightarrow y) = \sin \theta \text{ et } a(y \rightarrow \alpha) = \sin \alpha$$

Le premier cas correspond à la partie de l'onde initialement polarisée suivant la direction θ , se propageant dans le canal x pour être finalement détectée par l'analyseur faisant un angle α . Le deuxième, quant à lui, correspond à la partie de l'onde qui se propage suivant y .

Les deux trajets suivant l'angle de polarisation suivant x et l'angle de polarisation suivant y correspondent à deux canaux a priori distincts, mais rien ne permet de savoir si le photon a suivi l'un ou l'autre canal. L'amplitude totale est donc la somme des amplitudes sur chaque canal

$$(512) \quad a_{total} = a_x + a_y$$

On somme les amplitudes car il n'est pas possible de choisir le chemin. Par contre, l'émission du photon dans le canal x , ou y , et son passage au travers l'analyseur étant deux événements SUCCESSIFS, on a :

$$(513) \quad a_x = a(\theta \rightarrow x)a(x \rightarrow \alpha)$$

$$(514) \quad a_y = a(\theta \rightarrow y)a(y \rightarrow \alpha)$$

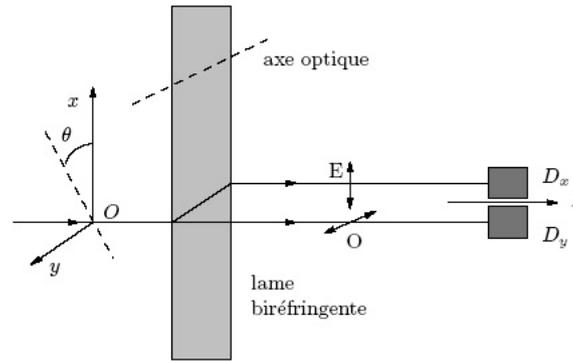


FIGURE 10 – Décomposition de la polarisation par une lame biréfringente dont l'axe optique est dans le plan xoz . Le rayon ordinaire est polarisé horizontalement alors que le rayon extraordinaire est, lui, polarisé verticalement. Les deux rayons sont analysés par deux détecteurs différents.

On a donc bien :

$$(515) \quad a_{total} = \cos(\theta - \alpha)$$

et sa norme au carré redonne bien $\cos(\theta - \alpha)^2$.

REMARQUE 13. *Nous avons utilisé le même formalisme pour décrire la polarisation de la lumière quelque soit son intensité. En particulier, nous avons supposé que nous pouvions décrire les propriétés d'un photon unique à l'aide d'une probabilité. L'utilisation des statistiques n'a de sens, en principe, que pour un grand nombre de photons. L'interprétation physique dans le cas d'un photon unique est donc radicalement modifiée. On ne peut pas connaître le "sort" d'un photon unique, mais seulement la probabilité avec lequel il peut être détecté. Notons que la description la plus complète possible donnée par la mécanique quantique utilise les amplitudes de probabilités et pas seulement les probabilités.*

Interprétation

Dans le paragraphe précédent, nous avons commis une fraude. Nous avons diminué l'intensité de la lumière pour arriver au photon unique parce que le formalisme est inchangé. L'interprétation physique est en fait radicalement différente dans limite d'un photon unique et la limite classique faisant intervenir un très grand nombre de photons.

Reprenons l'expérience suivante. La lumière peut être envoyée dans un dispositif qui sépare la lumière en deux composantes polarisées de façon orthogonale (rayons extraordinaires et ordinaires). Si les rayons sont physiquement séparés, la lumière peut être détectée par deux détecteurs différents (Cf. Fig 10). Si la lumière est polarisée suivant x , elle sera détectée par D_x , respectivement par D_y (la direction de propagation est suivant z).

Si on envoie des photons un par un, alors

- (1) pour un photon, un seul détecteur est déclenché. Les photons ne se coupent pas en deux.
- (2) La probabilité p_x de déclenchement de D_x est $\cos^2 \theta$ ($\sin^2 \theta$ pour D_y).

Pour retrouver la limite classique, on considère un ensemble de photons. Si N est le nombre total de photons et N_x le nombre de photons détectés dans D_x :

$$(516) \quad p'_x = \frac{N_x}{N}, N \gg 1$$

$$(517) \quad p'_y = \frac{N_y}{N}, N \gg 1$$

(518)

Nous avons $p_x = p'_x$. Mais les probabilités sur les variables classiques sont des probabilités sur des ensembles alors que les probabilités sur les variables quantiques sont des probabilités individuelles. L'aspect probabiliste en physique classique vient toujours du fait qu'il existe des variables dont on se refuse de tenir compte (par manque de précision sur des mesures). Nous verrons que l'aspect probabiliste

de la mécanique quantique n'est pas dû à des variables cachées que l'on ne maîtrise pas. Autrement dit, pour un seul photon donné, nous ne pouvons pas prédire s'il va déclencher D_x ou $D - y$ dans la figure 10.

Mesure

Si nous décidons qu'un état du système est représenté par un vecteur dans un espace vectoriel, comment représentons-nous la mesure d'une quantité physique (énergie, position, impulsion etc ...) ?⁸

Supposons pour l'instant que cet espace vectoriel soit de dimension finie (ce qui est naturellement faux ...). Intuitivement, les notions de test et de mesure sont reliées. Si je teste une particule dans l'état $|\phi\rangle$ et que le résultat de la mesure donne a_n , il existe un vecteur « spécial », disons $|n\rangle$, associé au résultat a_n . Nous adopterons l'adage quantique suivant : **TESTER UNE PROPRIÉTÉ PHYSIQUE ASSOCIÉE AU VECTEUR $|n\rangle$, C'EST CALCULER LA FRACTION DE $|n\rangle$ QUI EST DANS L'ÉTAT $|\phi\rangle$.** Autrement dit, c'est faire son produit scalaire.

L'instrument le plus approprié pour faire passer le test $|n\rangle$ est donc le projecteur sur le vecteur $|n\rangle$

$$(519) \quad P_n = |n\rangle\langle n|$$

Cet opérateur a pour valeur propre soit 1, soit 0 (passe ou ne passe pas le test). Nous supposons que faire une mesure et obtenir le résultat a_n , c'est projeter $|\phi\rangle$ sur l'état $|n\rangle$ dont le résultat est a_n . En conséquence, juste après la mesure, l'état du système est toujours $|n\rangle$. Ce résultat est souvent présenté sous l'acronyme du postulat RPO (réduction du paquet d'onde). En réalité, ce n'est pas un postulat. Si nous décidons qu'une mesure est un projecteur, cela ne peut pas être autrement.

Comment alors représenter la mesure d'une quantité physique \mathcal{A} ? Tuons le suspense et disons qu'il nous faudra un opérateur A dans cet espace des états. Nous allons utiliser la décomposition spectrale de A . Encore faut-il que :

- (1) A ait des valeurs propres réelles car les résultats des mesures sont des nombres ;
- (2) Que les vecteurs propre de A constituent une base.

Dans tout espace de Hilbert, il existe des opérateurs hermitiens A (i.e. $a_{i,j} = a_{j,i}^*$). L'opérateur A va représenter de façon mathématique la mesure \mathcal{A} dont les valeurs propres a_n donne les résultats possibles de la mesure. L'état $|n\rangle$ est donc un vecteur propre de A avec la valeur propre RÉELLE a_n

$$(520) \quad A|n\rangle = a_n|n\rangle$$

qui peut être éventuellement dégénérée (noté alors $|n, r\rangle$).

Le projecteur sur le sous-espace de vecteurs propres associé a_n est :

$$(521) \quad P_n = \sum_r |n, r\rangle\langle n, r|$$

et la mesure moyenne de \mathcal{A} du système PRÉPARÉ⁹ dans l'état $|\phi\rangle$ s'obtient en projetant $|\phi\rangle$ sur toutes les possibilités n

$$(522) \quad \langle A \rangle_\phi = \sum_{n,r} \langle \phi | n, r \rangle a_n \langle n, r | \phi \rangle = \langle \phi | A | \phi \rangle$$

propriété qui sera démontrée plus loin. En règle générale, A est un opérateur différentiel linéaire.

La généralisation aux espaces de dimension infinie n'est nullement évidente, bien qu'elle soit nécessaire en mécanique quantique. Un opérateur hermitien n'est pas nécessairement auto-adjoint, le spectre des valeurs propres peut être continu et discret etc. Si la dimension est infinie, nous décidons que seuls les vecteurs pouvant être normalisés représentent un état physique.

$$(523) \quad \text{Si } |\phi\rangle = \sum_i \phi_i |i\rangle \text{ alors } \sum_i |\phi_i|^2 \text{ est fini.}$$

Dans ce cas, toutes les sommes sont remplacées par des intégrales et les delta de Kronecker par des δ de Dirac. Bon, on verra plus tard ...

8. On parle souvent d'observable, bien que cette terminologie n'apporte pas grand chose.

9. Le mot préparé n'est pas anodin. On s'est débrouillé pour le système soit dans l'état $|\phi\rangle$ avec une probabilité 1 avant de faire la mesure.

Sur portable d'écoutes

Nous sommes 49 millions en France à avoir cédé aux joies du téléphone portable. Une aubaine pour Orange, Bouygues, SFR et consorts. Mais aussi pour la police.

FIGURE 11 – C'est toujours d'actualité ...

Propriétés physiques, mesure et opérateurs

À toute propriété physique (énergie, position, impulsion etc.) , \mathcal{A} , correspond un opérateur hermitien A agissant dans l'espace des états.

DÉFINITION 21. Soit $(|n\rangle)_n$ l'ensemble des vecteurs propres de A associées aux valeurs propres a_n éventuellement dégénérées, i.e. $A|n\rangle = a_n|n\rangle$. Nous avons :

- (1) Si le système est dans l'état $|\varphi\rangle$ et si la mesure de \mathcal{A} donne à tous les coups a_n , alors $|\varphi\rangle = |n\rangle$ (à tous les coups veut dire sur un nombre arbitrairement grand d'essais) ;
- (2) Si le système est dans l'état $|\varphi\rangle$, alors l'amplitude probabilité d'obtenir a_n est le produit scalaire $\langle\varphi|n\rangle$.

COROLLAIRE 2. Si le système est dans l'état φ , alors la mesure de \mathcal{A} donne

$$(524) \quad \langle A \rangle_\varphi = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$$

Il suffit en effet d'utiliser le projecteur sur la base $|n\rangle$ supposée non dégénérée :

$$(525) \quad P = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

avec la probabilité $p_n = \langle n | \varphi \rangle \times \langle \varphi | n \rangle$ d'être dans l'état $|n\rangle$

$$(526) \quad \langle A \rangle_\varphi = \sum_n p_n a_n = \sum_n \langle n | \varphi \rangle a_n \langle \varphi | n \rangle = \langle \varphi | A | \varphi \rangle$$

où le premier terme est la somme usuelle des probabilités conditionnelles : la mesure donne a_n à condition d'être dans l'état $|n\rangle$.

DÉFINITION 22. La règle est la suivante : Il peut arriver que la mesure d'une propriété donne la valeur propre a_n associé au vecteur propre $|n\rangle$ (A est supposé non-dégénéré). Immédiatement après la mesure, le système est dans l'état $|n\rangle$. Autrement dit, la mesure a projeté le vecteur $|\varphi\rangle$ sur le vecteur propre $|n\rangle$.

Il peut arriver que deux mesures soient incompatibles. Imaginons en effet deux propriétés physiques \mathcal{A} et \mathcal{B} . Si nous mesurons \mathcal{A} en premier et obtenons a_n , nous avons projeté l'état sur $|a_n\rangle$. Il n'y a aucune chance en règle générale pour que qu'un vecteur propre de A soit aussi un vecteur propre de B . Si nous mesurons la valeur b , ce que nous faisons en faisant cette double mesure est que nous mesurons la probabilité de passer de $|a_n\rangle$ à $|b_n\rangle$. D'où :

DÉFINITION 23. On sait que si deux opérateurs commutent, il sont nécessairement diagonalisables sur une base propre commune. Deux mesures sont dites incompatibles si le commutateur des deux opérateurs est non nul :

$$(527) \quad [A, B] = AB - BA \neq 0$$

THÉORÈME 27. On rappelle que pour une espace de Hilbert de dimension finie :

$$(528) \quad \text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$$

Pour un espace de Hilbert de dimension infinie, prendre la trace n'est pas une opération qui est définie. Comme les relations de commutation en mécanique quantique entraînent des relations d'incertitude (ex. $[x, p] = i\hbar \implies \langle \Delta x \Delta p \rangle \geq 1/2\hbar$), nous avons besoin des espaces de Hilbert de dimension infinie pour avoir des relations d'incertitude. Voir plus loin.

Cryptage quantique

¹⁰ La grande nouveauté, depuis le début des années 1980, est la possibilité de manipuler et d'observer des objets quantiques élémentaires individuels : photons, atomes, ions, etc. C'est cette possibilité de manipuler et d'observer des objets quantiques élémentaires qui est à l'origine de l'information quantique, où ces objets quantiques élémentaires permettront de construire physiquement les qubits. Cela dit, aucun concept fondamentalement nouveau n'a été introduit depuis les années 1930. La cryptographie quantique est une expression « marketing » et un peu trompeuse. Il ne s'agit pas de chiffrer un code mais de s'assurer que la transmission de la clef qui permet de le chiffrer (et de le déchiffrer !) n'a pas été interceptée lors de sa transmission. Il s'agit donc d'une cryptographie à clef secrète qui exige a priori la sécurité absolue du canal par lequel elle est distribuée. Ici, nous allons garantir le secret de la clef sans faire d'hypothèse sur la sécurité offerte par les canaux pour la distribuer : nous saurons si quelqu'un a essayé de déchiffrer la clef, car les oreilles indiscretes laissent des traces. Suivons la référence [2] et disons que le principe de l'affaire est simple :

- (1) Toute mesure perturbe le système ;
- (2) Donc, s'il n'y a pas de mesure, il n'y a pas eu de perturbation ;
- (3) S'il n'y a pas eu de perturbation, cela veut dire qu'il n'y a pas eu d'espionnage.

Nous discuterons ici le protocole BB84 (Bennet - Brassard, 1984).

PRÉLUDE :

Un message est une suite binaire de 0 et 1. Par exemple, 100 111 010 est le message à chiffrer. L'algorithme de G. Vernam (AT&T, 1917) permet de chiffrer ce message à l'aide de la clef 001 100 011 en appliquant le « ou exclusif » \oplus :

$$(529) \quad 100\ 111\ 010 \oplus 001\ 100\ 011 = 101\ 011\ 001$$

Comme $(m \oplus k) \oplus k = m$, on déchiffre le message avec la même clef.

$$(530) \quad 101\ 011\ 001 \oplus 001\ 100\ 011 = 100\ 111\ 010$$

Puisque nous faisons de l'informatique quantique, nous ne parlerons plus de photon mais de qubit, terme générique pour une unité quantique dont l'état est la superposition de deux états de base. Les deux protagonistes qui cherchent à s'envoyer des messages secrets sont conventionnellement appelés Carla (émetteur) et Nicolas (receveur), à moins que ce ne soit Alice et Bob¹¹. Les oreilles indiscretes sur la ligne de transmission sont celles d'Ève pour « eavesdropping ». On pourra l'appeler Christiane si on veut.

Bref, nos deux protagonistes cherchent à envoyer la clef 001 100 011. Pour coder 0 et 1, Carla dispose de photons qu'elle est capable de préparer dans des états quantiques bien déterminés. Son instrument lui permet de coder de deux façons différentes :

- Soit de les polariser suivant x ou y : si elle polarise un photon dans l'état $|x\rangle$, le bit est à 0, 1 dans l'autre cas.
- Soit de les polariser dans une base à 45° : le bit d'information sera donc à 0 si le photon est polarisé suivant la première diagonale et 1 sinon.

TABLE 1 – Transmission d'une clef entre Carla et Nicolas

Clef	0	0	1	1	0	0	0	1	1
Base choisie par Carla	+	+	×	+	×	×	+	+	×
Axe de Polarisation du Photon envoyée par Carla	–	–							
☺ ?									
Base choisie par Nicolas	×	+	×	+	×	+	+	+	×
Mesure de Nicolas									
Bits retenus									

ACTE 1, SCÈNE 1 :

¹⁰. D'après un exposé de P. Jorrand, Laboratoire Leibniz, Grenoble. On pourra aussi consulter cette référence[2].

¹¹. La presse satirique paraissant le mercredi fourmille d'exemples de communications téléphoniques interceptées. Le choix des noms des protagonistes Alice et Bob est canonique. Les autres prénoms, moins.

- (1) Carla construit une suite aléatoire de 0 et de 1, 4 fois plus longue que la clef confidentielle. On suppose que la clef qui doit être transmise est de N bits, avec on choisira N grand.
- (2) Carla envoie ces 0 et ces 1, un par un, codés chaque fois par un qubit (un photon). Pour chaque 0 et chaque 1, elle choisit au hasard entre les deux codages possibles.

ACTE 1, SCÈNE 2 : Nicolas ne sait

- (1) Ni si Carla a codé 0 ou 1 ;
- (2) Ni dans quelle base, \times ou $+$, Alice a codé ce 0 ou ce 1.
- (1) Pour chaque qubit reçu, Nicolas choisit une base au hasard dans la laquelle il va le mesurer ;
- (2) Il fait la mesure.

SITUATION À LA FIN DE L'ACTE 1 :

- (1) Pour chaque 0 ou 1 de la suite de Carla, Nicolas obtient un 0 ou un 1.
- (2) Comme les bases sont choisies au hasard, il n'y a coincidence totale entre les deux résultats que si et seulement si les deux bases sont identiques.

TABLE 2 – Corrélations entre l'émission (axe horizontal) et la réception (colonne verticale) : i.e. probabilité d'avoir la même valeur.

	$+$	\times
$+$	100 %	50 %
\times	50 %	100 %

LES INDISCRETIONS DE CHRISTIANNE : Pendant l'acte 1, Christiane a pu intercepter les qubits. La seule chose qu'elle puisse faire est de :

- (1) Choisir au hasard la base dans laquelle elle mesure, c'est-à-dire $+$ ou \times .
- (2) Renvoyer à Nicolas ce qu'elle a mesuré (toutes les variantes donneront le même résultat ici).

Donc :

- (1) Chaque fois que Christiane choisit la bonne base, elle renvoie la bonne information. On ne peut pas détecter l'indiscrétion.
- (2) Si elle ne choisit pas la bonne base, le qubit renvoyé par Christiane est nécessairement dans un état différent de celui qu'elle avait reçu (car elle le code dans la mauvaise base). Son indiscrétion va laisser des traces ... car dans 50 % des cas, la mesure effectuée par Nicolas donnera le mauvais résultat.

ACTE 2, SCÈNE 1

- (1) Carla dit à Nicolas la suite des bases qu'elle a utilisée (sans révéler si elle a codé 0 ou 1!). C'est-à-dire qu'elle révèle la séquence avec laquelle elle a tourné son polarisateur de 45° .
- (2) Nicolas fait de même. Cette transmission peut être publique.
- (3) Ils ne conservent que les événements 0 ou 1 qui n'ont été codés que sur la même base : Environ la moitié des événements sont donc utiles : nous passons de $4N$ à $2N$.

ÉPILOGUE

- (1) Que se passe-t-il si Christiane n'a pas espionné ? Carla et Nicolas sont sûrs que d'avoir la même suite de 1 et de 0 sur la suite retenue à la scène précédente.
- (2) Si Christiane a espionné, il y a 50 % de chance que la suite retenue ait une erreur sur les $2N$ bits restant. Pour le savoir, Carla et Nicolas sacrifient la moitié de la série retenue à l'étape $n - 1$, c'est-à-dire choisissent N parmi les $2N$ restants, et comparent les résultats 0 ou 1. Deux cas sont alors possibles :
 - (a) Les résultats sont les mêmes. La clef qui sera utilisée correspond au $1/4$ du message qui reste (les N bits qui restent et qui n'ont pas été sacrifiés).
 - (b) Les résultats ne sont pas les mêmes (avec une erreur dans 25 % des cas). Il y a eu indiscrétion. On recommence tout à partir de zéro.

Les principes de base de la mécanique quantique

Que veut-on faire ?

- Décrire l'état du système. En mécanique classique, l'état du système est décrit par le couple position-quantité de mouvement (x, p) . En mécanique quantique, la particule, ou un ensemble de particule, sera représenté par un vecteur d'état $|\psi\rangle$ qui donne des informations sur x, p . Savoir si ce vecteur donne une représentation statistique de plusieurs systèmes ou représente un système unique n'est pas une question tranchée à l'heure actuelle. Si l'état de la particule est spécifié par sa position x avec un vecteur d'état $|x\rangle$, le produit scalaire

$$(531) \quad \langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$

définit la fonction d'onde $\psi(x)$ pour l'état $|\psi\rangle$. Si l'état de la la particule est spécifié par la quantité de mouvement p , avec un vecteur d'état $|p\rangle$, le produit scalaire

$$(532) \quad \langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$$

donne la même fonction d'onde mais dans la représentation p .

En une dimension

$$(533) \quad \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x)$$

où \hbar est introduite pour des raisons de dimension.

- Connaître les lois d'évolution, c'est-à-dire les équations du mouvement. En mécanique classique, cette loi découle d'un principe géométrique de minimisation d'une fonctionnelle (principe d'Euler-Lagrange qui donne les équations de Newton).
- Établir les lois donnant le résultat d'une mesure. En d'autres mots, comment une grandeur physique peut-elle être représentée dans l'espace des états. Au risque de tuer le suspense, une mesure physique sera représentée par un opérateur sur le vecteur d'état.
- Attention, les opérateurs ne commutent pas nécessairement entre eux. A priori, deux opérateurs hermitiens quelconque ne peuvent pas toujours être diagonalisés dans la même base. Comme un vecteur propre d'un opérateur A est associé avec la mesure de A donnant la valeur propre a_i avec 100% de chance, la mesure simultanée de deux opérateurs qui ne commutent pas ne pourra être que statistique.

Opérateur d'évolution

Soit $|\psi(t_0)\rangle$, l'état du système à l'instant t_0 . Nous cherchons à connaître $|\psi(t)\rangle$, pour $t > t_0$. Baptisons $U(t, t_0)$ l'opérateur qui associe $|\psi(t_0)\rangle$ à $|\psi(t)\rangle$ par

$$(534) \quad |\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = U(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

où la dernière égalité découle de l'invariance sous translation dans le temps. En mécanique quantique, l'évolution d'un système dans l'espace de phases était donnée par le Hamiltonien. En mécanique quantique, elle est donnée par un opérateur d'évolution (qui dépendra du Hamiltonien).

On rappelle la définition d'un opérateur conjugué A^\dagger de A :

$$(535) \quad \langle \chi|A\phi\rangle = \langle A^\dagger\chi|\phi\rangle$$

et que l'on soit en dimension finie ou infinie, on dit que A est hermitien (auto-adjoint) si

$$(536) \quad A^\dagger = A$$

On dira que l'opérateur unitaire U est unitaire si et seulement si

$$(537) \quad U^\dagger U = U U^\dagger = I$$

Nous avons le théorème suivant (Stone, Von Neuman, 1932)

THÉORÈME 28. Soit $U(t)|_{t \in \mathbb{R}}$ une famille à un paramètre telle que

$$(538) \quad \forall t \in \mathbb{R}, \psi \in H : \quad \lim_{t \rightarrow t_0} U_t(\psi) = U_{t_0}(\psi)$$

et

$$(539) \quad U_{t+s} = U_t U_s$$

Alors, il existe un opérateur auto-adjoint A tel que

$$(540) \quad U_t = e^{itA}$$

où l'exponentielle d'un opérateur est simplement définie comme

$$(541) \quad e^A = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} A^n$$

Cette définition fait sens pour des opérateurs bornés (image de boule unité bornée) et où les sommes partielles forment des suites de Cauchy qui convergent.

Considérons maintenant un système isolé. La probabilité de trouver la particule se conserve et le produit scalaire est nécessairement invariant sous évolution

$$(542) \quad \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Donc U est unitaire.

Nous réécrivons donc U sous la forme

$$(543) \quad U(t - t_0) = e^{iA(t-t_0)}$$

où $A(t - t_0)$ est un opérateur hermitien. Pour un système isolé, la mesure donne toujours le même résultat. Le vecteur d'état ne peut changer qu'à une phase près. La dépendance en temps est donc une simple multiplication :

$$(544) \quad A(t - t_0) = A \times (t - t_0)$$

qui traduit le fait que l'origine des temps est totalement arbitraire.

Si H est l'opérateur associé au hamiltonien, l'énergie du système n'est autre que la valeur moyenne

$$(545) \quad \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle$$

Pour un système isolé, l'énergie est conservée. Par conséquent, quelque soit le Hamiltonien

$$(546) \quad H = e^{-iA(t-t_0)} H e^{iA(t-t_0)}$$

donc H commute avec A . Plus simple est de choisir $A = H$ à une constant multiplicative près. La dimension de Ht doit être celle d'un nombre pur. Ht a la dimension d'une énergie fois un temps. On introduit donc la constante \hbar et on pose

$$(547) \quad U(t - t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

Attention ! pour deux matrices quelconques A, B , nous n'avons PAS

$$(548) \quad e^A e^B = e^{A+B}$$

Cette égalité est vraie si (et nous ne disons pas si et seulement si) le commutateur de A et B est identiquement nul : $[A, B] = 0$. La vraie formule est la suivante

$$(549) \quad e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}$$

États stationnaires

Considérons (547) avec $t_0 = 0$. Supposons t petit, nous obtenons

$$(550) \quad U(t, 0) = I - iHt/\hbar$$

Donc, H est le générateur des transformations infinitésimale dans le temps. C'est en fait la définition la plus générale du hamiltonien que l'on puisse donner (rappelons que si un système est invariant par translation dans le temps, alors son énergie est conservée).

REMARQUE 14. *Peut-on être plus formel ? Rappelons comment les choses se passent dans le formalisme Hamiltonien de la mécanique classique. Considérons une fonction quelconque $F(p, q)$ de*

l'espace des phases sans dépendance explicite par rapport au temps. Au cours du temps, p et q changent. Donc (si vous voulez plus qu'une coordonnée, summez sur tous les "i").

$$(551) \quad \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial F}{\partial q} \frac{dq}{dt}$$

$$(552) \quad = -\frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$(553) \quad = \{H, F\}$$

Le joli crochet est appelé crochet de Poisson.

Pour toutes fonctions $A(p_i, q_i)$ et $B(p_i, q_i)$, nous pouvons définir

$$(554) \quad \{A, B\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i}$$

Le crochet de Poisson obéit (en outre !) aux mêmes propriétés que le produit vectoriel (identité de Jacobi)

$$(555) \quad \{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$$

Cette propriété est caractéristique d'une algèbre de Lie pour les générateurs infinitésimaux d'un groupe de transformation de Lie. Considérons la transformation de l'espace

$$(556) \quad x'_i = f_i(x_1, \dots, x_n, a_1, \dots, a_r)$$

où a_1, \dots, a_n sont des paramètres.

Considérons une transformation infinitésimale liée à une variation da_i . Pour toutes les fonctions $F(x_1, \dots, x_n)$

$$(557) \quad dF = \sum_{1 \leq j \leq n} \frac{\partial F}{\partial x_j} dx_j$$

$$(558) \quad = \sum_j \left(\sum_{1 \leq i \leq r} \frac{\partial f_j}{\partial a_i} \Big|_{a=0} da_i \right) \frac{\partial F}{\partial x_j}$$

$$(559) \quad = \sum_{1 \leq i \leq r} da_i [X_i] F$$

avec les opérateurs

$$(560) \quad X_i = \sum_{1 \leq j \leq n} \frac{\partial f_j}{\partial a_i} \Big|_{a=0} \frac{\partial}{\partial x_j}$$

Les opérateurs satisfont à des relation de commutation de la forme

$$(561) \quad [X_i, X_j] = c_{ij,k} X_k$$

où les constantes $c_{ij,k}$ sont les constantes de structure du groupe.

Considérons un Espace de Hilbert de dimension 1. Tous les espaces de Hilbert de même dimension étant isomorphes quand il sont de dimension finie, il suffit de prendre pour vecteur d'onde un nombre complexe. H est donc un nombre réel : nous elle noterons E et, quitte à se lancer dans des notations, nous poserons $E = \hbar\omega$. Nous avons alors

$$(562) \quad \phi(t) = \exp[-i\omega t]$$

et nous identifions E avec l'énergie

Pour un espace de dimension n avec une base propre $|n\rangle$

$$(563) \quad |\phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0) |n\rangle$$

alors

$$(564) \quad |\phi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) \exp[-iHt] |n\rangle$$

$$(565) \quad = \sum_n c_n(0) \exp[-iE_n t] |n\rangle$$

$$(566) \quad = \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

qui donnera variation des coefficient $c_n(t)$.

Mécanique Ondulatoire

On POSTULE alors :

- La description COMPLÈTE de l'état d'un système se fait au moyen d'une fonction d'onde $\psi(x, t) \in \mathbb{C}$. On remarque que cette fonction d'onde dépend de la position uniquement (et non à la fois de x et de la quantité de mouvement p). Par définition, $\psi(x, t)$ est l'amplitude de probabilité dont nous avons besoin. la probabilité de trouver la particule dans un élément de volume d^3x centré autour de x est :

$$(567) \quad |\psi(x, t)|^2$$

- L'équation d'évolution est une équation aux dérivées partielles, c'est l'équation de Schrödinger (1927) qui est écrite pour une particule libre de masse m :

$$(568) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t)$$

- La mesure est un opérateur sur l'espace des fonctions d'onde. En particulier, la mesure de la position de la particule donne le résultat MOYEN :

$$(569) \quad \langle x \rangle = \int dx x |\psi(x, t)|^2 \text{ avec } \langle x^2 \rangle = \int dx x^2 |\psi(x, t)|^2$$

d'où une incertitude calculée à partir de l'écart quadratique :

$$(570) \quad \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

CONSÉQUENCES.

- La solution de l'équation (568) pour une particule libre donne :

$$(571) \quad \psi(x, t) = \psi_0 e^{i(px - Et)} \text{ avec : } E = p^2/2m$$

La solution est donc une onde plane de longueur d'onde λ et de pulsation ω :

$$(572) \quad \lambda = h/p \text{ et } E = \hbar\omega$$

Cette solution permet d'expliquer les expériences d'interférences à partir de la superposition d'ondes planes. L'opérateur dans (568) est un opérateur linéaire et le principe de superposition s'applique.

- L'espace des fonctions est un espace de Hilbert muni du produit scalaire

$$(573) \quad \langle \psi | \phi \rangle = \int dx \psi^*(x, t) \phi(x, t)$$

- La fonction d'onde peut être exprimée en représentation p (quantité de mouvement) en faisant la transformée de Fourier :

$$(574) \quad \psi(x, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tilde{\psi}(p, t) e^{i(px - Et)/\hbar}$$

Comme :

$$(575) \quad \langle p \rangle = \int dp p |\tilde{\psi}(p, t)|^2 \text{ avec } \langle p^2 \rangle = \int dp p^2 |\tilde{\psi}(p, t)|^2$$

nous avons la règle d'incertitude (de Heisenberg) :

$$(576) \quad \Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2, \forall \psi$$

Quantité de mouvement ET vitesse ne peuvent être donc mesurées de façon instantanée avec une précision arbitraire! Cette incertitude n'a rien à voir avec une quelconque limitation due à une précision expérimentale limitée par les techniques de mesure (voir exercice ci-dessous).

- En raison du théorème de Parseval-Plancherel, nous avons l'égalité :

$$(577) \quad -i\hbar \int dx \psi^*(x) \frac{\partial \psi}{\partial x} = \int dp \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p) p_x$$

qui permet de calculer le résultat du mesure sur la quantité de mouvement. La quantité du mouvement est donc un opérateur :

$$(578) \quad p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

qui agit sur les fonctions d'onde en représentation x .

EXERCICE 38. En dimension d , on définit la transformée de Fourier par

$$(579) \quad \tilde{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \psi(x) e^{-ix \cdot p} dx$$

où la définition est choisie de telle sorte que l'on conserve la norme (isométrie). Afin de clarifier le rôle de la constante de Planck \hbar , fixons (x_0, p_0) et considérons la fonction

$$(580) \quad \psi_\epsilon(x) = \epsilon^{-d/2} \varphi\left(\frac{x-x_0}{\epsilon}\right) e^{ip_0 \cdot x/\hbar}$$

où $\varphi(x)$ est fixée et normalisée dans $L^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{C})$. Le facteur $\epsilon^{d/2}$ est choisi de telle sorte que ψ_ϵ soit aussi normalisée. Au sens des distribution, on a la limite

$$(581) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} |\psi_\epsilon|^2 = \delta(x - x_0)$$

ce qui permet de dire de que la position de la particule est x_0 (vaut x_0) à une précision d'ordre ϵ . Montrer

$$(582) \quad \hbar^{-d/2} \tilde{\psi}_\epsilon\left(\frac{p}{\hbar}\right) = \left(\frac{\epsilon}{\hbar}\right)^{\frac{d}{2}} \tilde{\varphi}\left(\frac{\epsilon}{\hbar}(p-p_0)\right) e^{-i\frac{x_0 \cdot (p-p_0)}{\hbar}}$$

La probabilité correspondante $\hbar^{-d} |\tilde{\psi}_\epsilon(p/\hbar)|^2$ est très étalée lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, d'un facteur $\hbar/\epsilon \rightarrow \infty$. On perd donc toute information sur la quantité de mouvement en cherchant à augmenter la précision sur la position.

REMARQUE 15. Que a quantité de mouvement soit associée à l'opérateur n'est pas étonnant. Nous avons vu en mécanique classique que la quantité de mouvement était une quantité conservée pour un système invariant sous translation. Il est naturel d'associer cette quantité de mouvement l'opérateur infinitésimal des translations. Pour une translation infinitésimale $\psi(x)$ est transformée en $\psi(x - \epsilon) = \psi(x) - \epsilon d/dx \psi$. L'opérateur infinitésimal associé est donc $-d/dx$. L'opérateur associé à p^2 s'obtient à partir de $p \circ p$, soit d^2/dx^2 .

GÉNÉRALISATION. Pour une particule plongée dans un potentiel $U(x)$, l'équation de Schrödinger est :

$$(583) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t) + U(x) \psi(x, t)$$

RÉSUMÉ :

- (1) L'état d'un système est décrit par une fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$. La REPRÉSENTATION de cet état n'est pas unique. La représentation $\psi(r, t)$ en fonction des coordonnées dans \mathbb{R}^3 est équivalent à la représentation de sa transformée de Fourier $\tilde{\psi}(p, t)$. La notation $|\psi(t)\rangle$ suggère que l'on emploie des vecteurs d'états pour représenter le système.
- (2) L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde implique que nous travaillons avec des fonctions de carré sommable - car la particule est nécessairement quelque part ! Le produit scalaire dans cet espace $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ entre deux vecteurs $|\psi_{1,2}\rangle$ est défini par :

$$(584) \quad \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \int d^3r \psi_2^*(r) \psi_1(r)$$

- (3) Les espaces de Hilbert utilisés en mécanique quantique sont séparables et possèdent donc des bases dénombrables.

- (4) Deux vecteurs d'états qui diffèrent d'un facteur de phase décrivent le même état. Cela ne veut pas dire que la phase n'est pas un observable (un champ magnétique change la phase de la fonction d'onde).
- (5) Un observable, comme la position x , est associé à un opérateur \hat{A} avec la valeur moyenne $\langle a \rangle$

$$(585) \quad \langle a \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Les opérateurs hermitiens jouent un rôle spécial. Chaque grandeur physique est en effet représentée par un opérateur hermitien dont les valeurs propres sont nécessairement réelles. On mesure les valeurs propres de ces opérateurs.

- (6) L'évolution dans le temps est donnée par l'opérateur hamiltonien \hat{H} :

$$(586) \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

qui est une réécriture de (583).

- (7) Un événement est, par exemple, la détection de l'électron sur l'écran dans les fentes d'Young. Lorsque cet événement, avec une fonction d'onde $\psi(x, t)$, peut se produire de deux façons alternatives, façons qu'il n'est pas possible de distinguer expérimentalement, la fonction d'onde est la somme des fonctions d'ondes de chacun des processus. Dans l'expérience des fentes d'Young, la fonction d'onde est la somme des amplitudes de probabilité pour le passage au travers des trous 1 et 2 qui interviennent en parallèle :

$$(587) \quad \psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)$$

Considérant la probabilité $|\psi(x, t)|^2$, cette équation généralise (458).

EXERCICE

- (1) Démontrer que l'opérateur position et l'opérateur impulsion sont tous deux hermitiens. En déduire que le Hamiltonien est aussi un opérateur hermitien, ce qui nous assure que les valeurs propres et donc les niveaux d'énergie, sont des réels.
- (2) Soit $|\psi_\alpha(t)\rangle$ une base de \hat{H} avec des v.p. E_α . Démontrer que

$$(588) \quad |\psi(t)\rangle = \sum C_\alpha e^{-iE_\alpha t/\hbar} |\psi_\alpha\rangle$$

Mécanique classique	Mécanique quantique
Position x, y ou z	Multiplication par x, y, z
Impulsion p_x, p_y, p_z	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \dots$
Énergie cinétique	$\frac{1}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right]$
Énergie potentielle $U(r)$	Multiplication par $U(r)$
Moment cinétique $L = r \times p$	$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} r \times \nabla$

TABLE 3 – Tableau de correspondance

Lagrangien et Hamiltonien en mécanique quantique

Équation d'Euler-Lagrange. Nous avons vu en première partie que les équations de la mécanique du point, c'est-à-dire les équations de Newton, découlaient d'un principe variationnel. Si $\mathcal{L}(q, \dot{q}) = T - V$ est le Lagrangien, on définit l'action pour une trajectoire $q(t)$ par (les valeurs des trajectoires et de leur dérivées sont fixées aux deux bornes)

$$(589) \quad S = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}) dt$$

où $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ est vue comme une fonction de deux variables indépendantes $\mathcal{L}(x, y)$. Alors :

$$(590) \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0$$

sont les équations du mouvement. Il y a une équation pour chaque coordonnée indépendante (i.e. x, y, z ou r, θ, ϕ)

Ce système d'équations différentielles du deuxième degré est identique au système d'équations différentielles du premier degré (dimension $2n$, si n équations d'Euler-Lagrange) :

$$(591) \quad \begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} \\ \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \end{aligned}$$

qui sont les équations de Hamilton. Pour se rappeler quelle est l'équation qui est affectée du signe moins, prendre une particule libre où $H = p^2/2m$.

Structure formelle des équations du mouvement en mécanique classique : les crochets de Poisson.

Soient deux fonctions $f(p, q)$ et $g(p, q)$ ($p = m\dot{q}$). Celles-ci peuvent être calculées en chaque point de la trajectoire. Nous définissons le crochet de Poisson par l'opération suivante :

$$(592) \quad \{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q}$$

Alors : pour toute fonction $F(p, q, t)$, on a :

$$(593) \quad \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}$$

En particulier, si F ne dépend pas explicitement du temps

$$(594) \quad \frac{dF}{dt} = \{F, H\}$$

Théorème Ehrenfest en mécanique quantique. Nous considérons un grandeur physique A et sa valeur moyenne a

$$(595) \quad a = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

Nous avons démontré en cours que :

$$(596) \quad \frac{da}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle \quad \text{où le commutateur est } [A, H] = AH - HA$$

Cette propriété est à comparer avec (594).

Principe variationnel et équation de Schrödinger (Feynman, 1965). Nous désirons « démontrer » l'équation de Schrödinger à partir d'un principe plus général qui est une propriété des équations aux dérivées partielles. Cette démonstration nous permettra de faire un parallèle entre un problème spécifiquement quantique et une situation classique.

Nous supposons deux choses :

- (1) La fonction d'onde obéit à une propriété de propagation. Soit $K(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ l'amplitude pour que la particule initialement localisée en x_1 à t_1 soit observée en x_2 à t_2 . Nous avons la définition de cette amplitude de probabilité.

$$(597) \quad \psi(x_2, t_2, x_1, t_1) = K(x_2, t_2 | x_1, t_1) \psi(x_1, t_1)$$

Fixons l'origine des temps à t_1 . Pour que la particule soit observée en t_2 quelque soit x_1

$$(598) \quad \psi(x_2, t_2 - t_1) = \int K(x_2, t_2 | x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1$$

Où $K(\dots)$ est un propagateur. L'Éq. (598) est linéaire, ce qui permet les interférences. Pour avoir une probabilité d'amplitude d'observer la particule en x_2 à t_2 , il faut bien qu'elle se trouvait quelque part en t_1 !

Un fois connu le propagateur K , l'équation (598) est une équation intégrale pour la fonction d'onde. Nous verrons que c'est l'équation de Schrödinger.

(2) Le propagateur est la somme sur toutes les trajectoires $x(t)$ possibles de l'action fois i/\hbar

$$(599) \quad K(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \int_{x(t_1)=x_1}^{x(t_2)=x_2} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt} \mathcal{D}[x(t)]$$

Cette définition met sur le même pied tous les chemins, car $K(\dots)$ est une amplitude de probabilité. En prenant le module au carré de l'intégrand, on démontre que tous les chemins ont même poids. La constante \hbar intervient, car l'argument de l'exponentielle doit être un nombre sans dimension.

L'intégrale porte sur tous les chemins possibles. On n'essaiera pas de donner une définition rigoureuse ni de savoir si une telle somme existe. Elle peut-être a priori définie comme suit : tous les chemins $x(t)$ sont décomposables en série de Fourier. Intégrer sur les chemins revient donc à intégrer sur les coefficients de Fourier, ce que l'on sait faire. Bien sûr, cette définition de démontre pas que l'intégrale existe.

POURQUOI ? Reprenons l'image d'une particule classique dont la position est $x(t)$ à l'instant t . Cette trajectoire correspond à une courbe dans le plan (x, t) . Pour aller du point $A(x_1, t_1)$ au point $B(x_2, t_2)$, nous savons que la particule a choisi une trajectoire très particulière. Cette trajectoire rend l'action extrémale. Pour chaque trajectoire Γ , nous pouvons associer une action

$$(600) \quad S(\Gamma) = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \frac{dx}{d\tau}) d\tau$$

L'amplitude pour aller de A à B par le chemin Γ est noté $\phi_\Gamma(B|A)$. Le propagateur est la somme de toutes ces amplitudes

$$(601) \quad K(B|A) = \int \phi_\Gamma(B|A) \mathcal{D}[\Gamma]$$

Dans la pratique, rien ne permet de distinguer un chemin plutôt qu'un autre. Nous postulons que tous les chemins pour aller de A à B sont égaux pour les probabilités. Autrement dit, les $\phi_\Gamma(B|A)$ diffèrent d'un chemin à un autre par un facteur de phase. Nous exigeons que ce facteur de phase dépende de l'action et nous renormalisons par \hbar pour avoir un nombre sans dimension

$$(602) \quad \phi_\Gamma(B|A) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\Gamma)}$$

Dans (601), le signe \int est synonyme du signe \sum . Deux trajectoires Γ_1 et Γ_2 ne contribuent pas au propagateur si leur action diffèrent d'un facteur de phase $i\pi\hbar$ car

$$(603) \quad e^{\frac{i}{\hbar} S(\Gamma_1)} + e^{\frac{i}{\hbar} S(\Gamma_2)} = 0$$

La somme sur tous les chemins fait donc que les chemins vont presque tous se télescoper par interférences destructrices. Seuls vont subsister les chemins pour lesquels il est difficile que faire varier l'action d'un facteur de $\hbar\pi$. Mais en perturbant un chemin par une petite variation $x(t) \rightarrow x(t) + \delta x(t)$, nous faisons varier l'action. Autrement dit, le chemin qui va principalement contribuer au propagateur est le chemin pour lequel l'action ne varie pas quand la trajectoire est perturbée et tous les chemins situés dans un voisinage de cette trajectoire classique donnent des processus d'interférences constructives.

Deux cas se présentent suivant la largeur de la région des processus d'interférences constructives.

- (1) Seuls les chemins proches du chemin classique conduisent à des interférences constructives. La situation est dite CLASSIQUE.
- (2) Des chemins très différents du chemin classique conduisent à des interférences constructives. La situation est alors QUANTIQUE.

Pour aller plus loin

Nous essayons ici de donner une définition plus précise de l'intégrale de chemin (sans être rigoureux). L'idée de base est de construire une procédure de passage à la limite qui nous permette de construire une intégrale de chemin comme la limite d'intégrales ordinaires (comme la limite des sommes de Riemann donne l'intégrale d'une fonction).

Nous désirons calculer

$$(604) \quad \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt} \mathcal{D}[x(t)]$$

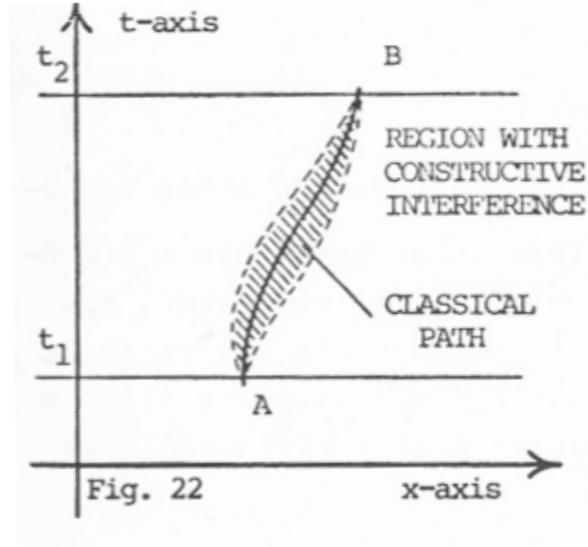


FIGURE 12 – Seuls les chemins dans un voisinage du chemin rendant l'action extrémale contribuent au propagateur. Le tout est de savoir si ce voisinage est étroit ou large ...

et nous divisons l'intervalle $[t_a, t_b]$ en tranches

$$(605) \quad t_0 = t_a; t_1 = t_0 + \epsilon; \dots; t_n = t_b$$

où $\epsilon = (t_b - t_a)/N$. Faisons maintenant usage de la propriété suivante du propagateur

$$(606) \quad \forall t_2 \in [t_1, t_2] \quad K(x_3; t_3 | x_1; t_1) = \int K(x_3; t_3 | x_2; t_2) K(x_2; t_2 | x_1; t_1) dx_2$$

On remarque que $K(x_3; t_3 | x_2; t_2)$ ne dépend pas de t_1 . Autrement dit, le processus est un processus sans mémoire (processus de Markov). On a donc

$$(607) \quad \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt} \mathcal{D}[x(t)] = \int \dots \int K(x_N; t_N | x_{N-1}; t_{N-1}) K(x_{N-1}; t_{N-1} | x_{N-2}; t_{N-2}) \dots K(x_1; t_1 | x_0; t_0) dx_1 \dots dx_{N-1}$$

Dans la limite où N est grand, chaque intervalle de temps devient infinitésimal et nous pouvons poser

$$(608) \quad K(y, t + \epsilon | x; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x - y)^2}{\epsilon}\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} V\left(\frac{x + y}{2}\right) \epsilon\right\}$$

Donc, (607) revient à

$$(609) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\left[\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}} \right]^N \int \dots \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1, N} \frac{m}{2} \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{\epsilon} - V\left(\frac{x_k + x_{k-1}}{2}\right) \epsilon\right\} \right]$$

Il faut avoir une bonne dose d'optimisme pour penser que cette mesure existe. Wiener l'a démontré. On sait effectivement calculer cette intégrale dans le cas de l'oscillateur harmonique.

Calculus

Rappelons ici un théorème utile pour évaluer le comportement asymptotique des intégrales. Il s'agit d'évaluer :

$$(610) \quad I = \int_{\Omega} dx e^{-\lambda f(x)} \text{ avec } \lambda \rightarrow \infty$$

Lorsque $f(x)$ possède un minimum en $x = x_{min}$, le développement limité de $f(x)$ est suffisant :

$$(611) \quad I \approx e^{-\lambda f(x_{min})} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{\lambda}{2}(x-x_{min})^2 f''(x_{min})} \text{ avec } \lambda \rightarrow \infty$$

Cette approximation est souvent appelée l'approximation du point de selle.

Lorsque l'intégrand est complexe :

$$(612) \quad I = \int_{\Omega} dx e^{-i\lambda f(x)} \text{ avec } \lambda \rightarrow \infty$$

nous avons aussi à l'ordre le plus bas :

$$(613) \quad I \approx e^{-i\lambda f(x_{min})} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-i\frac{\lambda}{2}(x-x_{min})^2 f''(x_{min})} \text{ avec } \lambda \rightarrow \infty$$

car les parties oscillantes donnent une contribution négligeable sauf au voisinage du minimum où les oscillations sont les plus faibles. Dans cas, l'approximation est appelée approximation de la phase stationnaire.

CONSÉQUENCE. La valeur de la constante \hbar est faible devant 1 et elle va servir d'étalon pour savoir si une situation est classique ou quantique. Nous faisons $\lambda = 1/\hbar$. Si l'intégrale (599) est bien approximée par le développement limité autour du chemin qui rend l'action

$$(614) \quad \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, t) dt$$

extrémale, on dira que la situation est classique. La seule trajectoire qui importe est celle qui rend l'action extrémale et nous retrouvons les équations de Newton. Dans le cas contraire, la situation est quantique.

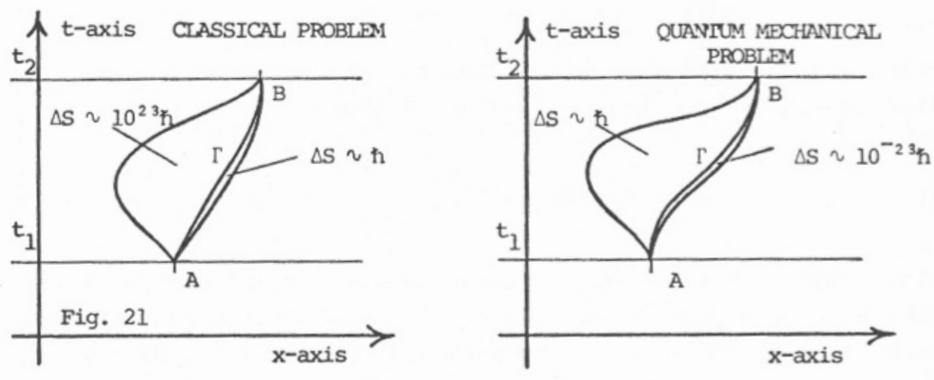


FIGURE 13 – Différence entre une situation classique et quantique.

Équation de Schrödinger

Nous posons $t_2 = t_1 + \Delta t$ et nous travaillerons dans la limite $\Delta t \rightarrow 0$. Nous supposons donc :

$$(615) \quad \psi(x, t + \Delta t) = \int K(x, t + \Delta t, y, t) \psi(y, t) dy$$

où :

$$(616) \quad K(x, t + \Delta t, y, t) = \int_{\eta(t)=y}^{\eta(t+\Delta t)=x} \mathcal{D}\eta e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} [\frac{m}{2} \dot{\eta}^2 - V(\eta)]}$$

Lorsque $\Delta t \rightarrow 0$, cette équation intégrale pour ψ (K est connue) devient une équation différentielle. Seuls les chemins réguliers donnent une contribution physique. Aussi, lorsque $\Delta t \rightarrow 0$, y diffère peu de x dans (616) et :

$$(617) \quad \dot{\eta} = \frac{x - y}{\Delta t}$$

D'où :

$$(618) \quad \frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{m}{2} \dot{\eta}^2 - V(\eta) \right] \approx \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(x - y)^2}{\Delta t} - \frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t$$

Soit

$$(619) \quad K(x, t + \Delta t | y, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{\Delta t} - V(x)\Delta t \right]} \int_{\eta(t)=y}^{\eta(t+\Delta t)=x} \mathcal{D}[\eta]$$

Comme nous ne savons pas calculer la dernière intégrale, nous posons :

$$(620) \quad A[\Delta t] = \int_{\eta(t)=y}^{\eta(t+\Delta t)=x} \mathcal{D}[\eta]$$

ce qui ne permet pas de résoudre la difficulté, mais permet de la cacher sous une notation.

Au risque de tuer le suspens, nous montrerons néanmoins que la limite $\Delta t \rightarrow 0$ donne :

$$(621) \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta t)^{1/2} A[\Delta t] = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2}$$

Pour la fonction d'onde

$$(622) \quad \psi(x, t + \Delta t) = \int dy A[\Delta t] e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{(x-y)^2}{\Delta t} - V(x)\Delta t \right]} \psi(y, t)$$

Comme $\Delta t \rightarrow 0$ et que les trajectoires sont régulières, la contribution principale de cette intégrale vient des y voisins de x (la particule n'a pas eu le temps de bouger beaucoup). Posons $y = x + \epsilon$:

$$(623) \quad \psi(x, t + \Delta t) = \int d\epsilon A[\Delta t] e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \frac{\epsilon^2}{\Delta t} - V(x)\Delta t \right]} \psi(x + \epsilon, t)$$

avec le développement de Taylor :

$$(624) \quad \psi(x + \epsilon, t) = \psi(x, t) + \epsilon \frac{d\psi}{dx} + \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + O(\epsilon^3)$$

Les intégrales sur ϵ sont maintenant des intégrales gaussiennes ! On a :

$$(625) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \left(\frac{\pi}{a} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-ax^2} = \frac{1}{2a} \left(\frac{\pi}{a} \right)^{1/2}$$

D'où, utilisant (623)

$$(626) \quad \psi(x, t + \Delta t) = A[\Delta t] e^{-\frac{i}{\hbar} V(x)\Delta t} \left(\frac{2\pi i \hbar \Delta t}{m} \right)^{1/2} \left[\psi(x) + \frac{1}{4} \left(\frac{2i \hbar \Delta t}{m} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right]$$

Cette équation permet de calculer $A[\Delta t]$. En effet, $A[\Delta t]$ est indépendant de $V(x)$. Donc, on peut prendre $V(x) = 0$ et $\Delta t = 0$ dans (626). D'où :

$$(627) \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta t)^{1/2} A[\Delta t] = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2}$$

Soit

$$(628) \quad \psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} V(x)\Delta t} \left[\psi(x) + \frac{i \hbar \Delta t}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right]$$

En se limitant au premier ordre en Δt , nous avons donc :

$$(629) \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\psi(x, t + \Delta t) - \psi(x, t)}{\Delta t} = \frac{i \hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V(x) \psi(x)$$

qui n'est autre que l'équation de Schrödinger.

États stationnaires. Pour un système isolé dans un potentiel indépendant du temps, les états propres sont de la forme

$$(630) \quad \psi(r, t) = \psi_\alpha(r) e^{-iEt/\hbar}$$

avec

$$(631) \quad H\psi_\alpha(r) = E_\alpha \psi_\alpha(r)$$

ψ_α est donc une fonction propre de l'opérateur H associé à la valeur propre E_α . Si ψ_n , $n \in N$, désigne une base orthonormée, la théorie des équations différentielles aux dérivées partielles (problème de Sturm Liouville et théorie spectrale) permet d'obtenir le propagateur comme :

$$(632) \quad K(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \sum_n \psi_n^*(x_1) \psi_n(x_2) e^{-i/\hbar E_n(t_2 - t_1)}$$

où la somme porte sur le spectre discret du Hamiltonien (c'est-à-dire sur les seuls états normalisables de l'équation de Schrödinger). On verra que $K(x_2, t_2|x_1, t_1)$ est la solution unique de l'équation élémentaire (dans cette équation x_1, t_1 fixés)

$$(633) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} K(x_2, t_2) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_2) \right] K(x_2, t_2)$$

avec la condition initiale

$$(634) \quad K(x_2, t_1|x_1, t_1) = \delta(x_2 - x_1)$$

En d'autres mots, K est une fonction de Green du problème de Schrödinger avec les bonnes conditions aux limites.

REMARQUE 16. On peut obtenir (632) dans le contexte de la mécanique quantique. Soit $\psi(t)$ la fonction d'onde. On décompose $\psi(t)$ sur les états propres

$$(635) \quad \psi(t) = \sum_n c_n(t) \psi_n$$

où les c_n vérifient l'équation

$$(636) \quad i\hbar \dot{c}_n = E_n c_n$$

soit

$$(637) \quad c_n(t) = c_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

D'où

$$(638) \quad \psi(r_1, t_1) = \langle r_1 | \psi(t_1) \rangle = \sum_n \psi_n(r_1) c_n e^{-iE_n t_1/\hbar}$$

On a

$$(639) \quad c_n = \int dr_1 \psi_n^*(r_1) e^{-iE_n t_1/\hbar} \psi(r_1, t_1)$$

D'autre part

$$(640) \quad \psi(r_2, t_2) = \sum_n c_n \psi_n(r_2) e^{-iE_n t_2/\hbar}$$

Soit

$$(641) \quad \psi(r_2, t_2) = \int dr_1 \sum_n \psi_n(r_2) e^{-iE_n(t_2-t_1)/\hbar} \psi_n^*(r_1) \psi(r_1, t_1)$$

Ce qui correspond bien à la définition du propagateur. Celui-ci contient donc une information très riche, puisque sa connaissance exige la diagonalisation du Hamiltonien.

Insouciances mathématiques

Nous avons vu qu'il existait deux formulations (ou deux représentations?) de la mécanique quantique : la mécanique ondulatoire et la méthode matricielle. On utilise donc différents espaces de Hilbert en passant de l'un à l'autre suivant la convenance. Résumons :

- (1) Mécanique ondulatoire : L'espace des fonctions de carré sommable qu'on baptise fonction d'onde ($L_x^2(\mathbf{R})$) avec le produit scalaire

$$(642) \quad \langle f, g \rangle = \int_{\mathbf{R}} dx \bar{f}(x) g(x)$$

Cet espace de Hilbert est relié à un autre espace de Hilbert donné par les fonctions d'onde dépendant de l'impulsion p ($L_p^2(\mathbf{R})$)

$$(643) \quad f(x) \rightarrow \mathcal{F}(f)(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbf{R}} dx f(x) \exp\{-i/\hbar px\}$$

- (2) Mécanique matricielle : On travaille dans l'espace des suites infinies de carré sommable vues comme des vecteurs de dimension infinie $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n, \dots)$.

Le lien entre les différents espaces de Hilbert est fait à l'aide de la notion d'opérateurs unitaires : Deux espaces de Hilbert complexes séparables avec un produit scalaire sont dits isomorphes si l'image de l'un est exactement l'autre et si l'opérateur conserve le produit scalaire.

Nous avons :

- (1) Les espaces $L_x^2(\mathbf{R})$ et $L_p^2(\mathbf{R})$ sont séparables et de dimension infinie¹².
- (2) Tout espace de Hilbert qui est séparable et de dimension infinie est isomorphe à l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable.
- (3) En particulier, les théorèmes de Perceval et Plancherz dit que la transformée de Fourier réalise l'isomorphisme entre $L_x^2(\mathbf{R})$ et $L_p^2(\mathbf{R})$.
- (4) Dans la pratique, on considère un espace de Hilbert général \mathcal{H} . On associe à tout vecteur $|\Psi\rangle$, ses composantes sur une base, $(|n\rangle)_n$, noté Ψ_n . L'espace de Hilbert \mathcal{H} étant nécessairement isomorphe aux deux espaces précédents, $\psi(x)$ est vu comme la composante de $|\Psi\rangle$ sur la base de la représentation x .

Opérateurs

Nous avons défini un état comme un vecteur dans un espace de Hilbert abstrait. En théorie quantique, les observables physiques sont associés à des opérateurs auto-adjoints $A = A^\dagger$ avec

$$(644) \quad \langle \phi, A\psi \rangle = \langle A^\dagger \phi, \psi \rangle$$

dans le domaine de définition de A . Pourquoi ?

- (1) Le spectre de A est réel : la mesure donne un nombre réel par convention.
- (2) les vecteurs propres forment un système orthogonaux.

Question : Tout opérateur auto-adjoint est-il nécessairement associé à un observable ? La réponse est non !

En fait, il existe deux complications. On choisit \mathcal{H} !

- (1) Si le spectre de A n'est pas borné : il faut restreindre le domaine de définition de A qui ne peut pas être \mathcal{H} tout entier.
- (2) Si le spectre de A contient une partie continue, alors les vecteurs propres de A correspondant au spectre continu n'appartiennent pas à \mathcal{H} mais à un espace plus grand.

Nous avons le résultat suivant :

THÉORÈME 29. *Un opérateur A qui est défini partout et qui satisfait à la condition d'hermiticité*

$$(645) \quad \langle \varphi, A\psi \rangle = \langle A\varphi, \psi \rangle$$

est nécessairement borné (Toeplitz) (à un spectre borné).

La mécanique quantique fait nécessairement intervenir des opérateurs qui ne sont pas bornés. Considérons l'opérateur position X qui est en fait l'opérateur "multiplication par x " sur les composantes de ψ dans la base x

$$(646) \quad (Q\psi)(x) = x\psi(x)$$

En fait, l'une des hypothèses de ce théorème est ici cruciale et montre qu'il faut être prudent en définissant les opérateurs en mécanique quantique. Il faut, pour que le théorème s'applique, que l'opérateur soit défini partout. Ce n'est pas le cas, car les opérateurs sont généralement définis sur des sous-ensembles généralement denses. Par exemple, il est évident que le domaine de définition de l'opérateur X est un sous-ensemble de \mathcal{H} , car pour toute fonction de carré sommable $\psi(x)$, $x\psi(x)$ n'est pas nécessairement de carré sommable. X n'est donc pas défini partout et son spectre n'est pas borné, car c'est en fait l'ensemble de la droite réelle.

Passant par la transformée de Fourier, on définit l'opérateur d'impulsion

$$(647) \quad P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

Relations de commutation canonique

On

12. Pour les gens comme moi : Un espace séparable est un espace topologique contenant un sous-ensemble dense et au plus dénombrable, c'est-à-dire contenant un ensemble fini ou dénombrable de points dont l'adhérence est égale à l'espace topologique tout entier.

Exemples

Particule dans un puits de potentiel infini. Nous considérons le potentiel en $1d$

$$(648) \quad V(x) = 0 \text{ si } 0 < x < a, +\infty \text{ autrement, c'est-à-dire aussi grand que désiré}$$

Un état stationnaire pour la particule de masse m est une solution obtenue par la méthode de séparation des variables.

$$(649) \quad \tilde{\psi}(x, t) = \psi(x)e^{-i\hbar Et}$$

où

$$(650) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \tilde{\psi}$$

soit :

$$(651) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

qui est équivalent à une équation aux valeurs propres pour un opérateur différentiel : L'énergie E est à déterminer.

On trouve la solution du problème sur les deux domaines : $[0, a]$ et ailleurs. Le module carré de la fonction d'onde étant une densité probabilité sur un support continu, la fonction d'onde est nécessairement (au moins) continue en $x = 0, a$. La fonction est nécessairement de carré sommable car la particule est quelque part ! On prendra

$$(652) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

- (1) En-dehors de l'intervalle, $x \notin [0, a]$, on prend $V = cst$ et on passe à la limite V aussi grand que loisible. D'où la solution

$$(653) \quad \psi(x) = 0, x \notin [0, a]$$

- (2) Pour $x \in [0, a]$, la solution générale est une combinaison

$$(654) \quad \psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

$$\text{où } E = \hbar^2 k^2 / (2m)$$

Les conditions de raccordement aux limites exigent $B = 0$ et

$$(655) \quad ka = n\pi, n \in \mathbb{N}$$

On a donc

$$(656) \quad E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2$$

Le spectre de l'énergie est donc discret. La constante A est alors déterminée par la condition de normalisation (652)

$$(657) \quad |A|^2 = 2$$

à une phase arbitraire.

Potentiel en $\delta(x)$. On suppose ici

$$(658) \quad V(x) = -V_0 \delta(x); V_0 > 0, x \in \mathbb{R}$$

où $\delta(x)$ est une distribution de Dirac. En réalité, $\delta(x)$ est une fonction créneau, dont la largeur est petite devant toutes les longueurs caractéristiques du système.

On cherche les solutions continues du problème

$$(659) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 \delta(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

avec la condition (652).

Pour que la fonction soit de carré sommable, les solutions sur $x < 0, x > 0$ sont

$$(660) \quad \psi(x) = Ae^{\beta x}, x < 0$$

$$(661) \quad \psi(x) = Ae^{-\beta x}, x > 0$$

avec

$$(662) \quad \beta = \sqrt{-2mE/\hbar^2} \in \mathbb{R}$$

De (659)

$$(663) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] - V_0\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx$$

Dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$, nous avons donc

$$(664) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} [-\beta A - \beta A] - V_0 A = 0$$

soit

$$(665) \quad E = -m \frac{V_0^2}{2\hbar^2}$$

Il n'existe donc qu'un seul état stationnaire.

Symétries en mécanique quantique

On se donne un Hamiltonien H qui joue le rôle d'opérateur. Soit ψ_k la fonction d'onde associée à l'état k (on suppose dans tout ce qui suit que les niveaux d'énergie sont quantifiés). ψ_k est donc vecteur propre de H avec la valeur propre E_k :

$$(666) \quad H\psi_k = E_k\psi_k$$

Nous considérons maintenant un GROUPE de transformation \mathcal{G} dont les éléments COMMUTENT avec H

$$(667) \quad HG = GH \text{ ou } GHG^{-1} = H$$

Donc H est invariant sous l'action du groupe de symétrie de H . Nous désirons connaître les propriétés de $G\psi_k$.

Comme $[H, G] = 0$ alors $G\psi_k$ est aussi vecteur propre de H avec la même valeur propre E_k :

$$(668) \quad HG\psi_k = E_k\psi_k$$

Deux cas de figure sont alors possibles :

(1) E_k n'est pas dégénérée. Alors :

$$(669) \quad G\psi_k = \chi^\alpha(G)\psi_k$$

où α est une représentation irréductible de \mathcal{G} . Dans ce cas, chercher les niveaux d'énergie revient donc à chercher les représentations irréductibles du groupe \mathcal{G} .

(2) E_k est dégénérée n -fois. Dans ce cas, il existe n partenaires à ψ_k tels que

$$(670) \quad G\psi_k^p = \sum_q \psi_k^q D_{qp}(\kappa, \mathcal{G})$$

où κ est une représentation de \mathcal{G} . La question est de savoir si κ est irréductible ou non. Sauf accident (dégénérescence accidentelle qu'il faudra motiver), on choisira les représentations irréductibles.

Conséquences des symétries : quelques exemples.

Symétrie de parité. On considère une particule dans un potentiel $V(x)$. Ce potentiel est une fonction paire de x . On définit l'opérateur parité P par

$$(671) \quad P\psi_k(x) = \tilde{\psi}_k(x) = \psi_k(-x)$$

On vérifie que P commute avec H , $[H, P] = 0$. Donc les états propres du hamiltonien sont des fonctions paires ou impaires (on rappelle $P^2 = 1$).

Potentiel invariant sous rotation. Nous considérons un potentiel invariant sous rotation autour de l'axe z . Le potentiel ne dépend donc que la coordonnée radiale r et de l'angle polaire ϕ : $V(r, \phi)$. le Hamiltonien est donc :

$$(672) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r)$$

Soit L_z le moment cinétique selon z :

$$(673) \quad L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial y} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Nous avons :

$$(674) \quad [H, L_z] = 0$$

Dans le langage de la théorie des groupes de Lie, $\sigma_z = i/\hbar L_z$ est le générateur du groupe dont tous les éléments peuvent être écrits sous la forme :

$$(675) \quad g(\delta\phi) = e^{i\delta\phi\sigma_z} \approx 1 + i\delta\phi\sigma_z$$

pour une rotation d'angle infinitésimale d'angle $\delta\phi \ll 1$.

Le problème se ramène donc à celui de déterminer les valeurs propres de L_z :

$$(676) \quad L_z\psi(r, \phi) = \lambda\psi(r, \phi) \Rightarrow \psi(r, \phi) = f(r)e^{i\lambda\phi/\hbar}$$

Mais la substitution $\phi \rightarrow \phi + 2n\pi$ laisse invariante la fonction d'onde à un facteur de phase de $2n\pi$ près. D'où :

$$(677) \quad \lambda = n\hbar$$

Il ne reste plus qu'à déterminer la fonction $f(r)$. Nous obtenons :

$$(678) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{n^2\hbar^2}{2mr} + V(r) \right) f(r) = E f(r)$$

qui définit une famille d'équations différentielles indicées par $n \in \mathbb{N}$. Les niveaux d'énergie des atomes sont donc nécessairement quantifiés par au moins l'indice n et cette quantification résulte des symétries.

Potentiel spatialement périodique. Nous considérons un potentiel périodique de période a : $V(x+a) = V(x)$. Soit T_a

$$(679) \quad T_a\psi(x) = \psi(x+a)$$

T_a n'est pas hermitien mais T_a est unitaire. On peut encore diagonaliser H et T_a dans la même base. Soit λ , un valeur propre. Comme

$$(680) \quad \psi(x+na) = \lambda^n\psi(x)$$

et $\psi(x)$ est de carré intégrable, alors $\lambda = e^{iqa}$. Les autres valeurs propres n'ont pas d'intérêt physique car les fonctions d'onde associées ne sont pas de carré sommable sur la droite réelle.

D'où le :

THÉORÈME DE BLOCH : La fonction d'onde d'un potentiel périodique est nécessairement de la forme $e^{iqx}u(x)$ où $u(x)$ est une fonction périodique de période a . Ce résultat est fondamental en physique du solide et il est à la base de la structure en bande conduction dans les semi-conducteurs.

Oscillateur harmonique

Nous considérons le mouvement d'une particule dans le potentiel harmonique (en une dimension) :

$$(681) \quad V(x) = \frac{1}{2}V''(a)(x-a)^2 + \dots \text{ avec } V''(a) > 0$$

où le potentiel $V(x)$, qui est a priori arbitraire, est approximé par son développement limité au voisinage de son minimum. Cette approximation est justifiée si l'on se restreint à des petits mouvements autour du minimum en a . Le but de ce problème est de montrer que la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique n'est de carré sommable qu'à certaines conditions. Ces conditions sont très restrictives et entraînent la quantification de l'énergie sur des niveaux discrets.

(1) Montrer que le Hamiltonien classique peut s'écrire

$$(682) \quad \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Quelle est la signification physique de ω ?

(2) Utiliser la règle de substitution vue en cours pour établir l'équation de Schrödinger du problème

$$(683) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

(3) Quelle est la condition à laquelle doit satisfaire la fonction d'onde ?

(4) Dans la suite du problème, nous utiliserons les notations suivantes

$$(684) \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E; \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}$$

En posant $y = \lambda x^2$ et $\psi(y) = e^{-y/2} \phi(y)$, montrer que l'équation de Schrödinger se ramène à

$$(685) \quad y \frac{d^2\phi}{dy^2} + \left(\frac{1}{2} - y\right) \frac{d\phi}{dy} + \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4}\right) \phi = 0$$

où l'on donnera κ en fonction des données du problème.

(5) On appelle fonction hypergéométrique, $\varphi(z)$, la solution de l'équation suivante

$$(686) \quad z(1-z) \frac{d^2\varphi}{dz^2} + [c - (a+b+1)z] \frac{d\varphi}{dz} - ab\varphi(z) = 0$$

Ce type d'équation a trois singularités ($z = 0, 1, \infty$). On cherche les solutions sous la forme

$$(687) \quad \varphi(z) = z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu z^\nu$$

Démontrer les propriétés suivantes :

(a) $\sigma(c-1+\sigma) = 0$;

(b) $c_{\nu+1} = \frac{(\nu+a+\sigma)(\nu+b+\sigma)}{(\nu+1+\sigma)(\nu+c+\sigma)} c_\nu$ si cela a un sens ;

(c) $R = 1$ où R est le rayon de convergence de la série.

(6) Nous considérons dans cette question le cas où $\sigma = 0$. On note

$$(688) \quad \varphi_1(z) = \sum_{\nu \geq 0} \frac{(a)_\nu (b)_\nu}{(c)_\nu} \frac{z^\nu}{\nu!}$$

avec

$$(689) \quad (a)_\nu = \begin{cases} (a)_0 = 1 \\ (a)_\nu = a(a+1) \dots (a+\nu-1) \end{cases}$$

Montrer que la proposition suivante est vraie : Si $c = -n$, n entier naturel positif, alors la solution est un polynôme de degré n . On notera

$$(690) \quad \varphi_1(z) = {}_2F_1(a; b; c; z)$$

(7) Nous supposons ici $\sigma = 1 - c$. Poser :

$$(691) \quad \begin{cases} a' = a + 1 - c; \\ b' = b + 1 - c; \\ c' = 2 - c. \end{cases}$$

Montrer que nous avons la solution

$$(692) \quad \varphi_2(z) = z^{1-c} {}_2F_1(a'; b'; c'; z)$$

si $c \neq 2, 3, \dots$. En déduire la solution générale

(8) Démontrer le théorème suivant :

La substitution $u = 1/z$ dans l'équation différentielle des fonctions hypergéométriques avec les changements

$$(693) \quad \psi(z) = (-z)^{(-a)} {}_2F_1(a; 1 - c + a; 1 - b + a; 1/z)$$

ou

$$(694) \quad \psi(z) = (-z)^{(-b)} {}_2F_1(b; 1 - c + b; 1 - a + b; 1/z)$$

ramène à une équation du même type, mais avec des nouveaux coefficients que l'on peut exprimer en fonction des premiers. Par conséquent, on connaît les solutions pour $|z| > 1$.

N.B. On pourra utiliser un logiciel de calcul formel ...

(9) On rappelle la définition de la fonction $\Gamma(z)$:

$$(695) \quad \Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt, \text{ si } z > 0$$

Démontrer

$$(696) \quad \Gamma(z = n) = (n - 1)!$$

(10) Dans l'équation différentielle des fonction hypergéométriques, faire le changement $x = bz$. Montrer que cette équation se ramène dans la limite $b \rightarrow \infty$ à :

$$(697) \quad x \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + (c - x) \frac{d\varphi}{dx} - a\varphi(x) = 0$$

En déduire la solution générale de l'équation de Schrödinger pour le potentiel harmonique en fonction de la fonction ${}_1F_1(a; c; z)$ définie par

$$(698) \quad {}_1F_1(a; c; z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a)_\nu c^\nu}{(c)_\nu \nu!}$$

(11) Montrer que les cas $a = -n$ et $c = -n$ donnent tous les deux des solutions polynomiales (dans le premier cas, il s'agit des polynômes de Laguerre et, dans le deuxième, on définit les polynômes d'Hermite).

(12) Nous désirons connaître le comportement asymptotique des solutions pour $x \rightarrow \infty$. Montrer que l'on peut avoir les deux limites asymptotiques

$$(a) \quad \varphi(x) \simeq 1/x^\alpha$$

$$(b) \quad \varphi(x) \simeq 1/x^\alpha e^x$$

où on donnera α en fonction de a ou c . On notera que ce comportement asymptotique n'a de sens que si la fonction hypergéométrique n'est pas un polynôme. En règle générale ce comportement asymptotique est donné par la formule (on ne demande pas de la démontrer !)

$$(699) \quad {}_1F_1(a; c; x) \simeq \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} e^{-ia\pi} x^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^x x^{a-c} \text{ avec } x \rightarrow \infty$$

(13) Soit $\psi(x)$ la fonction d'onde de l'équation de Schrödinger. Nous exigeons la condition de normalisation suivante (la particule est quelque part !)

$$(700) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

et nous supposons que cette condition implique que $\psi(x)$ s'annule à l'infini. En utilisant cette condition et le comportement à l'infini des fonctions d'onde, montrer que a ne peut

prendre que deux séries de valeurs discrètes. Montrer en utilisant les question précédentes que cette condition implique :

$$(701) \quad n = -(\kappa/2 - 1/4)$$

ou

$$(702) \quad n + \frac{1}{2} = \kappa/2 - 1/4$$

On donnera les fonctions d'onde associées

(14) En déduire que les niveaux d'énergie sont quantifiés :

$$(703) \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

(15) On remarquera que le fondamental a une énergie non-nulle. Pourquoi $\hbar\omega/2$ est-elle la plus petite valeur possible ?

REMARQUE. Les polynômes intervenant dans la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique sont les polynômes d'Hermite. Ils sont définis par la relation :

$$(704) \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Les fonctions d'onde sont alors :

$$(705) \quad \psi_n(x) = N_n e^{-(\lambda/2)x^2} H_n(\sqrt{\lambda}x)$$

où le facteur N_n est déterminé en exigeant que la fonction d'onde est normalisée. Les polynomes d'Hermite sont solutions de l'équation différentielle

$$(706) \quad \frac{d^2 H_n}{dx^2} - 2x \frac{dH_n}{dx} + 2nH_n(x) = 0$$

Instantons

Nous considérons un double puits de potentiels à fond plat. Ce double puits permet de localiser une particule qui symbolise un atome d'azote pouvant prendre deux positions par rapport au plan défini par trois atomes d'hydrogène (molécule NH_3). Le potentiel est symétrique par rapport à $x = 0$. On supposera le potentiel $V(x)$ défini par les conditions suivantes :

$$(707) \quad \begin{aligned} V(x) &= V_0 > 0 \text{ si } x \in [-a, +a] \\ V(x) &= 0 \text{ si } |x| \in]a, b] \\ V(x) &= V_\infty \text{ si } |x| \in]b, +\infty] \end{aligned}$$

La figure indique les régions de I à IV.

- (1) Quelle est la condition que la fonction d'onde doit satisfaire en $|x| = b$ lorsque $V_\infty \rightarrow +\infty$? En déduire la fonction d'onde pour $x \in [a, b]$ en fonction de l'énergie E .
- (2) On suppose V_0 fini. Classifier les solutions possibles de l'équation de Schrödinger pour $x \in [-a, +a]$ en fonction des symétries et en déduire les deux familles solutions de l'équation de Schrödinger.
- (3) Nous exigeons que les solutions et leur première dérivée se raccordent en $|x| = a$. Ces deux conditions peuvent être simplifiées en exigeant le raccord des dérivées logarithmiques :

$$(708) \quad \frac{1}{\psi_I} \frac{d\psi_I}{dx} \Big|_a = \frac{1}{\psi_{II}} \frac{d\psi_{II}}{dx} \Big|_a$$

Quelle sont alors les deux conditions de raccordement correspondant aux deux familles de solutions trouvées dans la question précédente?

- (4) Démontrer que ces deux conditions se résument à une seule condition lorsque $V_0 \rightarrow \infty$:

$$(709) \quad \tan \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (b-a) \right] = 0$$

et en déduire les niveaux d'énergie dans le cas $V_0 \rightarrow \infty$.

- (5) Nous considérons le cas V_0 grand mais fini. On peut alors supposer le fondamental proche de la valeur du cas dégénérée :

$$(710) \quad E = E_0 + \delta E \text{ avec } E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(b-a)^2}$$

où $|\delta E| \ll E_0$. En se limitant au premier terme des développements de Taylor, démontrer que la condition de raccordement sur la dérivée logarithmique se ramène à :

$$(711) \quad \delta E = \begin{cases} -\frac{2E_0 \hbar}{(b-a)\sqrt{2mV_0}} \coth \left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right] & \text{pour le cas pair} \\ -\frac{2E_0 \hbar}{(b-a)\sqrt{2mV_0}} \tanh \left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right] & \text{pour le cas impair} \end{cases}$$

- (6) En déduire que la condition V_0 fini lève la dégénérescence entre le cas pair et le cas impair avec

$$(712) \quad E_- - E_+ = \frac{4E_0 \hbar}{(b-a)\sqrt{2mV_0}} e^{-2a/\hbar\sqrt{2mV_0}}$$

- (7) Nous désirons interpréter ce résultat. Tracer la probabilité associée à la fonction d'onde lorsque la particule est dans son état fondamental d'énergie E_+ . Une particule classique peut-elle être localisée dans les régions II et III? Une particule quantique peut-elle osciller entre les deux minima du puits de potentiel?

Chaîne anharmonique

On considère une chaîne de masses m connectées à leurs plus proches voisines avec des ressorts anharmoniques dont la relation force, F , déplacement, x , est donnée par

$$(713) \quad F(x) = -kx - \alpha kx^2$$

- (1) Écrire le Lagrangien du système.

(2) Démontrer que l'équation du mouvement pour le ressort j est

$$(714) \quad m \frac{d^2 y_j}{dt^2} = k (y_{j+1} + y_{j-1} - 2y_j) + k\alpha [(y_{j+1} - y_j)^2 - (y_j - y_{j-1})^2]$$

(3) Pour passer à la limite du continuum, on désigne par a la distance entre deux voisins. En développant $y_{j\pm 1}$ en série de Taylor au voisinage de y_j , démontrer que les équations du mouvement sont au troisième ordre en a données par

$$(715) \quad \omega_0^{-2} y_{tt} = y_{xx} + \epsilon y_x y_{xx} + \frac{a^2}{12} y_{xxxx}$$

où $\epsilon = 2\alpha a$. On donnera ω_0 .

(4) Dans la suite, on posera $\omega_0 = 1$. On fait le changement de variable :

$$(716) \quad \xi = x - t; \tau = \frac{1}{2}\epsilon t$$

et on cherche une solution sous la forme

$$(717) \quad y(x, t) = \psi(\xi, \tau)$$

On remarque que ϵ impose une échelle de temps et nous nous placerons dans la limite $\epsilon \rightarrow 0$. En négligeant les termes d'ordre le plus élevé en ϵ (justifier soigneusement votre calcul), démontrer que la fonction $u = \psi_x$ satisfait l'équation (de Korteweg et de Vries)

$$(718) \quad u_\tau + uu_\xi + \delta^2 u_{\xi\xi\xi} = 0$$

où $\delta^2 = a^2/12\epsilon$.

(5) On cherche à trouver la solution à 1 soliton de l'équation :

$$(719) \quad \frac{\partial u}{\partial t} - 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

qui est du type précédent. Nous cherchons une solution sous la forme $u(x, t) = z(\xi = x - vt)$. Démontrer qu'il existe alors deux constantes réelles A, B telles que :

$$(720) \quad -\frac{v}{2}z^2 + z^3 \frac{1}{2} \left(\frac{dz}{d\xi} \right)^2 - Az = B$$

(6) La solution qui nous intéresse est telle que $z(\xi)$ et toutes ses dérivées s'annulent à l'infini. En déduire que la valeur de A et celle de B .

(7) Montrer que pour ce choix particulier des conditions aux limites :

$$(721) \quad \left(\frac{dz}{d\xi} \right)^2 = z^2 (v - 2z)$$

(8) L'équation différentielle précédente est donc ramenée à calculer l'intégrale :

$$(722) \quad \int_{z_0}^z \frac{ds}{s\sqrt{v-2s}} = \int_{\xi_0}^\xi ds$$

Pour intégrer, faire le changement de variable $s = v/(2 \cosh^2 w)$ et donner la solution.

Intrication quantique - EPR - Aspect- Bell

L'essentiel de ce chapitre est tiré d'un article d'Alain Aspect intitulé "Présentation naïve des inégalités de Bell". On peut facilement trouver cet article sur le Web.

1. Vecteurs d'état pour plusieurs particules

Comment construit-on le vecteur d'état pour un système à plusieurs particules? Commençons par deux particules sans interaction (par exemple, sans interaction électrostatique). Baptisons ces deux particules (objets quantiques) comme A et B . Le vecteur d'état de chacun de ces objets pris séparément vit dans son propre espace de Hilbert, H_A ou H_B . Pour considérer ces deux objets quantiques comme un tout, on construit un nouvel espace de Hilbert à partir du produit tensoriel de H_A et H_B

$$(723) \quad H = H_A \otimes H_B$$

avec des vecteurs d'état

$$(724) \quad |\phi, \chi\rangle$$

Nous définissons donc le produit tensoriel à partir d'une application bilinéaire

$$(725) \quad \forall \phi \in H_A, \forall \chi \in H_B \quad (\phi, \chi) \rightarrow \phi \otimes \chi = |\phi, \chi\rangle$$

Introduisons les bases $|i_A\rangle = |i\rangle$ et $|m_B\rangle = |m\rangle$ ¹

$$(726) \quad |\phi, \chi\rangle = \sum_{i \in H_A, m \in H_B} c_i d_m |i, m\rangle$$

si

$$(727) \quad \begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_{i \in H_A} |i\rangle \\ |\chi\rangle &= \sum_{m \in H_B} |m\rangle \end{aligned}$$

avec

$$(728) \quad \langle j, p | i, m \rangle = \delta_{ij} \delta_{pm}$$

Branchons maintenant les interactions. Nous admettrons que l'état $A + B$ reste dans le même espace (cette hypothèse est connue sous le vocable de continuation adiabatique). Le vecteur le plus général s'écrit

$$(729) \quad |\varphi\rangle = \sum_{i, m} b_{im} |i, m\rangle$$

et on a pour des opérateurs O_A, O_B

$$(730) \quad O_A \otimes O_B |\phi, \chi\rangle = |O_A \phi, O_B \chi\rangle$$

1. Il est facile de montrer que si nous changeons de base, nous sommes conduit au même vecteur. Cette définition est donc indépendante du choix de la base, ce qui est bon signe.

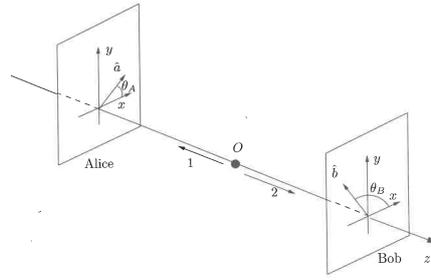


FIGURE 1 – Détermination des axes pour les expériences à un photon. Alice et Bob font les mesures ...

2. États intriqués

Soient deux objets quantiques, chacun pouvant prendre deux états, disons $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Il s'agit par exemple de deux photons avec des états de polarisation suivant x ou y , ou il peut aussi s'agir de deux particules de spin $1/2$ dont la projection du spin suivant z est $1/2$ ou $-1/2$. Le vecteur le plus général dans H_A ou H_B s'écrit

$$(731) \quad \begin{aligned} |\phi\rangle &= \lambda_A |+\rangle + \mu_A |-\rangle \\ |\chi\rangle &= \lambda_B |+\rangle + \mu_B |-\rangle \end{aligned}$$

Le produit tensoriel de ces deux états s'écrit

$$(732) \quad |\phi, \chi\rangle = \lambda_A \lambda_B |+, +\rangle + \lambda_A \mu_B |+, -\rangle + \mu_A \lambda_B |-, +\rangle + \mu_A \mu_B |-, -\rangle$$

qui nous semble bien adapté, si nous mesurons A ou B de façon séparée. Mais, le vecteur le plus général de $H_A \otimes H_B$ est de la forme

$$(733) \quad |\varphi\rangle = \alpha |+, +\rangle + \beta |+, -\rangle + \gamma |-, +\rangle + \delta |-, -\rangle$$

(733) est en fait beaucoup plus général que (732). Tous vecteurs de type (732) s'écrit sous la forme (733) avec la condition $\alpha\delta = \beta\gamma$. Mais tous vecteurs de type (733) ne peut pas toujours se mettre sous la forme (732). Autrement dit, (733) contient une information qui ne peut pas être accessible en mesurant A et B de façon séparée. Nous verrons que cette information est contenue dans les corrélations. Un état de ce type est dit INTRICUÉ, c'est-à-dire un état qui ne s'écrit comme le produit tensoriel direct de deux états (on dit aussi qu'il n'est pas factorisé).

3. Schéma expérimental d'Einstein-Podolsky-Rosen dans la version de Bohm-Aharonov

Nous considérons une source S de photons au point O , cf. Fig 1 avec la notation $1 \leftrightarrow A$, $2 \leftrightarrow B$. Issus d'une seule transition atomique, les deux photons ν_1 et ν_2 sont émis de façon simultanée dans des directions opposées. L'objet quantique est l'ensemble de ces deux photons. De plus, le dispositif expérimental nous assure que les deux photons sont polarisés de la même façon, soit suivant x , soit suivant y , la direction de propagation étant suivant z . Supposant chaque état de polarisation équiprobable, l'état de l'ensemble est donc le vecteur

$$(734) \quad |\phi(\nu_1, \nu_2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x_1, x_2\rangle + |y_1, y_2\rangle)$$

où le premier vecteur correspond à un couple de photons tous les deux polarisés suivant x alors que le deuxième correspond à deux polarisations suivant y . A priori, la mesure peut-être faite de façon simple avec deux polarisateurs. En généralisant ce qui a été fait auparavant, nous disposons donc 2 polarisateurs à deux voies pour les photons 1 et 2, chacun faisant un angle θ_1 et θ_2 respectivement dans le plan xy . Les polarisateurs sont suivis de détecteurs qui donnent $+$ si la polarisation est détectée suivant l'axe du polarisateur et $-$ dans l'autre cas (cf. Fig. 2).

Considérons une mesure sur un seul photon, par exemple le numéro 1. Si cette mesure donne $+$, la partie de la fonction d'onde concernant le photon numéro 1 est projetée sur l'état $|\theta\rangle$. La partie 2 de la fonction d'onde n'est pas touchée, car aucune mesure n'a été faite sur 2. En utilisant les règles sur les angles (737) et (738)

$$(735) \quad |\phi(\nu_1, \nu_2)\rangle_p = \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos(\theta) |\theta, x_2\rangle - \sin(\theta) |\theta_\perp, y_2\rangle)$$

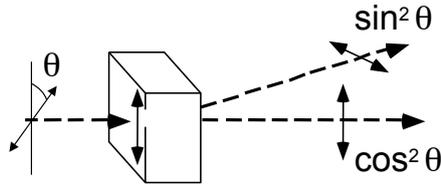


FIGURE 2 – Schéma d'un polarisateur à deux voies. Ici, il n'y a pas d'absorption, toute la lumière ressort. Il y a deux sorties dont les intensités varient en $\cos^2(\theta)$ et $\sin^2(\theta)$. Le photon sera dit dans l'état + s'il est détecté sur la ligne du bas et – s'il est dévié.

Comme ces deux derniers vecteurs sont orthogonaux, la probabilité de mesurer + avec une orientation θ est

$$(736) \quad P_+(\theta_{1,2}) = 1/2 = P_-(\theta_{1,2})$$

Calculons maintenant la probabilité conjointe $P_{++}(\theta_1, \theta_2)$ d'obtenir les valeurs + dans les sorties des deux détecteurs (nous allons aussi calculer P_{-+} , P_{+-} et P_{--}).

Si $|\theta\rangle$ est l'état d'un seul photon dont la polarisation est tournée d'un angle θ

$$(737) \quad \begin{aligned} |\theta\rangle &= \cos\theta |x\rangle + \sin\theta |y\rangle \\ |\theta_{\perp}\rangle &= -\sin\theta |x\rangle + \cos\theta |y\rangle \end{aligned}$$

Soit, pour le photon 1, et en inversant

$$(738) \quad \begin{aligned} |x\rangle &= \cos\theta_1 |\theta_1\rangle - \sin\theta_1 |\theta_{1,\perp}\rangle \\ |y\rangle &= \cos\theta_1 |\theta_{1,\perp}\rangle + \sin\theta_1 |\theta_1\rangle \end{aligned}$$

Nous pouvons donc exprimer l'état (734) sur les 4 états de la base. En suivant les règles du produit tensoriel

$$(739) \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\cos(\theta_1 - \theta_2) |\theta_1, \theta_2\rangle + \cos(\theta_1 - \theta_2) |\theta_{1,\perp}, \theta_{2,\perp}\rangle + \sin(\theta_2 - \theta_1) |\theta_1, \theta_{2,\perp}\rangle + \sin(\theta_2 - \theta_1) |\theta_{1,\perp}, \theta_2\rangle]$$

Ce qui nous permet d'obtenir les probabilités conjointes

$$(740) \quad \begin{aligned} P_{++}(\theta_1, \theta_2) &= P_{--}(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{2} \cos^2(\theta_1 - \theta_2) \\ P_{+-}(\theta_1, \theta_2) &= P_{-+}(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{2} \sin^2(\theta_1 - \theta_2) \end{aligned}$$

On trouve bien que la somme des 4 probabilités donne 1. On retrouve aussi le résultat pour la détection d'un seul photon, par exemple sur le détecteur 1

$$(741) \quad P_+(\theta_1) = P_{++}(\theta_1, \theta_2) + P_{+-}(\theta_1, \theta_2) = 1/2$$

Si $\theta_1 = \theta_2$, nous pouvons conclure

$$(742) \quad \begin{aligned} P_{++}(\theta_1, \theta_2 = \theta_1) &= P_{++}(\theta_1, \theta_2 = \theta_1) = 1/2 \\ P_{+-}(\theta_1, \theta_2 = \theta_1) &= P_{-+}(\theta_1, \theta_2 = \theta_1) = 0 \end{aligned}$$

Comme les probabilités pour les états croisés $|+, -\rangle$ et $|-, +\rangle$ sont strictement nulles, nous sommes sûrs de mesurer les mêmes états pour les photons 1 et 2, soit + avec une probabilité 1/2 et – avec une probabilité 1/2. Les deux mesures sont donc fortement corrélés dans ce cas particulier.

Dans le cas général où $\theta_1 \neq \theta_2$, introduisons

$$(743) \quad \begin{aligned} E(\theta_1 - \theta_2) &= P_{++}(\theta_1, \theta_2) + P_{--}(\theta_1, \theta_2) - P_{+-}(\theta_1, \theta_2) - P_{-+}(\theta_1, \theta_2) \\ &= \cos(2(\theta_1 - \theta_2)) \end{aligned}$$

qui donne 1 dans le cas $\theta_1 = \theta_2$ et 0 si les deux angles diffèrent de $\pi/2$. Dans le cas général, il existe de fortes corrélations. Quelle en est l'origine ?

4. Une difficulté

Les deux mesures ont lieu de côté opposé et il y a donc une distance physique entre les deux détecteurs. On est donc enclin à séparer les deux mesures. Mais la mécanique quantique nous enseigne que la mesure sur un seul photon projette la fonction d'onde sur l'état donné par la mesure. Ici, c'est la fonction d'onde totale qu'il faut considérer. Autrement dit, si nous prenons la mesure sur le photon 1, nous avons une probabilité $1/2$ d'avoir une polarisation sur l'axe x ou y (ou sur un axe arbitraire si $\theta_1 = \theta_2$). La polarisation de ce photon qui n'était pas initialement définie avant la mesure est maintenant fixée sur cet axe de polarisation après la mesure (projection). Si maintenant, nous effectuons une mesure sur 2 juste après avoir fait la mesure sur 1, alors nous devons trouver le même résultat que sur 1. Il y a donc un brusque changement du photon 2 qui se fait instantanément, car le photon 2 a lui aussi subi une projection. On conclut :

- (1) Cette transmission instantanée de l'information soulève de sérieux problèmes sur le plan de la relativité où la propagation d'un signal ne peut avoir lieu qu'avec une vitesse finie et ne peut donc être instantanée ;
- (2) On peut prédire, par déduction, le résultat d'une mesure sur 2 à partir d'une mesure sur 1. Prédire est ici employé au sens propre, c'est-à-dire sans avoir fait la mesure sur 2. Mais la fonction d'onde, par construction, ne prédit par le résultat d'une mesure. Cette prédétermination peut laisser penser qu'une description plus complète de l'état à 2 particules est possible.

Le point 2 mérite une discussion plus approfondie. Si je peux prédire ou déduire quelque chose sur le photon 2 en partant d'une mesure sur 1, il y a un élément de réalité (expression d'Einstein lui-même) qui échappe à la fonction d'onde. L'argument est encore plus incisif dans l'exemple suivant.

Deux particules de même masse sont émises dans des directions opposées avec la même quantité de mouvement. Les particules sont sans interaction. Donc, la connaissance de la distance parcourue par l'une est suffisante pour prédire celle de l'autre. La quantité de mouvement étant conservée, la mesure de la vitesse sur l'une permet aussi de prédire la vitesse de l'autre.

Alors :

- (1) Mesurons la position sur la particule 1 ;
- (2) Mesurons aussi la quantité de mouvement sur 1. Cette mesure viendra perturber (projeter) la fonction d'onde de 1, mais pas la fonction d'onde de 2. C'est ce que dit le principe d'incertitude d'Heisenberg.
- (3) Donc, je peux connaître la quantité de mouvement et la position de la particule 2 avec une précision infinie par déduction. Or, les opérateurs ne commutent pas et la mécanique quantique ne peut attribuer de valeurs précises à la fois à la position et à la fois à la quantité de mouvement. Donc, il n'y pas de contre-partie pour tout élément de réalité physique (A. Einstein)². La mécanique quantique est donc incomplète, ce qui ne veut pas dire qu'elle fausse, mais seulement approximative.

5. Paramètres supplémentaires

Pouvons-nous comprendre les corrélations de type EPR (cf. (743)) à partir d'un schéma classique ? Ici, nous oublions la mécanique quantique et nous désirons tenir compte de la corrélation entre les 2 photons d'une même paire par une variable λ . Cette variable sera supposée continue, mais toutes les hypothèses sont possibles (variable discrète, vecteur etc.).

Chaque paire émise possède une valeur de λ . Mais nous ne connaissons pas λ , ni ce qui détermine sa valeur. Comme nous n'avons pas le contrôle sur λ , ce paramètre est une variable aléatoire qui va varier d'une paire à une autre et cette variable aléatoire est caractérisée par une densité de probabilité $\rho(\lambda)$, telle que

$$(744) \quad \begin{aligned} \rho(\lambda) &\geq 0 \\ \int d\lambda \rho(\lambda) &= 1 \end{aligned}$$

Nous supposons toujours que le résultat A de la mesure de la polarisation du photon 1 peut prendre deux valeurs, soit ± 1 . Le résultat de cette mesure dépend évidemment de l'état de polarisation θ_1 du

2. Pan, sur le bec ...comme on dit dans la presse du mercredi.

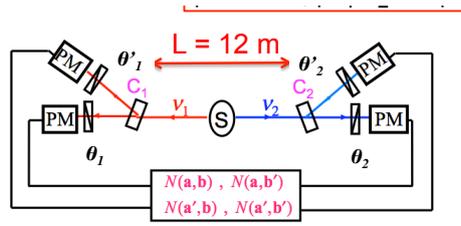


FIGURE 3 – C_1 et C_2 sont des commutateurs optiques capables de basculer à l'échelle de la nanoseconde et dirigeant soit vers le polarisateur θ_1 , soit vers le polarisateur θ'_1 (pour le photon 1). L est une distance qui doit être la plus grande possible si l'on accepte le principe que deux événements distants l'un de l'autre est une réalité physique différente.

photon 1, mais aussi de λ . On écrit

$$(745) \quad A(\lambda, \theta_1) = \pm 1$$

De même, pour le photon 2

$$(746) \quad B(\lambda, \theta_2) = \pm 1$$

Le point fondamental est que A ne dépend pas de θ_2 et B ne dépend pas de θ_1 . On en connaît, ni A_1 ni A_2 . Mais si une variable cachée existe, alors ces deux fonctions existent elles aussi. Avec cette définition, sinous faisons plusieurs mesures, nous obtenons une suite aléatoire $1, -1, 1, \dots, 1, \dots$. Donc $1/2(1 + A_1)$ est une suite de 0 et 1. La probabilité de mesurer un événement $+$ est alors sur le détecteur 1

$$(747) \quad \int d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{2} (1 + A_1(\lambda, \theta))$$

et celle d'un événement $-$

$$(748) \quad \int d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{2} (1 - A_1(\lambda, \theta))$$

La probabilité conjointe $P(\theta_1, \theta_2)$ est alors

$$(749) \quad P_{+-}(\theta_1 - \theta_2) = \int d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{4} (1 + A_1(\lambda, \theta_1))(1 + A_2(\lambda, \theta_2))$$

L'équivalent de (743) est alors

$$(750) \quad E(\theta_1 - \theta_2) = \int d\lambda A_1(\lambda, \theta_1) A_2(\lambda, \theta_2)$$

Le modèle n'a donc de sens que si l'on se donne les deux fonctions $A_1(\lambda, \theta_1)$ et $A_2(\lambda, \theta_2)$. Le résultat dû à Bell (Aspect, Dalibard, Grangier, Roger) est que la recherche de ces deux fonction est sans espoir.

6. Inégalité de Bell

L'affaire peut paraître un peu tordue, mais nous considérons 4 angles

$$(751) \quad \begin{aligned} S &= A_1(\lambda, \theta_1)A_2(\lambda, \theta_2) - A_1(\lambda, \theta_1)A_2(\lambda, \theta'_2) + A_1(\lambda, \theta'_1)A_2(\lambda, \theta_2) + A_1(\lambda, \theta'_1)A_2(\lambda, \theta'_2) \\ &= A_1(\lambda, \theta_1) (A_2(\lambda, \theta_2) - A_2(\lambda, \theta'_2)) + A_1(\lambda, \theta'_1) (A_2(\lambda, \theta_2) + A_2(\lambda, \theta'_2)) \end{aligned}$$

qui démontre que S ne peut prendre ses valeurs que dans l'intervalle $[-2, +2]$. Par conséquent, en valeur moyenne, $|\langle S \rangle| \geq 2$.

Il est alors utile de comparer à la prédiction quantique. Dans ce cas, (751) est calculé à l'aide de (743) et donne

$$(752) \quad \langle S \rangle = \cos(2(\theta_1 - \theta_2)) - \cos(2(\theta_1 - \theta'_2)) + \cos(2(\theta'_1 - \theta_2)) + \cos(2(\theta'_1 - \theta'_2))$$

qui est une fonction de $\theta_1 - \theta_2$, $\theta_2 - \theta'_1$ et $\theta'_2 - \theta'_1$, car

$$(753) \quad \theta'_2 - \theta_1 = \theta_2 - \theta_1 + \theta'_1 - \theta_2 + \theta'_2 - \theta'_1$$

et nous prenons

$$(754) \quad \theta = \theta_1 - \theta'_2 = \theta'_1 - \theta_2 = \theta'_1 - \theta'_2$$

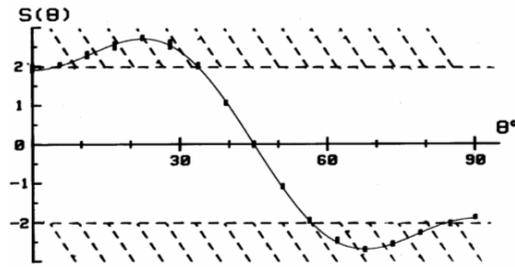


FIGURE 4 – Les points sont les résultats expérimentaux avec les barres d'erreur. La courbe est de celle de l'équation (755).

ce qui permet de tracer $S(\theta)$ comme une fonction du seul angle θ :

$$(755) \quad \langle S(\theta) \rangle = 3 \cos(2\theta) - \cos(6\theta)$$

La courbe sort clairement de l'intervalle $[-2, +2]$ et ... il n'y a pas de paramètre ajustable pour les points expérimentaux (Cf. Fig 4).

En guise de conclusion : Ces expériences ont été améliorées jusqu'en 2015 avec les même résultats.

Le problème de Sturm-Liouville

Dans cette section, nous allons étudier un cadre général qui permet de montrer que certaines fonctions sont orthogonales entre elles. Nous allons obtenir ces fonctions comme les solutions d'une équation différentielle qui appartient à une classe très générale[3].

DÉFINITION 24. *L'équation de Sturm-Liouville est l'équation différentielle ordinaire :*¹

$$(758) \quad \frac{d}{dx} \left(r(x) \frac{dy}{dx} \right) + (q(x) + \lambda p(x))y = 0 \quad \text{où } x \in [a, b]$$

Ici $p(x)$, $r(x)$, $q(x)$ sont des fonctions à valeurs réelles sur $[a, b]$ et où $y(x)$ et la constante $\lambda \in \mathbb{C}$ sont toutes les deux à DÉTERMINER. L'équation de Schrödinger est une équation de type Sturm-Liouville, où la fonction $q(x)$ joue le rôle de potentiel (avec $r(x) = p(x) = 1$).

EXEMPLE 14. (1) L'équation de Bessel : $x^2 y''(x) + cy'(x) + (x^2 - \nu^2)y(x) = 0$

(2) L'équation d'Hermite : $\frac{d}{dx} [e^{-x^2} y'(x)] + \lambda e^{-x^2} y = 0$

(3) L'équation de Chebyshev : $\frac{d}{dx} [\sqrt{1-x^2} y'(x)] + \frac{\lambda}{\sqrt{1-x^2}} y = 0$

EXEMPLE 15. *Considérons l'équation différentielle :*

$$(759) \quad y'' + q(x)y = \lambda y(x) \quad x \in [a, b]$$

avec les conditions aux limites :

$$(760) \quad u(a) \cos \alpha + u'(a) \sin \alpha = 0$$

$$(761) \quad u(b) \cos \beta + u'(b) \sin \beta = 0$$

Cette équation est du type (758) et elle peut être mise sous la forme

$$(762) \quad \mathcal{L}y = \lambda y$$

où \mathcal{L} est un opérateur. Le paramètre λ suggère que le problème soit apparenté à une sorte de problème à valeurs propres. Ce type de problème est un problème spectral de type Sturm-Liouville où λ joue le rôle des niveaux d'énergie dans le l'équation de Schrödinger.

La raison principale qui nous conduit à considérer le problème des valeurs propres est le résultat suivant :

THÉORÈME 30. *Soit A une matrice $n \times n$ dans une espace vectoriel \mathcal{E} de dimension fini n muni d'un produit scalaire. Supposons*

$$(763) \quad \forall (x, y) \in \mathcal{E}^2 \quad (x, Ay) = (Ax, y)$$

Alors

(1) \mathcal{E} possède une base orthonormale de vecteurs propres associés aux valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$.

(2) A peut être décomposé comme :

$$(764) \quad A = \sum_i \lambda_i P_i$$

où les P_i sont des projections orthogonales.

1. On se placera dans la suite dans $\mathcal{L}^2[a, b]$ muni du produit scalaire :

$$(756) \quad \langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \bar{g}(x) dx$$

Rappelons l'inégalité qui nous sera utile :

$$(757) \quad |\langle f, g \rangle|^2 \leq \langle f, f \rangle \langle g, g \rangle$$

Procédant par analogies, nous chercherons à :

- (1) Déterminer les vecteurs propres correspondants à l'opérateur \mathcal{L} et décrire le développement de y sur cette base.
- (2) Déterminer comment \mathcal{L} peut être écrit dans cette base.

Bien que l'équation de Sturm-Liouville ait une forme spéciale, beaucoup d'équations d'ordre 2 se ramènent à cette équations. En particulier :

THÉORÈME 31. Supposons que la fonction $\alpha_1(x)$ ne s'annule jamais. La définition

$$(765) \quad r(x) = \exp\left\{\left[\int_0^x \frac{\alpha_2(t)}{\alpha_1(t)} dt\right]\right\}$$

$$(766) \quad q(x) = \frac{\alpha_3(x)}{\alpha_1(x)} r(x)$$

$$(767) \quad p(x) = \frac{r(x)}{\alpha_1(x)}$$

montre que l'équation de Sturm-Liouville est équivalente à l'équation :

$$(768) \quad \alpha_1(x) \frac{d^2 y}{dx^2} + \alpha_2(x) \frac{dy}{dx} + (\alpha_3(x) + \lambda)y(x) = 0$$

DÉFINITION 25. On appelle problème de Sturm-Liouville (SLP) le problème qui consiste à déterminer la solution de l'équation :

$$(769) \quad \frac{d}{dx} \left(r(x) \frac{dy}{dx} \right) + (q(x) + \lambda p(x))y = 0 \text{ où } x \in [a, b]$$

avec les conditions aux limites

$$(770) \quad k_1 y(a) + k_2 y'(a) = 0$$

$$(771) \quad l_1 y(b) + l_2 y'(b) = 0$$

où $(k_1, k_2) \neq (0, 0)$ et $(l_1, l_2) \neq (0, 0)$ sont donnés et où λ est un paramètre quelconque qui est déterminé par la condition que le problème ait une solution autre que la solution nulle. C'est donc la solution du problème qui détermine λ . On appelle λ la valeur propre et la solution associée $y(x, \lambda)$ la fonction propre associée.

EXERCICE 39. Trouver la solution du problème de Sturm-Liouville pour les problèmes suivants :

$$(1) \quad y'' + \lambda y = 0, \quad y(0) = y'(\pi) = 0$$

$$(2) \quad y'' + \lambda y = 0, \quad y(0) - y'(\pi) = 0$$

DÉFINITION 26. Il y a 3 types de problèmes de SLP :

(1) Régulier si $p(x) > 0$ et $r(x) > 0$ sur $[a, b]$.

(2) Singulier si $p(x) > 0$ et $r(x) \geq 0$ sur $]a, b[$ avec $p(a) = p(b) = 0$.

(3) Périodique $y(a) = y(b) = 0$.

Dans la suite, nous nous intéresserons principalement aux problèmes réguliers ou périodiques.

REMARQUE 17. L'une des propriétés remarquables est qu'une matrice symétrique possède des valeurs propres réelles et que ses vecteurs propres forment une base orthonormée. Nous verrons que le problème de Sturm-Liouville a des propriétés similaires et que l'on peut définir l'adjoint d'un opérateur comme on définit l'adjoint d'une matrice et que ceux-ci possèdent une base propre orthogonale.

REMARQUE 18. Le spectre des valeurs propres de l'équation de Schrödinger sur l'axe réel est toujours continu. Il existe des valeurs de λ pour lesquelles les solutions sont à la fois non bornées et ne décroissent pas à l'infini.

Anderson (1958) a démontré qu'un potentiel aléatoire stationnaire pour les milieux désordonnés peut avoir un spectre dense de fonctions propres associées à des fonctions ayant une décroissance exponentielle. Ce phénomène est appelé localisation d'Anderson.

Comme exemple, considérons l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$(772) \quad u''(x) + \left[\sum_{n \in \mathbb{Z}} Q_n f(x-n) \right] u(x) = \lambda u(x)$$

où $f(x)$ est un potentiel donné et où les Q_n sont des variables aléatoires indépendantes distribuées suivant la même loi de probabilité. Le spectre de cette équation est dense et dénombrable dans $\lambda \in [0, \infty[$ avec des solutions exponentiellement décroissantes.

THÉORÈME 32. Pour un problème RÉGULIER :

- (1) Les valeurs propres sont réelles.
- (2) Les fonctions propres correspondantes à des valeurs propres distinctes sont orthogonales avec le poids $p(x)$:

$$\int_a^b dx p(x) u_i(x) u_j(x) = 0 \text{ si } i \neq j$$

- (3) Les valeurs propres sont simples : l'espace associé à une valeur propre est de dimension 1.
- (4) L'opérateur associé est auto-adjoint.
- (5) Le spectre de l'opérateur $-L$ défini plus loin est borné inférieurement.
- (6) L'ensemble des vecteurs propre constitue une base complète sur laquelle toute fonction suffisamment régulière et ayant les bonnes conditions aux limites peut être développée.

POINT 1 :

Nous avons en notant \bar{y} le conjugué complexe de y :

$$(773) \quad \bar{y} \frac{d}{dx} \left[r \frac{dy}{dx} \right] + \bar{y} (q + \lambda p) y = 0 + \text{Conditions aux limites}$$

$$(774) \quad y \frac{d}{dx} \left[r \frac{d\bar{y}}{dx} \right] + y (q + \bar{\lambda} p) \bar{y} = 0 + \text{Conditions aux limites}$$

d'où

$$(775) \quad [r (y' \bar{y} - y \bar{y}')] + (\lambda - \bar{\lambda}) p |y|^2 = 0$$

Soit en intégrant

$$(776) \quad [r (y' \bar{y} - y \bar{y}')]_a^b = -(\lambda - \bar{\lambda}) \int_a^b dx p(x) |y(x)|^2$$

En raison des conditions aux limites, le membre de gauche est nul. La fonction $p(x)$ est supposée strictement positive et l'intégrale est nécessairement non nulle si la fonction $y(x)$ n'est pas la fonction nulle. D'où $\lambda = \bar{\lambda}$. \square

POINT 2 :

Soient $u_{i,j}$ deux fonctions propres associées à deux valeurs propres $\lambda_i \neq \lambda_j$. En procédant comme au point 1 :

$$(777) \quad [r (u'_i u_j - u_i u'_j)]_a^b = -(\lambda_i - \lambda_j) \int_a^b dx p(x) u_i(x) u_j(x) = 0$$

Comme auparavant, le membre de gauche est nul en raison des conditions aux limites. D'où le résultat. \square

POINT 3 :

Ce point est le plus délicat. Rappelons le théorème d'algèbre :

THÉORÈME 33. Soit A une matrice $n \times n$ définie dans un espace vectoriel V avec un produit scalaire (x, y) . Si $(Ax, y) = (x, Ay)$ alors

- (1) V possède une base orthonormale (v_1, v_2, \dots, v_n) de vecteurs propres correspondants à des valeurs propres distinctes $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$.
- (2) La matrice A peut être décomposée comme $\sum_{i=1, n} \lambda_i P_i$ où les P_i sont les projecteurs sur la base (v_1, v_2, \dots, v_n) .

Pour définir l'équivalent d'une matrice symétrique, il faut définir ce qu'est un opérateur auto-adjoint. Considérons l'opérateur L défini par :

$$(778) \quad Lu = a_0(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + a_1(x) \frac{du}{dx} + a_2(x) u(x)$$

sur l'espace des fonction définies sur $[x_0, x_1]$ avec les conditions aux limites $u(x_0) = u(x_1) = 0$. On peut prendre d'autres conditions aux limites mais celles-ci simplifieront l'écriture. Nous désirons trouver la solution de

$$(779) \quad Lu = f(x)$$

sous la forme

$$(780) \quad u(x) = \int_{x_0}^{x_1} G(x; z)f(z) dz = (G_x, f)$$

où $G_x(z) = G(x; z)$ est une fonction de x quand z est donné. On a

$$(781) \quad u(x) = (G_x, f) = (G_x, Lu)$$

DÉFINITION 27. On définit l'adjoint de L , l'opérateur L^* tel que

$$(782) \quad \forall (u, v), \quad (v, Lu) = (L^*v, u) + BT$$

où BT désigne l'ensemble des termes qui ne dépendent que des extrémités de l'intervalle $[x_0, x_1]$.

EXEMPLE 16. Ici

$$(783) \quad \begin{aligned} (v, Lu) &= \int_{x_0}^{x_1} dx v [a_0 u'' + a_1 u' + a_2 u] \\ &= (a_0 v'' + (2a_0' - a_1)v' + (a_2 + a_0'' - a_1')v, u) + [a_0(vu' - v'u) + (a_1 - a_0')uv]_{x_0}^{x_1} \end{aligned}$$

Le dernier terme est un terme qui ne dépend que des points x_0 et x_1 . Il est nul en raison des conditions aux limites. Le premier terme, quant à lui, donne la définition de l'adjoint de L

$$(784) \quad L^*v = a_0 v'' + (2a_0' - a_1)v' + (a_2 + a_0'' - a_1')v$$

DÉFINITION 28. Un opérateur est auto-adjoint si $L = L^*$. En particulier, si $a_0' = a_1$, il est de type Sturm-Liouville (et nécessairement auto-adjoint).

THÉORÈME 34. On a :

$$(785) \quad L^*G_x = \delta(x - z)$$

au sens des distributions. En effet :

$$(786) \quad u(x) = (G_x, Lu) = (L^*G_x, u) + BT$$

Mais $BT = 0$ si $G_x(x_0) = G_x(x_1) = 0$. Donc

$$(787) \quad u(x) = \int_{x_0}^{x_1} G_x(z)u(z) dz$$

D'où la propriété.

REMARQUE 19. Un opérateur de type Sturm-Liouville peut être mis sous la forme

$$(788) \quad Lu = (p(x)u')' + q(x)u$$

avec les conditions aux limites

$$(789) \quad \alpha_1 u(a) + \alpha_2 u'(a) = 0$$

$$(790) \quad \beta_1 u(b) + \beta_2 u'(b) = 0$$

THÉORÈME 35. Les valeurs propres de l'opérateur $-L$ possèdent une borne inférieure.

Nous démontrons le théorème lorsque $\alpha_2 = \beta_2 = 0$ (dans le cas contraire, la démonstration est moins évidente). Nous avons :

$$(791) \quad \begin{aligned} (-Lu, u) &= \int_a^b [-(pu')' \bar{u} - r|u|^2] dx \\ &= \int_a^b [p|u'|^2 - r|u|^2] dx + p(a)u'(a)u(a) - p(b)u'(b)u(b) \end{aligned}$$

Mais $u(a) = u(b) = 0$ en raison des conditions aux frontières. Si u est un vecteur propre associé à la valeur propre λ alors :

$$(792) \quad \lambda \|u\|^2 = \int_a^b p(x)|u'|^2 dx - \int_a^b r(x)|u(x)|^2 dx \geq \|u\|^2 \max\{|r(x)| : a \leq x \leq b\}$$

Ce qui achève la démonstration. □

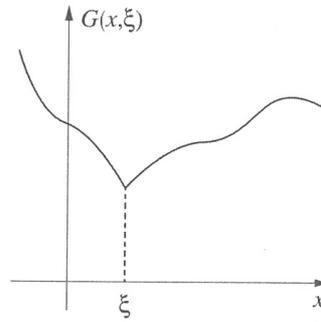


FIGURE 1 – Saut de la dérivée des fonctions de Green.

1. Existence des fonctions propres (vecteurs propres)

1.1. Fonctions de Green. Considérons l'opérateur auto-adjoint :

$$(793) \quad L = p \frac{d^2}{dx^2} + p' \frac{d}{dx} + r$$

avec les conditions aux limites

$$(794) \quad \alpha_1 u(a) + \alpha_2 u'(a) = 0, \quad |\alpha_1| + |\alpha_2| > 0$$

$$(795) \quad \beta_1 u(b) + \beta_2 u'(b) = 0, \quad |\beta_1| + |\beta_2| > 0$$

DÉFINITION 29. Une fonction de Green pour cette opérateur est une fonction :

(1) De $[a, b] \times [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$.

(2) $G(x, \xi)$ satisfait les conditions aux limites (794) pour les DEUX variables x et ξ . $G(x, \xi) = G(\xi, x)$.

(3) $G(x, \xi)$ est continue sur $[a, b] \times [a, b]$ est de classe C^2 sur $[a, b] \times [a, b]$ sauf sur la droite $x = \xi$. En dehors de cette droite, G satisfait à $L_x G(x, \xi) = 0$.

(4) Enfin, la dérivée (par rapport à x) de $G(x, \xi)$ subit un saut au voisinage de $x = \xi$, voir Fig. 1

$$(796) \quad \frac{\partial G}{\partial x}(x = \xi^+, \xi) - \frac{\partial G}{\partial x}(x = \xi^-, \xi) = \frac{1}{p(\xi)}$$

EXERCICE 40. Démontrer que la dernière propriété revient à exiger :

$$(797) \quad L_x G(x, \xi) = \delta(x - \xi)$$

1.2. Construction de la fonction de Green. Nous considérons à nouveau les conditions aux limites (794). L'équation différentielle étant une équation du deuxième ordre, nous savons que si nous pouvons trouver deux solutions indépendantes v_1 et v_2 telles que :

$$(798) \quad v_1(a) = \alpha_2 \quad v_1'(a) = -\alpha_1$$

$$(799) \quad v_2(b) = \beta_2 \quad v_2'(b) = -\beta_1$$

alors ce couple est unique. Nous supposons que ces deux solutions sont linéairement indépendantes, c'est-à-dire que le Wronskien $W(v_1, v_2)(x)^2$

$$(801) \quad W(v_1, v_2) = v_1(x)v_2'(x) - v_1'(x)v_2(x)$$

2. Soient f, g deux fonctions. Le déterminant

$$(800) \quad W(f, g)(x) = \begin{vmatrix} f(x) & g(x) \\ f'(x) & g'(x) \end{vmatrix}$$

est appelé le Wronskien de f et g .

Si $y_1(x)$ et $y_2(x)$ sont deux solutions indépendantes d'une équation homogène sur un intervalle, alors leur wronskien est strictement non-nul sur cet intervalle.

ne s'annule jamais. Définissons $G(x, \xi)$ comme :

$$(802) \quad G(x, \xi) = \begin{cases} c^{-1}v_1(\xi)v_2(x) & a \leq \xi \leq x \leq b \\ c^{-1}v_1(x)v_2(\xi) & a \leq x \leq \xi \leq b \end{cases}$$

où

$$(803) \quad c = p(x) [v_1(x)v_2'(x) - v_1'(x)v_2(x)] = p(x)W(v_1, v_2)$$

est une constante non-nulle. c est une constante, car

$$(804) \quad [p(v_1v_2' - v_1'v_2)] = v_1Lv_2 - v_2Lv_1 = 0$$

$G(x, \xi)$ défini par (802) possède toutes les propriétés des fonctions de Green. Nous avons en particulier

$$(805) \quad \frac{\partial G}{\partial \xi}(x, x + \epsilon) - \frac{\partial G}{\partial \xi}(x, x - \epsilon) = \frac{1}{c} [v_1(x)v_2'(x + \epsilon) - v_1'(x - \epsilon)v_2(x)]$$

tend vers $1/p(x)$ quand $\epsilon \rightarrow 0$.

1.3. Un problème équivalent : Il existe un inverse de l'opérateur L .

DÉFINITION 30. Pour toute fonction f de $C([a, b])$, on construit l'opérateur T agissant sur f :

$$(806) \quad (Tf)(x) = \int_a^b G(x, \xi)f(\xi) d\xi$$

THÉORÈME 36. L'opérateur T joue le rôle de "l'inverse" de L

$$(807) \quad L(Tf)(x) = f(x)$$

$$(808) \quad T(Lu)(x) = u(x)$$

THÉORÈME 37. Si u est une vecteur propre du problème de Sturm-Liouville avec la valeur propre λ , c'est-à-dire si :

$$(809) \quad Lu = \lambda u$$

Alors u est valeur propre de T avec la valeur propre $-1/\lambda$ et $\lambda \neq 0$.

Pour démontrer ce théorème, nous démontrons les propositions suivantes :

PROPOSITION 1.

$$(810) \quad \forall f \in C^2([a, b]) \quad L(Tf)(x) = f(x)$$

PROPOSITION 2.

$$(811) \quad \forall f \in C^2([a, b]) \quad L(Tu)(x) = u(x)$$

Ce qui démontre que T est "l'inverse" de L .

Ceci étant démontré, nous avons :

$$(812) \quad Lu + \lambda u = 0 \Leftrightarrow Tu = \mu u \text{ avec } \mu = -1/\lambda$$

Dans la suite, il sera plus facile de travailler avec T et non pas avec L .

DÉMONSTRONS MAINTENANT LA PROPOSITION 1 Nous laisserons 2 de côté pour ne pas nous fatiguer inutilement. On a :

$$(813) \quad (Tf)(x) = \int_a^x G(x, \xi)f(\xi)d\xi + \int_x^b G(x, \xi)f(\xi)d\xi$$

$$(814) \quad (Tf)'(x) = \int_a^x G_x(x, \xi)f(\xi)d\xi + \int_x^b G_x(x, \xi)f(\xi)d\xi$$

$$(Tf)''(x) = \int_a^x G_{xx}(x, \xi)f(\xi)d\xi + G_x(x, x^-)f(x^-)$$

$$(815) \quad + \int_x^b G_{xx}(x, \xi)f(\xi)d\xi - G_x(x, x^+)f(x^+)$$

Or :

$$(816) \quad G_x(x, x^-) - G_x(x, x^+) = \frac{1}{c} [v_1(x^-)v_2'(x) - v_1'(x)v_2(x^+)] = \frac{1}{p(x)}$$

D'où

$$(817) \quad L(Tf)(x) = \int_a^x L_x G(x, \xi) f(\xi) d\xi + \int_x^b L_x G(x, \xi) f(\xi) d\xi + f(x)$$

$$(818) \quad = f(x)$$

2. Ensemble équicontinu de fonctions

DÉFINITION 31. FONCTIONS ÉQUICONTINUES :

La définition généralise la notion de fonction continue à un ensemble F de fonctions. On remarque que le paramètre δ ne dépend pas de la fonction f choisie dans F :

$$(819) \quad \forall \epsilon > 0 \exists \delta : \forall (x, \xi) \in [a, b]^2 |x - \xi| < \delta \rightarrow |f(x) - f(\xi)| < \epsilon, \forall f \in F$$

THÉORÈME 38. L'ensemble des fonctions

$$\{Tu : u \in C([a, b]) \text{ avec } \|u\| \leq 1\}$$

est majoré de façon uniforme et est un ensemble équicontinu.

Toute application continue étant nécessairement uniformément continue si son espace de départ est compact, la fonction de Green G de $[a, b] \times [a, b]$ dans \mathbb{R} est uniformément continue (théorème de Heine) et elle est majorée par une constante positive M . Comme (inégalité de Schwarz)

$$|Tu(x)| = | \langle G(x, \xi)u(\xi) \rangle | \leq M\sqrt{b-a}\|u\|$$

alors l'ensemble :

$$\{Tu : \|u\| = 1\}$$

est nécessairement majoré par $M\sqrt{b-a}$.

$G(x, \xi)$ étant uniformément continue sur $[a, b] \times [a, b]$:

$$\forall \epsilon \exists \delta \text{ tel que : } x_1, x_2 \in [a, b], |x_1 - x_2| < \delta \rightarrow |G(x_1, \xi) - G(x_2, \xi)| < \epsilon$$

où ϵ ne dépend pas de ξ .

Par conséquent, pour toute fonction continue sur $[a, b]$:

$$|x_1 - x_2| < \delta \Rightarrow |Tu(x_1) - Tu(x_2)| \leq \epsilon\sqrt{b-a}\|u\| \leq \epsilon\sqrt{b-a}$$

si $\|u\| = 1$. D'où, en d'autres mots, l'ensemble

$$\{Tu : u \in C([a, b]) \text{ avec } \|u\| \leq 1\}$$

est équicontinu.

DÉFINITION 32. On définit la norme de l'opérateur T par :

$$(820) \quad \|T\| = \sup \|Tu\| : u \in C([a, b]), \|u\| = 1$$

Cette définition est équivalente à :

$$(821) \quad \|T\| = \sup_{\|u\|=1} | \langle Tu, u \rangle |$$

En effet, on a par définition du "sup" :

$$(822) \quad | \langle Tu, u \rangle | \leq \|T\|$$

Pour montrer l'inégalité inverse, remarquons :

$$(823) \quad 2\text{Re}(\langle Tu, v \rangle) \leq (\|u\|^2 + \|v\|^2) \sup_{\|u\|=1} | \langle Tu, u \rangle |$$

Posant $v = Tu/\|u\|$, donne l'inégalité cherchée.

THÉORÈME 39. Ascoli-Arzelà : Soit X un espace métrique compact (prendre un sous ensemble de \mathbb{R}^n si besoin est). On considère l'ensemble des fonctions continues sur X et prenant des valeurs dans \mathbb{C} . Si une suite $\{f_n\}_{n \geq 1}$ dans $C(X)$ est bornée et équicontinue, alors on peut extraire une suite convergente dans $C(X)$ et cette convergence est uniforme.

3. Construction de la base propre de l'opérateur T

THÉORÈME 40. *Ou T a pour valeur propre $\|T\|$, ou T a pour valeur propre $-\|T\|$.*

Sachant que $\langle Tu, u \rangle$ est un nombre réel positif ou négatif (il suffit d'intégrer par parties) :

$$(1) \text{ Ou } \|T\| = \sup_{\|u\|=1} \langle Tu, u \rangle.$$

$$(2) \text{ Ou } \|T\| = \inf_{\|u\|=1} \langle Tu, u \rangle.$$

Supposons que nous soyons dans la cas 1. Posons :

$$(824) \quad \mu_0 = \|T\|$$

Il existe donc une suite de fonctions $u_k(x)$ de norme 1 telles que

$$(825) \quad \langle Tu_k, u_k \rangle \rightarrow \|T\| \text{ pour } k \rightarrow \infty$$

Utilisant le théorème d'Ascoli-Arzelà, nous pouvons extraire une suite qui converge uniformément vers une fonction notée $\phi_0(x)$. Pour simplifier l'écriture, nous noterons $\{Tu_k\}_{k \geq 1}$ cette suite. Cette suite converge donc vers une limite $\phi_0(x)$ qui est une fonction continue

THÉORÈME 41. *La fonction $\phi_0(x)$ est le vecteur propre associé à $\|T\|$.*

La fonction $\phi_0(x)$ étant continue, il suffit de montrer :

$$(826) \quad \|T\phi_0 - \mu_0\phi_0\| = 0$$

Pour simplifier les notations, redéfinissons la suite u_k telle que sous-suite convergente soit identifiée avec $\{u_k\}_{k \in \mathbb{N}}$. Par définition :

$$(827) \quad \|Tu_k - \phi_0\| \rightarrow 0$$

Ce qui veut dire : $\|Tu_k\| \rightarrow \|\phi_0\|$.

Comme les u_k sont de norme 1 :

$$(828) \quad \|Tu_k - \mu_0 u_k\|^2 = \|Tu_k\|^2 + \mu_0^2 - 2\mu_0 \langle Tu_k, u_k \rangle$$

où le membre droite tend vers $\|\phi_0\|^2 + \mu_0^2 - 2\mu_0^2 = \|\phi_0\|^2 - \mu_0^2$. D'où $\|\phi_0\|^2 \geq \mu_0^2 > 0$ et la fonction $\phi_0(x)$ ne peut être la fonction identiquement nulle.

Mais $\|Tu_k\|^2 \leq \|T\|^2 \|u_k\|^2 = \mu_0^2$. Utilisant (828) :

$$(829) \quad \|Tu_k - \mu_0 u_k\|^2 \leq 2\mu_0^2 - 2\mu_0 \langle Tu_k, u_k \rangle$$

Soit, d'après (825) :

$$(830) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \|Tu_k - \mu_0 u_k\|^2 = 0$$

Enfin (inégalité du triangle) :

$$(831) \quad 0 \leq \|T\phi_0 - \mu_0\phi_0\| \leq \|T\phi_0 - T(T(u_k))\| + \|T(T(u_k)) - \mu_0 T(u_k)\| + \|\mu_0 T(u_k) - \mu_0\phi_0\|^2$$

et nous avons : $\|T(\psi)\| \leq \|T\| \|\psi\|$ pour toute fonction ψ . T étant un opérateur linéaire, nous en déduisons

$$(832) \quad \|T\phi_0 - \mu_0\phi_0\| \rightarrow 0$$

et comme $\phi_0(x)$ est une fonction continue :

$$(833) \quad T\phi_0 = \mu_0\phi_0$$

CONSTRUCTION DES AUTRES VECTEURS PROPRES :

Pour construire les autres vecteurs propres, procédons comme suit. Soit $\mu_0 = \|T\|$ et renormalisons $\phi_0(x)$

$$(834) \quad \psi_0(x) = \frac{\phi_0(x)}{\|\phi_0(x)\|}$$

Considérons le nouvel opérateur (remarquer que l'on retranche la composante de u suivant ψ_0)

$$(835) \quad (T_1 u)(x) = T(u - \langle u, \psi_0 \rangle \psi_0)(x) = T(u)(x) - \mu_0 \langle u, \psi_0 \rangle \psi_0(x)$$

car T est linéaire. Remarquer que l'on retranche la composante de u suivant ψ_0 pour ne regarder que le sous espace orthogonal à $\psi_0(x)$. Cela revient à définir un nouveau problème avec une nouvelle fonction de Green $G_1(x, \xi)$

$$(836) \quad G_1(x, \xi) = G(x, \xi) - \mu_0 \psi_0(x) \overline{\psi_0(x)}$$

T_1 a les mêmes propriétés que T . Nous avons donc une deuxième valeur propre :

$$(837) \quad |\mu_1| = \sup_{\|u\|=1} | \langle T_1 u, u \rangle |$$

avec une fonction propre ϕ_1 que nous pourrions renormaliser.

Quelque soit la fonction continue u , nous avons :

$$(838) \quad \langle T_1 u, \psi_0 \rangle = \langle T u, \psi_0 \rangle - \mu_0 \langle u, \psi_0 \rangle = 0$$

Donc ψ_1 est orthogonal à ψ_0 car $T_1 \psi_1 = \mu_1 \psi_1$ et T est auto-adjoint.

Aussi :

$$(839) \quad |\mu_1| = \|T \psi_1\| \leq \|T\| = |\mu_0|$$

ce qui démontre que la séquence est donc ordonnée.

D'où le théorème :

THÉORÈME 42. *L'opérateur T possède une infinité de fonctions propres orthogonales dans $\mathcal{L}(a, b)$.*

4. Fonctions orthogonales

Rappelons quelques propriétés. Soit une ensemble

$$\phi_1, \phi_2, \phi_3 \dots$$

de fonctions orthogonales dans \mathcal{L} qui peut être fini ou infini. Définissons f comme une combinaison linéaire (finie)

$$(840) \quad f = \sum_{i=1, n} \alpha_i \phi_i \quad \alpha_i \in \mathbb{C}$$

Après avoir pris le produit scalaire

$$(841) \quad \alpha_i = \frac{\langle f | \alpha_i \rangle}{\|\alpha_i\|}$$

On a donc la formule qui permet de déterminer f en fonction de sa projection sur les sous-espaces

$$(842) \quad f = \sum_{i=1, n} \langle f | \alpha_i \rangle \phi_i$$

Considérons maintenant une fonction arbitraire f dans \mathcal{L}^2 . Nous désirons trouver la ■ meilleure ■ approximation à partir d'une combinaison finie. Autrement dit, nous cherchons les α_i qui minimisent la norme

$$(843) \quad \left\| f - \sum_{i=1, n} \alpha_i \phi_i \right\|$$

Vous savez que ce minimum est obtenu pour

$$(844) \quad \alpha_i = \frac{\langle f | \alpha_i \rangle}{\|\alpha_i\|}$$

et que

$$(845) \quad \left\| f - \sum_{i=1, n} \alpha_i \phi_i \right\|^2 = \|f\|^2 - \sum_{i=1, n} \frac{|\langle f | \alpha_i \rangle|^2}{\|\alpha_i\|^2}$$

Le membre de gauche étant positif, nous avons en passant à la limite $n \rightarrow \infty$

$$(846) \quad \|f\|^2 \geq \sum_{i=1, n} \frac{|\langle f | \alpha_i \rangle|^2}{\|\alpha_i\|^2}$$

qui est connue sous le nom d'inégalité de Bessel.

DÉFINITION 33. La base est dite complète dans \mathcal{L}^2 si quelque soit f

$$(847) \quad \sum_{i=1, n} \frac{|\langle f | \alpha_i \rangle|}{\|\alpha_i\|} \phi_i \rightarrow_{\mathcal{L}^2} f$$

THÉORÈME 43. Si l'inégalité de Bessel devient une égalité quelque soit f , alors la base est complète. Dans ce cas, l'égalité est l'égalité de Parseval.

5. Les vecteurs propres de T constituent une base complète de $\mathcal{L}^2(a, b)$.

Pour toute fonction f de $\mathcal{L}^2(a, b)$, nous avons après avoir renormalisé les ψ_k

$$(848) \quad \sum_k |\langle f, \psi_k \rangle|^2 \leq \|f\|^2$$

et l'inégalité doit être transformée en égalité pour prouver que les $\{\psi_k\}_k$ forment une base complète.

Le fait que l'ensemble des vecteurs propres constitue une base complète dans \mathcal{L}^2 est démontré en deux étapes :

THÉORÈME 44. Cet ensemble constitue une base complète pour l'ensemble des fonctions continues satisfaisant aux conditions aux limites en a et b .

et

THÉORÈME 45. Toute fonction f de $\mathcal{L}^2(a, b)$ peut être approchée par une fonction g continue sur $[a, b]$ au sens de la norme

$$\|f - g\| < \epsilon$$

Nous démontrons le théorème suivant :

THÉORÈME 46. Pour toutes fonctions $C^2[a, b]$ satisfaisant aux conditions aux limites, nous avons :

$$(849) \quad f = \sum_{k \geq 0} \langle f, \psi_k \rangle \psi_k$$

Considérons la suite de fonctions de Green :

$$(850) \quad G_n(x, \xi) = G(x) - \sum_{k=0}^{n-1} \mu_k \psi_k(x) \bar{\psi}_k(\xi)$$

et la suite d'opérateurs T_n

$$(851) \quad T_n : u(x) \rightarrow \int_a^b G_n(x, \xi) d\xi$$

Nous démontrerons au paragraphe suivant que $G_n(x, \xi)$ tend vers 0. Les opérateurs T_n possède une valeur propre μ_n de norme $|\mu_n| = \|T_n\|$. G_n tendant vers la distribution nulle :

$$(852) \quad \|T_n u\| = \|T(u) - \sum_{k=0}^{n-1} \mu_k \psi_k(x) \langle u, \psi_k \rangle\|$$

tend vers 0 quelque soit la fonction u . Par conséquent

$$(853) \quad T(u) = \sum_{k=0}^{\infty} \mu_k \langle u, \psi_k \rangle \psi_k(x)$$

Considérons maintenant une fonction $f \in C^2([a, b])$ satisfaisant aux conditions aux limites. La fonction $u = Lf$ peut être développée comme en (853) et $T(u) = T(Lf) = f$.

Mais :

$$(854) \quad \mu_k \langle u, \psi_k \rangle = \langle u, \mu_k \psi_k \rangle = \langle u, T(\psi_k) \rangle = \langle T u, \psi_k \rangle$$

car T est auto-adjoint. D'où le résultat.

6. Fonctions de Green et développement sur une base propre

Considérons à nouveau le problème de Sturm-Liouville

$$(855) \quad \frac{d}{dx} \left(r(x) \frac{dy}{dx} \right) + (q(x) + \lambda p(x))y = f(x) \text{ où } x \in [a, b]$$

avec les conditions aux limites :

$$(856) \quad k_1 y(a) + k_2 y'(a) = 0$$

$$(857) \quad l_1 y(b) + l_2 y'(b) = 0$$

où $(k_1, k_2) \neq (0, 0)$ et $(l_1, l_2) \neq (0, 0)$ Ce problème possède une séquence ordonnée de valeurs propres :

$$\lambda_0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 \dots$$

avec des fonctions propres

$$(858) \quad \begin{cases} L\phi_j = \lambda_j \phi_j \\ \phi_j \text{ satisfaisant aux conditions aux limites} \end{cases}$$

qui peuvent orthonormales au sens du produit scalaire :

$$(859) \quad (\phi_i, \phi_j) = \delta_{i,j}$$

Comme cette base est complète, toute fonction peut être décomposée comme (faire l'analogie avec des coefficients de Fourier)

$$(860) \quad g(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \phi_j(x) \text{ avec } c_j = (\phi_j, g)$$

Cette série converge au sens de L^2 avec

$$(861) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b |g(x) - \sum_{j=0, N} c_j \phi_j(x)|^2 dx = 0$$

THÉORÈME 47. Nous pouvons exprimer la fonction de Green $G(x; z) = G_x(z)$ comme une série :

$$(862) \quad G(x; z) = G_x(z) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j(x) \phi_j(z)$$

où

$$(863) \quad c_j(x) = \frac{1}{\lambda_j} \phi_j(x)$$

REMARQUE 20. (1) La formule

$$(864) \quad G(x; z) = \sum_j \frac{1}{\lambda_j} \phi_j(x) \phi_j(z)$$

est clairement symétrique en x et z comme attendu.

(2) Si l'une des valeurs propres λ_j est nulle, cette expression n'a pas de sens. Il n'y a pas de fonction de Green au sens usuel dans ce cas.

(3) La solution de (855) est écrite comme

$$(865) \quad u(x) = (G_x, f) = \int_a^b \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_j} \phi_j(x) \phi_j(z) f(z) dz = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_j} \phi_j(x) (\phi_j, f)$$

et si $\lambda_j = 0$ alors nous exigeons la condition $(\phi_j, f) = 0$.

La démonstration du théorème est simple. Nous avons :

$$(866) \quad \delta_x = LG_x$$

Mais

$$(867) \quad LG_x = \sum_{j=0}^{\infty} c_j(x) (L\phi_j)(z) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j(x) \lambda_j \phi_j(z)$$

d'où (au sens des distributions) :

$$(868) \quad c_j(x) \lambda_j = (\phi_j, \delta_x) = \phi_j(x)$$

□

7. Distributions

DÉFINITION 34. Une distribution est une fonctionnelle continue sur l'espace des fonctions test noté $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Les fonctions test sont des fonctions infiniment différentiables sur \mathbb{R} et nulles en-dehors d'un intervalle $[-a, a]$, où a n'est pas précisé. Autrement dit, une distribution associe un nombre réel à toutes fonctions test.

EXEMPLE 17. Un exemple de fonction de test est :

$$(869) \quad \phi(x) = e^{-1/(a^2-x^2)} \text{ si } -a < x < a \text{ et } 0 \text{ sinon}$$

Pour une distribution f , on note généralement

$$(870) \quad f(\phi) = \langle f, \phi \rangle = \int f(x)\phi(x) dx$$

bien que l'intégrale ne soit pas une "vraie" intégrale, car f n'est pas une fonction! f est en fait l'abstraction mathématique d'une densité.

D'autre part, cette application doit être linéaire

$$(871) \quad f(a\phi + b\psi) = af(\phi) + bf(\psi)$$

pour tous nombres réels (a, b) .

EXEMPLE 18. Un premier exemple de distribution est donné par n'importe quelle fonction $f(x)$ qui peut être intégrée. L'opération

$$(872) \quad f(\phi) = \int f(x)\phi(x) dx$$

est effectivement une opération linéaire. Les distributions incluent donc toutes les fonctions intégrables, d'où le nom de fonctions généralisées.

EXEMPLE 19. La distribution Delta de Dirac notée $\delta(z)$ ou $\delta(z-x)$ (distribution centrée en $z=x$) n'est pas une fonction. Son action sur l'espace des fonctions est

$$(873) \quad \begin{aligned} \delta(\phi) &= \phi(0) = \int \delta(z)\phi(z) dz \\ \delta_x(\phi) &= \phi(x) = \int \delta(z-x)\phi(z) dz \end{aligned}$$

Il est possible de généraliser aux distributions les opérations que l'on fait d'habitude sur des fonctions :

(1) DIFFÉRENTIATION

Si f est une fonction usuelle, une intégration par parties montre que

$$(874) \quad \langle f', \phi \rangle = \int f'(x)\phi(x) dx = - \int f(x)\phi'(x) dx = - \langle f, \phi' \rangle$$

Pour une distribution, l'accroissement relatif $f'(x)$ n'a aucun sens, mais on peut définir une dérivée par

$$(875) \quad \langle f', \phi \rangle = - \langle f, \phi' \rangle$$

et

$$(876) \quad \langle f^{(n)}, \phi \rangle = (-1)^n \langle f, \phi^{(n)} \rangle$$

À titre d'exemple, considérons la distribution de Heavyside définie par

$$(877) \quad H(x) = 1 \text{ si } x > 0 \text{ et } 0 \text{ sinon}$$

$H(x)$ est une fonction usuelle, mais elle n'est pas dérivable au sens usuel. Mais sa dérivée au sens des distributions est connue

$$(878) \quad \langle H', \phi \rangle = \langle H, -\phi' \rangle = - \int_0^{+\infty} \phi'(x) dx = \phi(0)$$

car ϕ est nulle en-dehors de l'intervalle. On a donc

$$(879) \quad \frac{d}{dx} H(x) = \delta(x)$$

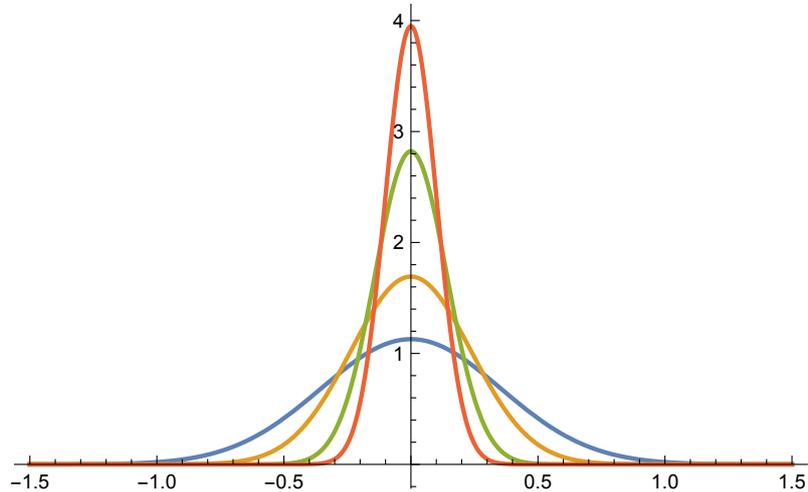


FIGURE 2 – Graphes de $G(j, x) = j/\sqrt{\pi}e^{-jx^2}$ pour $j = 2, 3, 5, 7$.

- (2) MULTIPLICATION PAR DES FONCTIONS SUFFISAMMENT RÉGULIÈRES ET AYANT UNE INVERSE :
 Soit $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction différentiable et bijective, avec $g'(x) > 0$. Nous avons en faisant le changement de variable $y = g(x)$

$$(880) \quad f \circ g, \phi = \int f(g(x))\phi(x)dx = \int f(y)\phi(g^{-1}(y))\frac{dy}{g'(g^{-1}(y))}$$

EXERCICE 41. Démontrer : $\delta(cx) = \frac{1}{c}\delta(x)$.

EXERCICE 42. Que devient la fonction $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(x - x')\delta(y - y')$ en coordonnées polaires ? Rép. $1/r'\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')$.

- (3) CONVERGENCE DES DISTRIBUTIONS :

Soit $\{f_j\}_{j \geq 0}$ une suite de distributions. Nous dirons que f_j tend vers f si et seulement si pour toutes fonctions test

$$(881) \quad \lim_{j \rightarrow \infty} (f_j, \phi) = (f, \phi)$$

Ce type de convergence est appelée convergence au sens faible.

EXERCICE 43. Soit $\psi(x)$ une fonction suffisamment régulière telle $\int \psi(x) dx = 1$. On définit la suite $\psi_j(x) = j\psi(jx)$.

(a) Démontrer $\int \psi_j(x) dx = 1$.

(b) Démontrer $\lim_{j \rightarrow \infty} \psi_j(x) = \delta(x)$ au sens faible.

- (4) TRANSFORMÉE DE FOURIER DES DISTRIBUTIONS On définit la transformée de Fourier des distributions régulières à condition de prendre des précautions.

En effet, la définition naturelle de la transformée de Fourier d'une distribution T devrait être

$$(882) \quad \forall \phi, \quad (\mathcal{F}T, \phi) = (T, \mathcal{F}(\phi))$$

Mais il y a un problème. Il existe en effet des fonctions à support borné, c'est-à-dire nulle en dehors d'un intervalle dont, dont la TF n'est pas à support borné. D'où la nécessité de réduire les contraintes imposées aux fonctions test.

On considère donc un nouvel ensemble de fonctions test : l'ensemble \mathcal{S} des fonctions indéfiniment dérivables à décroissance rapide à l'infini.

DÉFINITION 35. *Une fonction est dite à décroissance rapide si et seulement si*

$$(883) \quad \forall i, k \in \mathbb{N}^2 \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} x^k \phi^{(i)}(x) = 0$$

Ainsi e^{-x^2} fait partie de cet ensemble, alors que $1/(1+x^2)$ n'en fait pas partie. On appelle distribution tempérée toute application linéaire définie sur \mathcal{S} et à valeur dans \mathbb{C} .

8. Exercices

EXERCICE : OSCILLATEUR HARMONIQUE ET INSTANTANONS

(1) Polynôme d'Hermite et oscillateur harmonique :

On considère la suite de fonctions $\{H_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ définies par :

$$(884) \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Démontrer les propriétés suivantes :

(a) H_n est un polynôme de degré n .(b) L'ensemble $\{H_n : n \in \mathbb{N}\}$ est orthogonal dans $\mathcal{L}^2_{e^{-x^2}}(\mathbb{R})$.(c) $\|H_n\|^2 = 2^n n! \sqrt{\pi}$ (d) Démontrer pour tout $x \in \mathbb{R}$:

$$(885) \quad e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n$$

On dit que la fonction e^{2xt-t^2} est la fonction génératrice des polynômes d'Hermite.(e) En déduire : $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$, $n \in \mathbb{N}$ (f) Utilisant la fonction génératrice en différenciant par rapport à x et à t , démontrer :(i) $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$ (ii) $2xH_n(x) = 2nH_{n-1}(x) + H_{n+1}(x)$ Et en déduire que les H_n satisfont à l'équation différentielle :

$$(886) \quad u'' - 2xu' + 2nu = 0$$

(g) Nous généralisons l'équation précédente et nous étudions :

$$(887) \quad u'' - 2xu'' + 2\lambda u = 0$$

où λ un réel positif.(i) En supposant $u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^{k+r}$, Montrer l'égalité suivante :

$$(888) \quad c_{k+2} = \frac{2(k+r-\lambda)}{(k+r+2)(k+r+1)}$$

(ii) Si $r = 0$, la solution est :

$$(889) \quad u_0(x) = 1 - \frac{2\lambda}{2!} + \frac{2^2\lambda(\lambda-2)}{4!}x^4 - \dots$$

Si $r = 1$, la solution est :

$$(890) \quad u_1(x) = x - \frac{2(\lambda-1)}{3!}x^3 + \frac{2^2(\lambda-1)(\lambda-3)}{5!}x^5 - \dots$$

(h) En conclure la forme de la solution générale de l'équation d'Hermite lorsque λ est un réel. Qu'arrive-t-il si λ est un entier positif ?(i) Démontrer que $e^{-x^2}u_0(x)$ et que $e^{-x^2}u_1(x)$ tendent vers une constante quand $|x| \rightarrow \infty$ et que cette constante est nulle si et seulement si la solution est H_n . En conclure que les seules solutions de l'équation d'Hermite dans $\mathcal{L}^2_{e^{-x^2}}(\mathbb{R})$ sont les polynômes d'Hermite.(j) En mécanique quantique, l'état d'une particule est décrit par une fonction $\Psi(x, t)$ où la dépendance en temps est donné par

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Montrer que l'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel $V(x)$ peut être ramené au problème de Sturm-Liouville

$$(891) \quad \psi'' + [\lambda + r(x)]\psi = 0$$

Pour le problème de l'oscillateur harmonique $V(x) = \hbar x^2/2m$. Chercher la solution sous la forme $u(x) = e^{x^2/2}\psi(x)$. Quels sont les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique ?

(2) Instantons :

Nous considérons un double puits de potentiels à fond plat. Ce double puits permet de localiser une particule qui symbolise un atome d'azote pouvant prendre deux positions par rapport au plan défini par trois atomes d'hydrogène (molécule NH_3). Le potentiel est symétrique par rapport à $x = 0$. On supposera le potentiel $V(x)$ défini par les conditions suivantes :

$$(892) \quad \begin{aligned} V(x) &= V_0 > 0 \text{ si } x \in [-a, +a] \\ V(x) &= 0 \text{ si } |x| \in]a, b] \\ V(x) &= V_\infty \text{ si } |x| \in]b, +\infty] \end{aligned}$$

La figure indique les régions de I à IV.

- (a) Quelle est la condition que la fonction d'onde doit satisfaire en $|x| = b$ lorsque $V_\infty \rightarrow +\infty$? En déduire la fonction d'onde pour $x \in [a, b]$ en fonction de l'énergie E .
- (b) On suppose V_0 fini. Classifier les solutions possibles de l'équation de Schrödinger pour $x \in [-a, +a]$ en fonction des symétries et en déduire les deux familles solutions de l'équation de Schrödinger.
- (c) Nous exigeons que les solutions et leur première dérivée se raccordent en $|x| = a$. Ces deux conditions peuvent être simplifiées en exigeant le raccord des dérivées logarithmiques :

$$(893) \quad \frac{1}{\psi_I} \frac{d\psi_I}{dx} \Big|_a = \frac{1}{\psi_{II}} \frac{d\psi_{II}}{dx} \Big|_a$$

Quelle sont alors les deux conditions de raccordement correspondant aux deux familles de solutions trouvées dans la question précédente ?

- (d) Démontrer que ces deux conditions se résument à une seule condition lorsque $V_0 \rightarrow \infty$:

$$(894) \quad \tan \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (b-a) \right] = 0$$

et en déduire les niveaux d'énergie dans le cas $V_0 \rightarrow \infty$.

- (e) Nous considérons le cas V_0 grand mais fini. On peut alors supposer le fondamental proche de la valeur du cas dégénérée :

$$(895) \quad E = E_0 + \delta E \text{ avec } E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(b-a)^2}$$

où $|\delta E| \ll E_0$. En se limitant au premier terme des développements de Taylor, démontrer que la condition de raccordement sur la dérivée logarithmique se ramène à :

$$(896) \quad \delta E = \begin{cases} -\frac{2E_0 \hbar}{(b-a)\sqrt{2mV_0}} \coth \left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right] & \text{pour le cas pair} \\ -\frac{2E_0 \hbar}{(b-a)\sqrt{2mV_0}} \tanh \left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \right] & \text{pour le cas impair} \end{cases}$$

- (f) En déduire que la condition V_0 fini lève la dégénérescence entre le cas pair et le cas impair avec

$$(897) \quad E_- - E_+ = \frac{4E_0 \hbar}{(b-a)\sqrt{2mV_0}} e^{-2a/\hbar\sqrt{2mV_0}}$$

- (g) Nous désirons interpréter ce résultat. Tracer la probabilité associée à la fonction d'onde lorsque la particule est dans son état fondamental d'énergie E_+ . Une particule classique peut-elle être localisée dans les régions II et III ? Une particule quantique peut-elle osciller entre les deux minima du puits de potentiel ?

(1) **Oscillateur paramétrique**

Il sera utile de consulter cette adresse : <https://www.sagemath.org/fr/> (et de savoir se balancer au jardin public). Nous considérons une balançoire. Une balançoire est un pendule dont la longueur $l(t)$ varie de façon périodique au cours du temps sous l'action des bras. L'expérience montre que le pendule oscille. Pourquoi ? Nous démontrons ici le théorème suivant :

THÉORÈME 48. *On ne peut faire balancer une balançoire par action périodique des bras que si la période de variation de la longueur au point d'attache est un nombre entier de demi-périodes des oscillations propres du pendule.*

Pour une balançoire, l'action des bras revient à faire varier la gravité de façon périodique en fonction du temps, car tout est dans le rapport g/l . L'équation du mouvement d'un pendule dans un champ de gravité qui varie au cours du temps est du type :

$$(898) \quad m\ddot{\theta} = -\frac{g(t)}{l}\theta$$

Lorsque $g(t)/l = \omega^2(1 + \epsilon \cos t)$, l'équation différentielle porte le nom d'équation de Mathieu.

Dans ce problème, nous étudierons le problème plus simple (de période 2π) :

$$(899) \quad \begin{aligned} \ddot{\theta} &= -(\omega_0 + \epsilon)^2\theta & 0 < t \leq \pi \\ \ddot{\theta} &= -(\omega_0 - \epsilon)^2\theta & \pi < t \leq 2\pi \end{aligned}$$

Nous appellerons période $T = 2\pi/\omega_0$ la période propre du pendule. Le paramètre ϵ joue le rôle de l'action des bras. Le but du problème est de déterminer le diagramme de stabilité du pendule dans le plan (ϵ, ω) .

- (a) L'énergie peut-elle être une quantité conservée ?
 (b) Poser $\omega_{\pm} = \omega_0 \pm \epsilon$. Montrer qu'il existe une matrice (que l'on exprimera sous la forme d'un produit) $A = A_+ A_-$ telles que :

$$(900) \quad \begin{pmatrix} \theta(2\pi) \\ \dot{\theta}(2\pi) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \theta(0) \\ \dot{\theta}(0) \end{pmatrix}$$

Pour répondre à cette question, il suffira d'exprimer $(\theta(\pi), \dot{\theta}(\pi))$ en fonction de $(\theta(0), \dot{\theta}(0))$

- (c) On peut donc relier l'évolution de $(\theta(2n\pi), \dot{\theta}(2n\pi))$ aux propriétés de la matrice A . Quelle est la condition sur A pour que la solution d'équilibre au repos $(0, 0)$ soit instable (une solution d'équilibre est dite stable au sens de Lyapounov si la solution reste au voisinage de la solution d'équilibre même après une très légère perturbation des conditions initiales) ?
 (d) Pourquoi avons-nous $\|A\| = 1$?
 (e) En déduire une condition sur la trace de la matrice A pour avoir des solutions instables.
 (f) Montrer que cette condition impose une frontière sur les paramètres équivalente à l'égalité

$$(901) \quad \left| 2 \cos \pi\omega_+ \cos \pi\omega_- - \left(\frac{\omega_+}{\omega_-} + \frac{\omega_-}{\omega_+} \right) \sin \pi\omega_+ \sin \pi\omega_- \right| = 2$$

- (g) Pour $\epsilon = 0$, quelles sont les valeurs de ω_0 qui satisfont à cette condition ?
 (h) Faire le développement limité de (901) en supposant $\epsilon \ll 1$ (à l'ordre 2 ou 4 !) et en déduire comment varient les valeurs propres de A en fonction de ϵ lorsque ω_0 est un demi-entier ou n'est pas un demi-entier ?
 (i) Tracer dans le plan (ω_0, ϵ) les zones d'instabilité.
 (j) Reprendre le problème général où le rapport $g(t)/l$ est périodique. Supposons le pendule soumis à un choc pendant une durée τ très courte. Durant le choc, puisque τ est petit, l'angle θ ne varie pas. Quel est le transfert de quantité de mouvement durant le choc en fonction de l'intégrale prise sur la durée du choc τ

$$(902) \quad \int_{\tau} \frac{g(t)}{l} dt ?$$

Conclure sur l'opportunité de tirer sur les bras lorsque la balançoire passe par son angle maximal ou par sa position d'équilibre.

- (k) Cette question est facultative. Nous venons de voir que le forçage périodique d'un pendule pouvait rendre instable sa position d'équilibre initialement stable. Nous allons maintenant montrer que le pendule renversé peut devenir stable si son point d'attache oscille rapidement. Soit 2τ la période du point d'attache. On montre que la linéarisation des équations du mouvement au voisinage de la position d'équilibre instable conduit à envisager le système suivant :

$$(903) \quad \begin{aligned} \ddot{\theta} &= +(\omega_0^2 + d^2)\theta & 0 < t \leq \pi \\ \ddot{\theta} &= +(\omega_0^2 - d^2)\theta & \pi < t \leq 2\pi \end{aligned}$$

où d est aussi grand que désiré si le point d'attache oscille très rapidement. Poser $k^2 = d^2 + \omega_0^2$ et $\Omega^2 = d^2 - \omega_0^2$. Montrer que la condition de STABILITÉ $|Tr A| < 2$ devient

$$(904) \quad \left| 2 \cosh k\tau \cos \Omega\tau + \left(\frac{k}{\Omega} - \frac{\Omega}{k} \right) \sinh k\tau \sin \Omega\tau \right| < 2$$

- (l) Faire le développement limité et conclure par une simulation numérique si vous avez le temps.

(2) **Théorème de Bloch - Bandes d'énergie**

On considère l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel périodique $V(x)$ de période l , $V(x+l) = V(x)$. Nous avons :

THÉORÈME 49. *Pour un Hamiltonien périodique,*

$$(905) \quad H = \frac{P^2}{2m} + V(x) \quad P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

toute fonction (état) propre $\varphi(x)$ peut être mise sous la forme d'une onde plane modulée en amplitude par une fonction $u(x)$ possédant la symétrie du réseau

$$(906) \quad \varphi(x) = e^{-iqx} u(x) \quad u(x+l) = u(x)$$

D'après le théorème de Wigner, il existe un opérateur unitaire T_l agissant dans l'espace des états (à savoir l'espace des fonctions d'onde $\varphi(x) \in L_x^2(\mathbb{R})$) tel que

$$(907) \quad (T_l \varphi)(x) = \varphi(x-l) \quad T_l^\dagger = T_l^{-1}$$

avec $(T_l^\dagger)_{nm} = (T_l)_{mn}^*$.

- (a) Démontrer que les valeurs propres de T_l peuvent être écrites sous la forme e^{iql} où le paramètre q n'est défini qu'à un multiple entier près de $2\pi/l$.
- (b) H et T_l commutent-ils? Conclure.
- (c) Quelle est alors l'équation différentielle à laquelle satisfait $u(x)$ en supposant $\varphi(x)$ état propre associé à la valeur propre E_q ?
- (d) Nous désirons calculer les niveaux d'énergie. Pour se simplifier la vie, on prend un peigne de Dirac (g est une constante supposée positive, $g > 0$)

$$(908) \quad V(x) = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \frac{\hbar^2 g}{2m} \delta(x - pl)$$

Quelle est la condition sur les dérivée de $\varphi(x)$ au voisinage d'une dent du peigne (on a vu ça ...)

- (e) En déduire

$$(909) \quad \cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k} \sin kl$$

où on a posé

$$(910) \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

- (f) En traçant la fonction $f(y) = \cos y + \frac{gl}{2y} \sin y$, montrer qu'il existe des intervalles de E qui sont interdits (bandes interdites).
- (g) Pouvez-vous tracer qualitativement les variations $E(q)$?

Bibliographie

- [1] Roger Bach, Damian Pope, Sy-Hwang Liou, and Herman Batelaan. Controlled double-slit electron diffraction. *New Journal of Physics*, 15(3) :033018, 2013.
- [2] Nicolas Gisin, Grégoire Ribordy, Wolfgang Tittel, and Hugo Zbinden. Quantum cryptography. *Rev. Mod. Phys.*, 74 :145–195, Mar 2002.
- [3] M.A. Al-Gwaiz. *Sturm-Liouville Theory and its Applications*. Springer, 2008.