

N° d'ordre :

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ DE BOUIRA
FACULTÉ DES SCIENCES ET DES SCIENCES
APPLIQUÉES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



MÉMOIRE PRÉSENTÉ POUR L'OBTENTION DU DIPLÔME
DE MASTER PHYSIQUE

OPTION :

Physique Théorique des Hautes Énergies

THÈME :

Formalisme de Hamilton-Jacobi en mécanique quantique

PAR :

Mouffok Samah

Boudrouaz Saadi

Devant le jury :

Président :	Sadoun Med. Améziane	MCB	U.A.M.O. de Bouira
Rapporteur :	Boukhalfa Soufiane	MAA	U.A.M.O. de Bouira
Examineur 1 :	Zamoum Redouane	MCB	U.A.M.O. de Bouira
Examineur 2 :	Bachi Halima	MAA	U.A.M.O. de Bouira

Remerciements

Nous tenons, tout d'abord, à remercier Dieu le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.

En second lieu, nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à Monsieur S. Boukhalfa qui a assuré la direction de ce présent travail.

Nos remerciements s'adressent également à Monsieur M. A. Sadoun qui nous a honoré en acceptant de présider le jury du présent mémoire.

Nos remerciements s'adressent également à Madame H. Bachi et à Monsieur R. Zamoum pour l'intérêt qu'ils ont manifesté et porté à ce travail en acceptant de prendre part au jury du présent mémoire.

Nos vifs remerciements vont également à tous les enseignants qui, par leurs enseignements, leurs encouragements et leurs aides, ont contribué à notre formation durant toutes nos études du primaire à l'université. Qu'ils trouvent ici toute notre gratitude.

Nos vifs remerciements vont également à nos familles et amis qui, par leurs prières et leurs encouragements, nous ont aidé à surmonter tous les obstacles durant les années d'études.

Nous tenons, enfin, à remercier tous ceux qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce travail.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à mes parents pour leur soutien infailible durant toutes mes années d'études.

Je le dédie également à mes frères *Latif* et *Mourad* et à mes sœurs *Amel* et *Samia*, à toute ma grande famille, à ma chère *Souad*, et à tous mes amis.

— Samah Mouffak

Je dédie ce modeste travail, en premier lieu, à mes chers parents qui m'ont donné le courage pendant toute ma vie et pour leur sacrifice sans limite.

Je le dédie également à mes frères et sœurs, à toute ma famille, ainsi qu'à tous mes amis.

— Saadi Boudrouaz

Table des matières

Remerciements	i
Dédicaces	ii
Table des matières	iii
Table des figures	v
Introduction	1
1 — Formalisme de Hamilton-Jacobi classique	5
1.1 Hamiltonien et équations canoniques de Hamilton	5
1.2 Espace des phases, crochets de Poisson et intégrales premières	7
1.3 Principe variationnel de Hamilton	8
1.4 Transformations canoniques et fonctions génératrices	10
1.5 Méthode de Hamilton-Jacobi	13
1.5.1 Équation de Hamilton-Jacobi	14
1.5.2 Méthode de séparation des variables	14
1.6 Variables canoniques angles-actions	16
1.6.1 Cas d'un système à un seul degré de liberté	17
1.6.2 Cas d'un système à plusieurs degrés de liberté	19
2 — Transition de la mécanique classique à la mécanique quantique	21
2.1 Ancienne théorie des quantas	21
2.2 Théorie quantique de l'atome	22
2.2.1 Mécanique quantique matricielle	23
2.2.2 Mécanique quantique ondulatoire	24
2.3 Relations d'incertitude de Heisenberg	25
2.4 Théorème d'Ehrenfest et lien avec la mécanique analytique	27

2.5	Principe de correspondance	28
2.6	Théorème des noeuds : cas d'un oscillateur harmonique	29
3	Formalisme de Hamilton-Jacobi quantique	33
3.1	Fonction moment quantique	33
3.2	Condition aux limites ou principe de correspondance	34
3.3	Singularités de la fonction $p(x, E)$	35
3.4	Variable action quantique et règle de quantification exacte	36
3.5	Applications simples du formalisme	38
3.5.1	Cas d'un oscillateur harmonique	38
3.5.2	Cas de l'atome d'hydrogène	41
	Conclusion	50
A	Transformation de Legendre	52
B	Polynômes de Hermite et de Laguerre	54
C	Théorèmes de Liouville et de Sturm-Liouville	56
	Bibliographie	57

Table des figures

2.1	Forme des amplitudes de probabilité correspondant aux premiers niveaux de l'oscillateur harmonique.	32
3.1	Contour renfermant les singularités mobiles de la fonction $p(x, E)$ dans le plan complexe x	36
3.2	Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'oscillateur harmonique dans le plan complexe x	39
3.3	Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'oscillateur harmonique dans le plan complexe $y = 1/x$	40
3.4	Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'atome d'hydrogène dans le plan complexe r	42
3.5	Coupure reliant les deux points tournants r_1 et r_2 séparant les deux branches de la fonction p_c dans le plan complexe r	44
3.6	Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'atome d'hydrogène dans le plan complexe $t = 1/r$	45

Introduction

Il est bien connu qu'ils existent plusieurs formulations de la mécanique classique : la formulation lagrangienne, la formulation hamiltonienne, la formulation en crochets de Poisson et la formulation de Hamilton-Jacobi [1, 2]. Parmi celles-ci, les deux premières sont les plus importantes. Le formalisme de Hamilton-Jacobi, quant à lui, est une approche alternative qui n'est pas largement utilisée et qui est plus ésotérique. Bien que toutes ces différentes approches fournissent les mêmes solutions à un problème donné d'une manière indépendante, il faut reconnaître que chacune d'elles apporte une idée et un contexte différents sur la physique du problème. En effet, aborder un problème particulier pourrait paraître facile, voir même intuitif, dans un formalisme par rapport à l'autre. Par conséquent, selon le problème, il faut choisir une méthode dans laquelle ce dernier peut être résolu aisément. À l'instar de la mécanique classique, il existe diverses formulations de la mécanique quantique [3]-[10]. Parmi celles-ci, certaines ont été développées indépendamment et d'autres ont pris leur origine dans la mécanique classique. Le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique, qui fait l'objet de ce présent mémoire, fait partie de la deuxième catégorie. Il a été proposé, dans sa forme actuelle et pour la première fois, par Leacock et Padgett [11]-[14] en partant de son homologue classique pour étudier les états stationnaires.

En mécanique classique, le formalisme de Hamilton-Jacobi s'avère être un outil très puissant quant à l'étude des systèmes dynamiques décrivant un mouvement périodique ou pseudo-périodique dans l'espace des phases. En effet, par l'introduction des variables canoniques angles-actions, il permet d'accéder directement aux fréquences d'oscillations sans avoir à résoudre complètement les équations du mouvement. De même, dans sa version quantique, le formalisme de Hamilton-Jacobi permet l'obtention des spectres d'énergies exactes d'un système quantique sans passer par la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire. Cependant, contrairement à la mécanique ondulatoire conventionnelle où

l'on doit résoudre l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde, dans le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique on cherche à résoudre plutôt une équation différentielle de premier ordre pour la fonction moment quantique dite de Hamilton-Jacobi quantique, et qui prend la forme d'une équation de Riccati [15]. Ainsi, dans ce présent formalisme, l'entité centrale est plutôt la fonction moment quantique, l'analogue quantique de la fonction moment classique, qui est une fonction complexe de la position ayant une structure singulière et dont l'étude, permet l'obtention de l'ensemble des valeurs et des fonctions propres associées aux états liés d'une manière simple et élégante.

Comme on l'a déjà mentionné ci-dessus, la puissance du formalisme de Hamilton-Jacobi classique réside dans le fait qu'on peut obtenir les fréquences d'un système périodique directement à partir des variables canoniques angles-actions. De manière analogue, le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique nous permet d'accéder au spectre d'énergie des états stationnaires directement à partir de l'intégrale de la variable action quantique. En effet, l'évaluation de cette dernière, prise le long d'un contour fermé, en utilisant le théorème des résidus de Cauchy aboutit à une règle de quantification exacte sur la variable action quantique. Cette règle de quantification est exacte car elle résulte directement du théorème d'oscillation de Sturm-Liouville qui stipule que pour les états liés, l' n ème état excité est décrit par une fonction d'onde qui a exactement n zéros. Ces n zéros de la fonction d'onde correspondent aux n pôles de la fonction moment quantique appelés pôles mobiles, car ils dépendent de l'énergie et des conditions initiales. Par ailleurs, pour obtenir l'ensemble des valeurs propres de l'hamiltonien du système, il faut connaître l'emplacement des autres singularités de la fonction moment quantique qui proviennent du potentiel appelées singularités fixes, car leurs emplacements sont indépendants de l'énergie et apparaissent dans toutes les solutions de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique. Cependant, en raison de la nature quadratique de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique, tous les résidus associés aux singularités fixes auront deux valeurs. Par conséquent, il faut établir une condition aux limites pour sélectionner parmi celles-ci une solution physiquement acceptable et qui vient compléter la définition de la fonction moment quantique en terme de son homologue classique définie au préalable. D'autre part, on peut aboutir au même résultat en faisant appel à une autre méthode, due à Kapoor et ses collaborateurs [16]-[19], qui se base encore sur le formalisme de Hamilton-Jacobi et les mêmes

ingrédients mathématiques, à savoir, le calcul des résidus associés aux singularités de la fonction moment quantique. L'avantage de cette nouvelle méthode est qu'elle permet, en plus de calculer les énergies propres, de déduire aussi les fonctions propres pour les états liés.

Ce présent mémoire est organisé de la façon suivante : le premier chapitre sera dédié au rappel des différentes formulations de la mécanique classique. L'accent sera mis sur le formalisme de Hamilton-Jacobi et les différentes techniques qui en découlent. En particulier, on introduira la technique des variables angles-actions qui permet, dans le cas des systèmes dynamiques décrivant un mouvement périodique ou pseudo-périodique, d'accéder directement aux fréquences d'oscillation ou de rotation, sans passer par la résolution complète des équations du mouvement. Cette dernière fournit la première approche théorique pour une étude quantitative de l'atome en postulant que les variables actions ne peuvent prendre que des valeurs quantifiées.

Le deuxième chapitre sera consacré à l'introduction des différentes approches quantitatives de l'atome à commencer par l'ancienne théorie des quantas, où l'action sera mis sur le caractère heuristique des règles de quantification introduites par Bohr et sur les limites et les lacunes du modèle de Bohr-Sommerfeld de l'atome ; puis on introduira les deux formulations modernes de la mécanique décrivant la matière au niveau microscopique, à savoir la mécanique matricielle de Heisenberg et la mécanique ondulatoire de Schrödinger, en mettant en revue les différents concepts de base inhérents à celles-ci comme : la dualité onde-corpuscule, les relations d'incertitude de Heisenberg, le théorème d'Ehrenfest, le principe de correspondance, etc. On terminera le chapitre par une application directe de la nouvelle mécanique à l'étude quantitative des vibrations d'un système physique piégé dans un potentiel harmonique. L'accent sera mis en particulier sur le théorème des nœuds qui sera, par la suite, utilisé pour établir une règle de quantification exacte pour les états liés dans le cadre du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique.

Le troisième et dernier chapitre de ce mémoire sera dédié à l'étude des caractéristiques des états liés (énergies et fonctions propres) d'un système quantique à une dimension par l'intermédiaire du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique. Le point de départ sera l'introduction de la fonction moment quantique, l'analogue quantique de l'impulsion classique, dont l'évolution et la dynamique est décrite par une équation différentielle de type

Riccati déduite de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique. On s'intéressera en particulier au caractère singulier de la fonction moment quantique en faisant une connexion, d'une part, entre celle-ci et la fonction d'onde de Schrödinger et, d'autre part, en la reliant directement à la variable action quantique en prenant son intégrale sur un contour renfermant tous les pôles mobiles de la fonction. L'évaluation de cette intégrale dans le plan complexe, par le biais du théorème des résidus de Cauchy, conduira à une règle de quantification exacte sur la variable action quantique. Le calcul des résidus associés aux autres singularités de la fonction moment quantique permettra d'accéder, par la suite, aux énergies propres des états liés d'un système quantique à une dimension. Cependant, en raison de la nature quadratique de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique, tous les résidus associés aux singularités fixes auront deux valeurs. Afin d'enlever cette ambiguïté et de choisir une solution physiquement acceptable, on imposera une condition aux limites sur la fonction moment quantique en terme de son homologue classique. On terminera le chapitre par une application directe du formalisme à deux systèmes quantiques simples, à savoir l'oscillateur harmonique et l'atome d'hydrogène. On démontrera, cependant, dans le cas de l'atome d'hydrogène, que la structure singulière de la fonction moment quantique, qui a permis jusqu'ici d'obtenir les énergies propres des états liés, peut être utilisée pour accéder à la fois aux énergies propres et aux fonctions propres correspondantes.

Le mémoire se terminera par une conclusion, où on présentera un récapitulatif des différentes approches (classiques ou quantiques) introduites dans les différents chapitres et quelques perspectives, ainsi que de quelques compléments servant d'annexes pour le présent manuscrit.

1

Formalisme de Hamilton-Jacobi classique

1.1 Hamiltonien et équations canoniques de Hamilton

Dans la formulation de Lagrange, un système mécanique peut être décrit de manière complète par la donnée à chaque instant d'un ensemble de f grandeurs indépendantes q_i appelées coordonnées généralisées, et leurs dérivées par rapport au temps \dot{q}_i appelées vitesses généralisées. Le nombre f de grandeurs indépendantes qu'il faut se donner pour déterminer de manière univoque la position d'un système est appelé le nombre de degrés de liberté du système. Par ailleurs, il est possible de développer une autre formulation de la mécanique en prenant comme couple de variables indépendantes : les f coordonnées généralisées q_i et leurs moments associés p_i définis par

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.1)$$

où $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ est la fonction de Lagrange ou le lagrangien du système. On peut passer de la fonction de Lagrange, dépendante des coordonnées et des vitesses généralisées, à une nouvelle fonction $H(q_i, p_i, t)$, dépendante des coordonnées et des moments généralisées, à l'aide de la transformation de Legendre [voir appendice A] comme suit

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (1.2)$$

où la quantité $H(q_i, p_i, t)$ est appelée la fonction de Hamilton ou l'hamiltonien du système. La différentielle totale de cette dernière, fonction des coordonnées, des moments et du

temps, est donnée par

$$dH = \sum_{i=1}^f \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^f \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (1.3)$$

D'autre part, à partir de la définition (1.2) et en utilisant (1.1), la différentielle de H peut se mettre sous cette forme

$$\begin{aligned} dH &= \sum_{i=1}^f \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^f p_i d\dot{q}_i - dL \\ &= \sum_{i=1}^f \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^f p_i d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^f \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (1.4)$$

En comparant les expressions (1.3) et (1.4), on obtient

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = - \frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t} \quad (1.5)$$

Dans le cas d'un système conservatif, la fonction de Hamilton est indépendante du temps et la trajectoire physique obéit aux équations d'Euler-Lagrange, i.e.,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \iff \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (1.6)$$

Ce qui conduit, à partir de (1.5), aux $2f$ équations différentielles du premier ordre suivantes :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.7)$$

Ce sont les équations du mouvement pour les fonctions inconnues $q_i(t)$ et $p_i(t)$, et qui remplacent les f équations du second ordre obtenues par la méthode de Lagrange. Ces équations constituent les équations de Hamilton. Elles sont de premier ordre en q_i et p_i et, à cause de leur simplicité formelle et leur apparence symétrique (au signe près), elles sont aussi connues sous le nom d'équations canoniques du mouvement.

1.2 Espace des phases, crochets de Poisson et intégrales premières

Pour un système à f degrés de liberté, l'espace des phases, noté $\Gamma \equiv \mathbb{R}^{2f}$, est défini comme l'espace à $2f$ dimensions qui est donné par l'ensemble des points (q_i, p_i) . Considérons deux grandeurs physiques g et h définies sur l'espace des phases. Par définition, le crochet de Poisson de g et h est la quantité

$$\{g, h\} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial h}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right) \quad (1.8)$$

On peut montrer aisément que ce dernier possède les propriétés algébriques suivantes :

$$\{g_1, g_2\} = -\{g_2, g_1\} \quad (1.9a)$$

$$\{ag_1 + bg_2, g_3\} = a\{g_1, g_3\} + b\{g_2, g_3\} \quad (1.9b)$$

$$\{g_1 g_2, g_3\} = g_1 \{g_2, g_3\} + \{g_1, g_3\} g_2 \quad (1.9c)$$

$$\{\{g_1, g_2\}, g_3\} + \{\{g_3, g_1\}, g_2\} + \{\{g_2, g_3\}, g_1\} = 0 \quad (1.9d)$$

où g_k ($k = 1, 2, 3$) sont des fonctions quelconques des variables canoniques possédant au moins des dérivées secondes continues. La première propriété exprime l'antisymétrie du crochet de Poisson, la deuxième sa linéarité (où a et b sont des constantes), et la dernière propriété est l'identité de Jacobi qui exprime la cyclicité des crochets de Poisson. Le crochet de Poisson vérifie aussi le théorème de Poisson qui stipule que le crochet de Poisson de deux invariants est lui même un invariant.

Considérons maintenant une grandeur dynamique $F(q, p, t)$ quelconque définie sur l'espace des phases à $2f$ dimensions. Sa dérivée totale par rapport au temps est donnée par

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (1.10)$$

Les équations de Hamilton (1.7) permettent d'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.11)$$

avec la notation conventionnelle définissant le crochet de Poisson de F et H :

$$\{F, H\} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) \quad (1.12)$$

L'équation (1.11) décrit l'évolution temporelle de la grandeur F . Noter que cette évolution est régie par l'hamiltonien qui est associé à l'énergie totale du système. Si la grandeur F ne dépend pas explicitement du temps et son crochet de poisson avec l'hamiltonien est nul, alors F est une intégrale première.

Les équations de Hamilton (1.7) peuvent se réécrire, de manière symétrique, en terme de crochet de poisson de la sorte

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}, \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.13)$$

Supposons, à présent, que nous choissions, dans la définition (1.8), les fonctions g et h parmi les $2f$ variables canoniques q_i et p_i elles-mêmes. Il est aisé alors de déduire les valeurs des divers crochets de Poisson correspondants :

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (1.14)$$

où le symbole δ_{ij} est le delta de Kronecker. Noter que tout ensemble de variables dynamiques vérifiant les relations précédentes est dit ensemble de variables canoniques conjuguées. Cette formulation est particulièrement utile pour réaliser la transition entre la mécanique classique et la mécanique quantique via le principe de correspondance, qui consiste à remplacer le crochet de Poisson entre les variables canoniques par un commutateur entre leurs opérateurs quantiques correspondants définis de manière appropriée.

1.3 Principe variationnel de Hamilton

Le mouvement d'un système mécanique est complètement déterminé par le principe de moindre action : en résolvant les équations du mouvement qui découlent de ce principe, on peut trouver aussi bien la forme de la trajectoire que la relation entre une position sur cette trajectoire et le temps correspondant. Ce principe fondamental stipule que l'action d'un système mécanique est stationnaire le long d'une trajectoire effective entre les

instants initial et final. Autrement dit, du point de vue mathématique, si on effectue une variation infinitésimale de la trajectoire réelle, caractérisée par des variations indépendantes $\delta q_i(t)$ et $\delta p_i(t)$, tout en maintenant les points initial et final fixes dans l'espace des phases, alors la variation correspondante de l'action s'annule au premier ordre. Ce principe peut être exprimé également dans la formulation de Hamilton et permet de déduire les équations canoniques du mouvement. En effet, en exprimant le lagrangien en fonction de l'hamiltonien, l'action du système peut être mise cette forme

$$S[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t) \right\} \quad (1.15)$$

D'après le principe de moindre action, la variation de cette dernière pour des valeurs initiales et finales des coordonnées et du temps données est nulle. Calculons d'abord la variation de celle-ci pour une variation infinitésimale des chemins dans l'espace des phases $q_i + \delta q_i$ et $p_i + \delta p_i$:

$$\begin{aligned} \delta S &= S[q + \delta q, p + \delta p] - S[q, p] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^f p_i \delta \dot{q}_i + \sum_{i=1}^f \dot{q}_i \delta p_i - \delta H(q_i, p_i, t) \right\} \\ &= \sum_{i=1}^f \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ p_i \delta \dot{q}_i + \dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right\} \end{aligned} \quad (1.16)$$

ou encore, en intégrant le premier terme par partie,

$$\begin{aligned} \delta S &= \sum_{i=1}^f \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ -\dot{p}_i \delta q_i + \dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right\} + \underbrace{\sum_{i=1}^f p_i \delta q_i \Big|_{t_1}^{t_2}}_{=0} \\ &= \sum_{i=1}^f \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \left(-\dot{p}_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i + \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i \right\} \end{aligned} \quad (1.17)$$

Comme les accroissements infinitésimaux δq_i et δp_i sont arbitraires et linéairement indépendants, alors la variation de l'action est nulle si les coefficients sous l'intégrale sont également nuls, ce qui nous mène aux $2f$ équations canoniques de Hamilton :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.18)$$

1.4 Transformations canoniques et fonctions génératrices

Dans le formalisme de Lagrange, l'évolution temporelle d'un système mécanique décrit une trajectoire dans l'espace des configuration $q(t)$ et les seules transformations de coordonnées possibles sont les transformations ponctuelles du type $Q = Q(q, t)$, où $q = \{q_1, q_2, \dots, q_f\}$ et $Q = \{Q_1, Q_2, \dots, Q_f\}$ désignent les anciennes et les nouvelles coordonnées généralisées. Cependant, dans la formulation hamiltonienne de la mécanique, son évolution décrit une trajectoire dans l'espace des phases $\mathbf{x}(t) = (q(t), p(t))$, où $q = \{q_1, q_2, \dots, q_f\}$ et $p = \{p_1, p_2, \dots, p_f\}$ désignent les coordonnées et les moments généralisés respectivement. Dans ce cas, le concept de transformation de coordonnées a un sens plus large dans la mesure où celle-ci correspond à une transformation simultanée des coordonnées et des moments généralisés comme suit

$$Q_i = Q_i(q_i, p_i, t), \quad P_i = P_i(q_i, p_i, t), \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.19)$$

Une telle transformation est dite canonique si elle préserve la structure canonique des équations du mouvement. Autrement dit, il s'agit d'une transformation telle qu'il existe une nouvelle fonction de Hamilton H' , fonction des nouvelles coordonnées Q_i et des nouveaux moments P_i , vérifiant les équations suivantes :

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial H'}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial H'}{\partial Q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.20)$$

D'après le principe variationnel de Hamilton, l'action est stationnaire le long de la trajectoire effective. Autrement dit,

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t) \right\} = 0 \quad (1.21)$$

Il en va de même lorsque le système est décrit cette fois-ci par les nouvelles variables canoniques (Q_i, P_i) et le nouveau hamiltonien H' . Cela signifie que la variation de l'action est nulle, indépendamment du système de coordonnées canoniques utilisé. On aura alors

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \sum_{i=1}^f P_i \dot{Q}_i - H'(Q_i, P_i, t) \right\} = 0 \quad (1.22)$$

Comme il s'agit de la même trajectoire physique, alors les deux écritures du principe variationnel sont valables. Cela ne veut pas nécessairement dire que les intégrands de ces deux intégrales soient identiques, mais diffèrent d'un terme additionnel contenant, au plus, la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction arbitraire comme suit

$$\sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H(q_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^f P_i \dot{Q}_i - H'(Q_i, P_i, t) + \frac{dG}{dt} \quad (1.23)$$

Noter que le terme additionnel ne contribue à la variation de l'action qu'aux extrémités de l'intervalle temporelle où la variation de G est identiquement nulle. La fonction G permet de faire le lien entre les nouvelles et les anciennes variables en établissant les équations explicites la transformation canonique (1.19), d'où le nom de fonction génératrice ou de générateur de la transformation canonique. Par conséquent, la fonction génératrice doit nécessairement dépendre de f anciennes variables canoniques, de f nouvelles variables canoniques et éventuellement du temps. Il existe, en fait, quatre choix de fonctions génératrices correspondant aux quatre manières de choisir sa dépendance en $2f$ variables canoniques indépendantes parmi les $2f$ anciennes variables (q_i, p_i) et les $2f$ nouvelles variables (Q_i, P_i) .

Le premier choix possible pour la fonction G est obtenu en réécrivant l'équation (1.23) sous cette forme

$$dG_1 = \sum_{i=1}^f p_i dq_i - \sum_{i=1}^f P_i dQ_i + (H'(Q_i, P_i, t) - H(q_i, p_i, t)) dt \quad (1.24)$$

Cette écriture suggère que la fonction génératrice G_1 , qui est dite de première espèce, dépend des anciennes coordonnées q_i , des nouvelles coordonnées Q_i et du temps, i.e. $G_1 = G_1(q_i, Q_i, t)$. Dans ce cas, sa différentielle totale est donnée par

$$dG_1 = \sum_{i=1}^f \frac{\partial G_1}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^f \frac{\partial G_1}{\partial Q_i} dQ_i + \frac{\partial G_1}{\partial t} dt \quad (1.25)$$

En comparant les équations (1.24) et (1.25), on obtient les relations que doit satisfaire une fonction génératrice de type 1 :

$$p_i = \frac{\partial G_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial G_1}{\partial Q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.26a)$$

$$H' = H + \frac{\partial G_1}{\partial t} \quad (1.26b)$$

Un autre choix possible pour la fonction génératrice est une fonction des anciennes coordonnées et des nouveaux moments $G_2(q_i, P_i, t)$, dite de deuxième espèce, obtenue à l'aide de la transformation de Lagrange qui suit

$$G_2 = \sum_{i=1}^f Q_i P_i + G_1, \quad (1.27)$$

et dont la différentielle totale, en utilisant (1.24), est donnée par

$$dG_2 = \sum_{i=1}^f p_i dq_i + \sum_{i=1}^f Q_i dP_i + (H'(Q_i, P_i, t) - H(q_i, p_i, t)) dt \quad (1.28)$$

Par ailleurs, si $G_2 = G_2(q_i, P_i, t)$ alors sa différentielle totale s'écrit

$$dG_2 = \sum_{i=1}^f \frac{\partial G_2}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^f \frac{\partial G_2}{\partial P_i} dP_i + \frac{\partial G_2}{\partial t} dt \quad (1.29)$$

En comparant cette dernière expression avec (1.28), et en identifiant les termes proportionnels respectivement à dq_i , dP_i et dt , dans les deux membres, on obtient les relations que doit satisfaire une fonction génératrice de type 2 :

$$p_i = \frac{\partial G_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial G_2}{\partial P_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.30a)$$

$$H' = H + \frac{\partial G_2}{\partial t} \quad (1.30b)$$

De la même manière, on retrouve les relations auxquelles obéissent une fonction génératrice de troisième espèce G_3 , fonction des anciens moments et des nouvelles coordonnées,

$$q_i = -\frac{\partial G_3}{\partial p_i}, \quad P_i = -\frac{\partial G_3}{\partial Q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.31a)$$

$$H' = H + \frac{\partial G_3}{\partial t} \quad (1.31b)$$

et celles auxquelles obéissent une fonction génératrice de quatrième espèce G_4 , fonction des anciens et des nouveaux moments,

$$q_i = -\frac{\partial G_4}{\partial p_i}, \quad Q_i = \frac{\partial G_4}{\partial P_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.32a)$$

$$H' = H + \frac{\partial G_4}{\partial t} \quad (1.32b)$$

Les relations (1.26a), (1.30a), (1.31a) et (1.32a) sont constituées chacune de $2f$ équations reliant les variables dépendantes aux variables indépendantes de la fonction génératrice correspondante. En supposant qu'elles peuvent être inversées, elles peuvent alors être résolues pour les $2f$ nouvelles variables Q_i et P_i en termes des anciennes q_i et p_i , fournissant ainsi les $2f$ équations de la transformation canonique (1.19). Quant aux relations (1.26b), (1.30b), (1.31b) et (1.32b), elles fournissent le lien entre le nouveau hamiltonien $H'(Q_i, P_i, t)$ et l'ancien $H(q_i, p_i, t)$.

1.5 Méthode de Hamilton-Jacobi

Le but de la présente méthode est d'opérer une transformation canonique telle que les nouvelles variables soient toutes des constantes du mouvement. Si une telle transformation canonique existe, alors les équations du mouvement (1.20) pour les nouvelles variables canoniques se réduisent à

$$\frac{\partial H'}{\partial P_i} = 0, \quad \frac{\partial H'}{\partial Q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.33)$$

Une solution triviale de ces $2f$ équations de mouvement est obtenue en prenant $H' = 0$. Cherchons, à présent, une fonction génératrice de deuxième espèce, donc dépendante des anciennes coordonnées q_i , des nouveaux moments P_i et éventuellement du temps et qu'on notera par $S(q_i, P_i, t)$, qui engendrera une transformation canonique telle que

$$H' = 0, \quad Q_i = \alpha_i, \quad P_i = \beta_i, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.34)$$

où α_i et β_i sont des constantes. Cette fonction doit obéir, d'après les relations (1.30a)-(1.30b), au système d'équations différentielles couplées suivant :

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, \quad \alpha_i = \frac{\partial S}{\partial \beta_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.35a)$$

$$0 = H(q_i, p_i, t) + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (1.35b)$$

1.5.1 Équation de Hamilton-Jacobi

En substituant les moments p_i qui figurent dans la fonction de Hamilton de l'équation (1.35b) par les dérivées $\partial S/\partial q_i$, on obtient l'équation

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) = 0 \quad (1.36)$$

à laquelle doit satisfaire la fonction $S(q_i, \beta_i, t)$. C'est une équation aux dérivées partielles du premier ordre, appelée équation de Hamilton-Jacobi, pour la génératrice $S(q_i, \beta_i, t)$, appelée fonction principale de Hamilton. On montre aisément que cette dernière peut être mise sous la forme intégrale suivante

$$S(q_i, t) = \int_{t_1}^t L dt \quad (1.37)$$

et qui peut être vue, par conséquent, comme une fonctionnelle des chemins $q_i(t)$ où seul le point de départ est maintenu fixe.

L'équation de Hamilton-Jacobi constitue donc le point de départ d'une méthode générale de résolution des problèmes en mécanique, de même que les équations de Lagrange et les équations canoniques de Hamilton, et on peut aussi montrer que celle-ci découle bien d'un principe variationnel, mais construit avec la fonctionnelle (1.37). L'intégration de cette équation fait intervenir f constantes d'intégration plus une additive. Les invariants β_i sont simplement les constantes d'intégration qui apparaissent lors de la résolution de l'équation de Hamilton-Jacobi.

1.5.2 Méthode de séparation des variables

Dans le cas où l'hamiltonien peut se mettre sous cette forme

$$H\left(q_i, \frac{\partial S}{\partial q_i}, t\right) = H\left(q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}, t\right) + H\left(q_j, \frac{\partial S}{\partial q_j}, t\right), \quad k = 1, 2, \dots, f \neq j \equiv \text{fixé} \quad (1.38)$$

alors, l'équation (1.36) peut être réécrite, après avoir avoir remplacé l'expression de l'hamiltonien, de cette manière

$$\Phi_f\left(q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}, t, \frac{\partial S}{\partial t}, F_j\left[q_j, \frac{\partial S}{\partial q_j}\right]\right) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, f \neq j \equiv \text{fixé} \quad (1.39)$$

On peut chercher une solution de cette équation de la forme

$$S = S'(q_k, t) + S_j(q_j), \quad k = 1, 2, \dots, f \neq j \equiv \text{fixé} \quad (1.40)$$

En substituant cette dernière solution dans l'équation (1.39), celle-ci se met sous la forme

$$\Phi_f \left(q_k, \frac{\partial S'}{\partial q_k}, t, \frac{\partial S'}{\partial t}, F_j \left[q_j, \frac{\partial S_j}{\partial q_j} \right] \right) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, f \neq j \equiv \text{fixé} \quad (1.41)$$

que doit être vérifiée quel que soit q_j . Cela implique que les termes ne dépendant que de q_j sont constants, i.e.,

$$F_j \left[q_j, \frac{\partial S_j}{\partial q_j} \right] = \beta_j \quad (1.42a)$$

$$\Phi_{f-1} \left(q_k, \frac{\partial S'}{\partial q_k}, t, \frac{\partial S'}{\partial t}, \beta_j \right) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, f \neq j \equiv \text{fixé} \quad (1.42b)$$

La première équation se résoud sans problème, tandis que nous avons diminué le nombre de variables intervenant dans la seconde. Il suffit maintenant de répéter cette procédure de récurrence jusqu'à résoudre complètement l'équation de Hamilton-Jacobi et obtenir l'expression de la fonction principale de Hamilton $S(q_i, \beta_i, t)$. En fin, il reste seulement à rapporter cette solution dans l'équation (1.35a) pour exprimer les coordonnées q_i (ou les moments p_i) en fonction du temps. Noter que les $2f$ constantes de mouvement α_i et β_i seront reliées aux $2f$ conditions initiales q_{i0} et p_{i0} .

Un cas particulier intéressant de l'équation de Hamilton-Jacobi est lorsque le système étudié est conservatif. Autrement dit, l'hamiltonien du système ne dépend pas explicitement du temps et correspond à l'énergie totale, i.e $H(q_i, p_i) = E$. Dans ce cas, l'équation de Hamilton-Jacobi s'intègre facilement et fournit

$$S(q_i, \beta_i, t) = -Et + W(q_i, \beta_i) \quad (1.43)$$

En portant cette expression dans l'équation de Hamilton-Jacobi, on obtient l'équation suivante :

$$H \left(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i} \right) = E \quad (1.44)$$

appelée équation caractéristique de Hamilton-Jacobi pour la fonction $W(q_i, \beta_i)$, appelée fonction caractéristique de Hamilton ou action réduite. Un problème est dit complètement séparable si la fonction caractéristique de Hamilton peut s'écrire

$$W(q_1, q_2, \dots, q_f, \beta_i) = \sum_{k=1}^f W_k(q_k, \beta_i), \quad \text{avec } \beta_i \equiv \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_f\} \quad (1.45)$$

Dans ce cas, la résolution de l'équation de Hamilton-Jacobi se ramène à la simple résolution de f équations différentielles ordinaires du premier ordre de la forme

$$F_k \left[q_k, \frac{\partial W_k}{\partial q_k} \right] = \beta_k, \quad k = 1, 2, \dots, f \quad (1.46)$$

où les constantes β_k sont reliées par la contrainte suivante

$$E = \sum_{k=1}^f \beta_k \quad (1.47)$$

1.6 Variables canoniques angles-actions

La méthode de Hamilton-Jacobi, décrite ci-dessus, consiste à effectuer une transformation canonique $(q_i, p_i) \rightarrow (Q_i, P_i)$ bien particulière. Cette transformation permet de relier directement les variables canoniques (q_i, p_i) à leurs valeurs initiales (q_{i0}, p_{i0}) via la fonction principale de Hamilton, dont l'évolution temporelle obéit à l'équation de Hamilton-Jacobi. Cependant, dans de nombreuses situations physiques, l'hamiltonien est une intégrale première, et correspond à l'énergie totale, comme dans le cas des systèmes décrivant un mouvement périodique ou quasi-périodique. Pour de tels systèmes, il est préférable de définir un autre couple de variables canoniques, dites variables angles-actions, plus adapté à l'étude des caractéristiques de leur mouvement. En effet, ce nouveau jeu de variables est particulièrement efficace car il permet d'accéder directement aux fréquences d'oscillations sans passer par la résolution de l'équation de Hamilton-Jacobi.

On distingue deux types de mouvement périodiques possibles pour un système à un seul degré de liberté :

- mouvement de libération : la coordonnée $q(t)$ et le moment $p(t)$ sont des fonctions périodiques de même fréquence.
- mouvement de rotation : la coordonnée $q(t)$ est q_0 -périodique, tandis que le moment

$p(t)$ reste borné.

Pour un système à plusieurs degrés de liberté, la définition précédente se généralise aisément. Un mouvement est dit périodique si la projection de la trajectoire sur chaque plan Γ_i est périodique dans le sens défini plus haut. On distingue aussi deux catégories de mouvement périodique : mouvement simplement périodique pour lequel on associe la même période à tous les degrés de liberté du système, et mouvement quasi-périodique dans le cas contraire.

1.6.1 Cas d'un système à un seul degré de liberté

Les équations du mouvement d'un système qui subit un mouvement périodique peuvent être mises sous une forme universelle en considérant une transformation canonique vers de nouvelles variables (φ, J) telle que :

- la nouvelle coordonnée φ , appelée variable d'angle, augmente de 2π pendant une période T .
- le nouveau moment J , appelé variable d'action, reste constant au cours du mouvement.

Comme l'hamiltonien d'un système décrivant un mouvement périodique (ou quasi-périodique) est une intégrale première et correspond à l'énergie totale du système, i.e. $H(q, p) = H'(\varphi, J) = E$, alors c'est la fonction caractéristique de Hamilton qui jouera ici le rôle de fonction génératrice. Cela revient donc à déterminer la fonction $E(J)$ telle que la fonction génératrice

$$W'(q, J) \equiv W(q, E(J)) \tag{1.48}$$

conduise à une transformation canonique pour les nouvelles variables angle-action (φ, J) . Puisque le mouvement est périodique, i.e. $q(t+T) = q(t)$, alors on peut écrire la condition sur φ comme suit

$$\Delta\varphi = \oint \frac{d\varphi}{dq} dq = 2\pi \tag{1.49}$$

où l'intégration s'effectue sur une période de révolution ou d'oscillation. Mais comme φ est définie par la transformation canonique engendrée par $W'(q, J)$, on aura alors

$$\varphi = \frac{\partial W'}{\partial J} \implies \frac{d\varphi}{dq} = \frac{\partial^2 W'}{\partial q \partial J} \quad (1.50)$$

La condition (1.49) se réécrit donc

$$\begin{aligned} 2\pi &= \oint \frac{\partial^2 W'}{\partial q \partial J} dq = \frac{\partial}{\partial J} \oint \frac{\partial W'}{\partial q} (q, J) dq \\ &= \frac{\partial}{\partial J} \oint \frac{\partial W}{\partial q} (q, E) dq \end{aligned} \quad (1.51)$$

Cette condition sera donc satisfaite si les constantes J et E sont reliées par

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\partial W}{\partial q} dq = \frac{1}{2\pi} \oint p dq \quad (1.52)$$

Cette dernière relation permet en principe, après inversion, d'exprimer l'énergie du système E en fonction du nouveau moment J . Puis, en substituant $E(J)$ dans l'expression de l'action réduite (1.48), on aboutit à la fonction génératrice de cette transformation $W'(q, J)$. Les équations canoniques du mouvement pour les variables angle-action s'écrivent

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial E}{\partial J} \implies \varphi = \left(\frac{\partial E}{\partial J} \right) t + \varphi_0 \quad (1.53)$$

$$\dot{J} = -\frac{\partial E}{\partial \varphi} = 0 \implies J = \text{cte} \quad (1.54)$$

La fréquence du mouvement se déduit de l'équation (1.49) en substituant la variable angle φ par son expression (1.53). On aura alors

$$\begin{aligned} \Delta\varphi &= \varphi(t+T) - \varphi(t) \\ &= \left(\frac{\partial E}{\partial J} \right) T = 2\pi \implies \nu = \frac{2\pi}{T} = \frac{\partial E}{\partial J} \end{aligned} \quad (1.55)$$

Une conséquence importante de cette nouvelle méthode est qu'elle nous permet d'accéder directement à une caractéristique essentielle d'un mouvement périodique, à savoir sa fréquence d'oscillation (ou de rotation), sans avoir à résoudre complètement l'équation de Hamilton-Jacobi. En effet, il nous suffit de déterminer, à partir de (1.52), l'expression

de E en terme de J et d'utiliser la relation (1.55). Pour ce faire, il faut d'abord chercher l'expression de p en terme de q et E en résolvant l'équation caractéristique de Hamilton-Jacobi pour la variable p et puis, substituer le résultat obtenu dans l'équation (1.52) pour avoir, après intégration, l'expression de J en terme de E , i.e $J = J(E)$. Cette dernière peut être inversée et exprimer ainsi l'énergie totale E en fonction de la variable action J , i.e. $E = E(J)$.

1.6.2 Cas d'un système à plusieurs degrés de liberté

Par analogie avec le cas d'un système à seul degré de liberté, on peut chercher une transformation canonique vers des variables canoniques de type angles-actions (φ_i, J_i) . Cette transformation sera engendrée par une fonction génératrice de la forme

$$W'(q_i, J_i) = W(q_i, \beta_1(J_i), \beta_2(J_i), \dots, \beta_f(J_i)) \quad (1.56)$$

Dans le cas d'un système périodique complètement séparable, l'équation caractéristique de Hamilton possède une solution qui s'écrit

$$W'(q_1, q_2, \dots, q_f, J_i) = \sum_{k=1}^f W_k(q_k, \beta_1(J_i), \beta_2(J_i), \dots, \beta_f(J_i)) \quad (1.57)$$

et l'énergie totale E est reliée aux variables actions J_i par

$$E(J_i) = \sum_{i=1}^f \beta_k(J_i) \quad (1.58)$$

Les variables actions J_i sont définies par

$$J_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_i} p_i dq_i, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.59)$$

où l'intégration s'effectue sur un contour fermé dans le plan $\Gamma_i \equiv (q_i, p_i)$. Ces équations constituent un système à f équations reliant les J_i aux β_i . Ce système permet donc d'exprimer les β_i en fonction des J_i , i.e. $\beta_i = \beta_i(J_1, J_2, \dots, J_f)$. La transformation canonique engendrée par la fonction génératrice $W'(q_i, J_i)$ conduit aux équations du mouvement

suivantes pour les variables angles φ_i :

$$\nu_i = \frac{\partial E}{\partial J_i}, \quad i = 1, 2, \dots, f \quad (1.60)$$

où la quantité ν_i représente la fréquence du mouvement dans le plan Γ_i .

Comme dans le cas à un seul degré de liberté, les fréquences peuvent être calculées sans résoudre complètement l'équation différentielle de Hamilton-Jacobi, autrement dit sans obtenir la solution complète des équations du mouvement. L'autre intérêt de la méthode des variables angles-actions est qu'elle fournit la première approche théorique pour une étude quantitative de l'atome en postulant que les variables actions ne peuvent prendre que des valeurs quantifiées. Ces règles de quantifications sont connues sous le nom de règles de Bohr-Sommerfeld.

2

Transition de la mécanique classique à la mécanique quantique

2.1 Ancienne théorie des quantas

Le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène est venu combler les lacunes du modèle planétaire, proposé par Rutherford en 1911, et qui, à cause de son approche purement classique, n'était pas dans la mesure d'interpréter l'émission discontinue des spectres atomiques, ni de se rendre compte de la stabilité de l'atome. Pour expliquer les spectres discontinus et, en même temps, contourner le problème de la perte continue d'énergie de l'électron accéléré, Bohr, dans son modèle, eut recours à deux hypothèses. Bohr postula que les électrons ne pouvaient tourner autour du noyau que sur des orbites spécifiques de rayon de courbure constant, et qu'à chaque orbite permise correspond une valeur d'énergie bien déterminée. Le premier postulat se traduit par la condition de quantification qui suit

$$J = \oint pdq = nh, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

où h est la constante de Planck et J est la variable action, qui correspond au moment cinétique orbital de l'électron. Ceci revient effectivement à dire que les électrons ne peuvent emprunter que des trajectoires bien définies. Le deuxième postulat, quant à lui, se traduit par le fait que les transitions électroniques d'une orbite, d'énergie E_n , vers une autre, d'énergie E_{n+1} , se font par sauts et sont accompagnées de l'émission ou de l'absorption d'un photon d'énergie :

$$\Delta E = |E_{n+1} - E_n| = h\nu \quad (2.2)$$

où ν est la fréquence du photon émis ou absorbé. Ce modèle, qui a été perfectionné par la suite par Sommerfeld en considérant des orbites elliptiques et en tenant compte des effets relativistes, fût parfait pour décrire l'atome d'hydrogène et les autres systèmes à un seul électron tels que l'ion d'hélium. D'ailleurs, il prédit pour un électron en orbite autour d'un noyau de charge Ze le spectre d'énergie suivant

$$E_n = -13.6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV} \quad (2.3)$$

qui est en parfaite accord avec les résultats expérimentaux. Malheureusement, le modèle de Bohr-Sommerfeld souffre encore de plusieurs lacunes. D'abord, il y a le fait qu'il repose sur des hypothèses heuristiques, et le fait qu'il ne s'applique pas au spectre des atomes plus complexes. De plus, il n'explique pas du tout pourquoi des raies sont plus intenses que d'autres, ni pourquoi certaines raies se séparent en plusieurs raies en présence d'un champ magnétique, i.e. l'effet Zeeman. Le modèle moderne issu de la mécanique quantique peut sembler très éloigné du modèle de Bohr-Sommerfeld, mais en fait l'idée principale reste la même : la physique classique ne suffit pas pour expliquer tous les phénomènes au niveau atomique. Bohr fût le premier à la reconnaître en introduisant l'idée de quantification dans son modèle de la structure de l'atome d'hydrogène, et il fût ainsi capable d'expliquer le spectre d'émission de l'hydrogène et des autres systèmes hydrogénoïdes.

2.2 Théorie quantique de l'atome

Au début des années vingt, l'échec de l'ancienne théorie des quanta faisait de moins en moins de doute et Bohr insistait dans ses conférences sur l'urgent besoin de trouver une théorie plus profonde qui romprait plus hardiment avec les modes de pensée traditionnels. Cette théorie nouvelle allait naître sous deux formes d'apparences très différentes. La première à paraître est la mécanique ondulatoire qui associe une onde à une particule et dont l'idée essentielle fut proposée par de Broglie en 1924. Il fallut cependant attendre 1926, l'année où Schrödinger proposa une équation d'évolution de cette onde. Dans l'intervalle, i.e. durant l'année 1925, Heisenberg, Born et Jordan, posent les bases d'une nouvelle formulation de la mécanique quantique qui sera appelée la mécanique matricielle.

2.2.1 Mécanique quantique matricielle

Heisenberg, dans son approche, proposa de travailler avec des quantités observables, comme la position et l'intensité des raies spectrales, plutôt qu'avec les notions classiques de position et d'impulsion d'un électron, qu'aucune expérience d'ailleurs ne pouvait alors mesurer directement. En physique classique, une quantité physique $X(t)$ (position, impulsion, etc. . .) propre à une particule en mouvement périodique de fréquence ν peut être analysée en série de Fourier sous la forme

$$X(t) = \sum X_n e^{2\pi i n \nu t} \quad (2.4)$$

Or, ce qu'on observe sont des fréquences quantiques ν_{nm} plus complexe dans leur forme que les fréquences de Fourier $n\nu$ et qui sont données par

$$h\nu_{nm} = E_n - E_m \quad (2.5)$$

Heisenberg postule que, puisque deux indices (n, m) sont nécessaires pour caractériser les fréquences, l'ensemble des quantités physiques de base qui généralisent les coefficients de Fourier est un ensemble à deux indices X_{nm} dont la variation dans le temps est donnée par

$$X_{nm}(t) = X_{nm}(0) e^{2\pi i \nu_{nm} t} \quad (2.6)$$

Pour trouver l'algèbre auquel obéissent ces quantités, Heisenberg s'appuie sur la relation (2.5). En effet, si l'on associe à la quantités X^2 les coefficients de Fourier généralisés $(X^2)_{nm}$, il faut, pour satisfaire à (2.5), supposer la règle de multiplication symbolique suivante

$$(X^2)_{nm} = \sum_k X_{nk} X_{km}, \quad (2.7)$$

puisque on aura

$$(X^2)_{nm}(t) = \sum_k X_{nk}(t) X_{km}(t)$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\sum_k X_{nk}(0) X_{km}(0) \right) e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \\
&= (X^2)_{nm}(0) e^{2\pi i \nu_{nm} t}
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Born et Jordan ont, par la suite, compris que cette multiplication symbolique est celle du calcul matriciel et que la quantité physique X est représentée par une matrice de coefficients X_{nm} . Ils ont montré aussi que les matrices X et P_x associées respectivement à la position et à l'impulsion obéissent à la règle de commutation suivante

$$[X, P_x] = i\hbar \times \mathbb{1} \tag{2.9}$$

où $\mathbb{1}$ désigne la matrice identité. Cette relation de commutation est fondamentale car elle traduit l'impossibilité, au niveau microscopique, d'avoir à la fois une position et une impulsion bien définies. Cette relation est à l'origine du principe d'incertitude de Heisenberg qui stipule que la notion classique de trajectoire n'existe pas au niveau microscopique. Cette nouvelle théorie permet de calculer les niveaux d'énergie et les éléments de matrice des quantités physiques essentielles au moyen de manipulations algébriques parfois très habiles. Ce n'est pourtant pas toujours le cas et on retrouve certains calculs particulièrement élégants de la mécanique des matrices dans les cours modernes de mécanique quantique. Citons le calcul des valeurs propres des opérateurs de moment angulaire J^2 et J_z et des matrices qui représentent les deux autres composantes J_x et J_y . Il en va de même pour le calcul algébrique des niveaux de l'oscillateur harmonique, utile en mécanique quantique élémentaire et indispensable en électrodynamique quantique.

2.2.2 Mécanique quantique ondulatoire

La mécanique ondulatoire, quant à elle, a pour base l'hypothèse de de Broglie mettant en avant la nature ondulatoire de la matière en associant une longueur d'onde λ à toute particule de masse m et d'impulsion \vec{p} . Dans cette approche, la trajectoire n'a plus aucun sens et l'on parle de la probabilité de présence. En fait, une particule élémentaire se manifeste dans l'espace comme une onde $\psi(\vec{r}, t)$. La probabilité de présence dans un élément de volume autour de \vec{r} est tout simplement le carré du module de la fonction d'onde, i.e. $|\psi(\vec{r}, t)|^2$. Comme pour toute onde, $\psi(\vec{r}, t)$ doit satisfaire une équation d'onde. C'est en

1926 que Schrödinger parvient, en se basant sur la fameuse dualité onde-corpuscule ainsi que sur le formalisme de Hamilton-Jacobi, à construire une équation, qui porte son nom, décrivant l'évolution temporelle de cette onde :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (2.10)$$

où H est l'hamiltonien du système. Pour une particule de masse m , subissant l'action d'une énergie potentiel $V(\vec{r})$, on a

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad (2.11)$$

Il est souvent commode de se placer dans la représentation de Dirac. Au lieu de décrire la particule par une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$, on la décrit par un vecteur instantané $\langle \psi(t) |$, appelé vecteur état. Le vecteur $\langle \psi(t) |$ est appelé « vecteur ket », qui est construit à partir de la fonction d'onde de la façon suivante

$$\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \psi(\vec{r}, t) \quad (2.12)$$

Cela veut dire que la projection du ket sur la base continue $\{|\vec{r}\rangle\}$ est la fonction d'onde. De l'équation d'onde (2.10), l'on déduit l'équation de Schrödinger pour le ket

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H|\psi(t)\rangle \quad (2.13)$$

où cette fois-ci l'hamiltonien H est un opérateur agissant sur l'espace de Hilbert.

2.3 Relations d'incertitude de Heisenberg

Les inégalités de Heisenberg sont des propriétés intrinsèques de la description quantique de tout système. Elles n'ont rien à avoir avec une quelconque incertitude de la mesure elle-même, ou avec la précision des instruments de mesure. Elles signifient qu'une « particule » ne peut pas être conçue comme simultanément localisée en position et en impulsion au-delà d'une certaine limite. Le point de départ de la mécanique classique, où l'état de la particule est décrite par une trajectoire qui correspond à la donnée simultanée de sa position et de son impulsion à tout instant, est en contradiction avec les relations d'in-

certitude. Par conséquent, c'est on n'arrive pas à associer une trajectoire à une particule quantique alors cela revient à admettre que l'une au moins des deux variables, position ou impulsion, est partiellement indéterminée. Comme la notion de position est liée à l'aspect localisé d'une particule, on pourrait ainsi dans un premier temps imaginer que la position reste parfaitement définie, alors que l'impulsion est entachée d'une indétermination fondamentale. À priori rien ne justifie une telle attitude ; au contraire il semble important intuitivement de continuer à traiter les deux grandeurs, position et impulsion, de façon égalitaire.

Essayons de préciser l'incertitude fondamentale par une relation symétrique en désignant par ΔX et ΔP_x les erreurs sur la position et l'impulsion respectivement. La relation la plus simple qu'on puisse imaginer, respectant la symétrie requise, est

$$\Delta X \Delta P_x \sim c \quad (2.14)$$

où c doit être une constante à caractère universelle inhérente au monde microscopique. Comme le produit $\Delta X \Delta P_x$ a la dimension d'une action, alors la constante c doit avoir de même la dimension d'une action. Or, on connaît déjà une constante fondamentale répondant à ces exigences : c'est la constante de Planck h . On doit donc s'attendre à une relation du genre :

$$\Delta X \Delta P_x \sim h \quad (2.15)$$

Le point fondamental est que ce produit ne peut être rendu arbitrairement petit, et c'est bien ce que dit cette relation. En particulier, on peut montrer que si deux grandeurs physiques représentées par deux opérateurs A et B qui ne commutent pas, alors il est impossible de trouver un état physique pour lequel la mesure de A et une mesure de B donneraient des valeurs précises. Autrement dit,

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (2.16)$$

soit encore que le produit des incertitudes dans la mesure des observables A et B est toujours plus grand (ou égal) à la moitié de la valeur absolue de la valeur moyenne du

commutateur de A et B . Dans le cas particulier où $A = X$ et $B = P_x$, nous avons

$$[X, P_x] = i\hbar \quad (2.17)$$

alors l'équation (2.16) donne

$$\Delta X \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.18)$$

c'est-à-dire la relation de Heisenberg. Noter qu'on peut généraliser cette dernière inégalité à tous les couples de variables canoniquement conjuguées.

2.4 Théorème d'Ehrenfest et lien avec la mécanique analytique

En mécanique quantique, les grandeurs physiques sont représentées par des observables (opérateurs hermitiens). Vu le caractère probabiliste des états du système, ces grandeurs physiques sont des valeurs moyennes des observables associées, sur l'état dans lequel se trouve le système. Considérons une observable $O(t)$ et cherchons la loi d'évolution de sa valeur moyenne dans le temps. La dérivée totale de $\langle O(t) \rangle$, par rapport au temps,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi | O | \psi \rangle \\ &= \left(\frac{d\langle \psi |}{dt} \right) O | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial O}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | O \left(\frac{d|\psi\rangle}{dt} \right) \end{aligned} \quad (2.19)$$

En utilisant l'équation (2.13) et son complexe conjugué, on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [O, H] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial O}{\partial t} | \psi \rangle \quad (2.20)$$

Ce qui conduit au résultat suivant

$$\frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} [\langle O \rangle, \langle H \rangle] + \frac{\partial \langle O \rangle}{\partial t} \quad (2.21)$$

qui représente le théorème d'Ehrenfest, décrivant l'évolution temporelle de la valeur moyenne de l'observable H , qui stipule que les mesures faites en physique classique sont égales aux moyennes des observables associés aux variables utilisées. En effet, en comparant cette dernière équation avec l'équation d'évolution d'une grandeur classique (1.11),

nous font découvrir une chose étonnante : il y a une analogie de structure frappante entre la mécanique analytique et la mécanique quantique. Bien entendu, la nature mathématique et l'interprétation physique des êtres manipulés sont différentes, mais les équations qui les relient sont les mêmes à condition de faire la correspondance suivante :

$$\{f, g\} \leftrightarrow \frac{1}{i\hbar}[F, G] \quad (2.22)$$

2.5 Principe de correspondance

Le principe de correspondance stipule que le passage de la mécanique classique à la mécanique quantique se fait en remplaçant la position x et la composante x du moment p_x par les opérateurs position X et moment P_x , qui agissent sur l'espace de Hilbert, de la sorte

$$x \rightarrow X|\psi(t)\rangle = x|\psi(t)\rangle, \quad p_x \rightarrow P_x|\psi(t)\rangle = -i\hbar\partial_x|\psi(t)\rangle \quad (2.23)$$

De manière générale, pour toute grandeur physique $f(\vec{r}, \vec{p})$ fonction du vecteur position \vec{r} et du vecteur impulsion \vec{p} , l'observable associée s'obtient en remplaçant dans l'expression classique des composantes x, y, z, p_x, p_y, p_z par les opérateurs hermitiens X, Y, Z et P_i ($i = x, y, z$) qui leur correspondent respectivement. Comme ces derniers, en général, ne commutent pas entre eux, alors il existe une subtilité auquel il faut faire attention lorsqu'on passe d'une grandeur physique à l'opérateur auto-adjoint qui lui correspond. Par exemple, pour appliquer le principe de correspondance à la quantité classique xp_x , la théorie quantique propose, pour conserver à l'observable son caractère auto-adjoint, de symétriser son expression comme suit

$$xp_x \rightarrow \frac{XP_x + P_xX}{2} \quad (2.24)$$

Noter que ce principe se généralise à tous les autres espaces vectoriels de la mécanique quantique pour lesquels les observables de référence ne sont plus la position et l'impulsion, mais d'autres opérateurs adaptés à chaque situation.

2.6 Théorème des noeuds : cas d'un oscillateur harmonique

L'évolution de n'importe quel système physique au voisinage d'une position d'équilibre stable est décrite parfaitement par le modèle de l'oscillateur harmonique. Un oscillateur harmonique est donc un système dont l'amplitude de probabilité associé $\psi(x, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (2.25)$$

où H est l'opérateur hamiltonien obtenu à partir de l'expression de l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique classique

$$h(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.26)$$

en appliquant le principe de correspondance, i.e. en remplaçant les grandeurs physiques classiques par des observables quantiques correspondantes,

$$x \rightarrow X\psi = x\psi \quad (2.27)$$

$$p_x \rightarrow P_x\psi = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi \quad (2.28)$$

et l'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\psi(x, t) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) \quad (2.29)$$

où ω est la pulsation propre de l'oscillateur et m est la masse de la particule.

Nous admettons que l'onde associée à une particule est une onde stationnaire, i.e. $\psi(x, t) = \phi(x) \exp(iEt/\hbar)$, nous sommes donc amenés à résoudre l'équation

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \phi(x) = 0 \quad (2.30)$$

On cherche alors une solution de la forme

$$\phi(x) = y(x)e^{-\alpha x^2} \quad (2.31)$$

où α est une constante arbitraire. En substituant cette solution dans l'équation (2.30), il

vient

$$y'' - 4\alpha xy' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - 2\alpha\right)y + \left(4\alpha^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right)x^2y = 0 \quad (2.32)$$

α étant arbitraire, il pourra être choisi de façon à ce que le terme en x^2 soit nul. Ceci réduit l'équation à

$$y'' - 4\alpha xy' + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - 2\alpha\right)y = 0, \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad (2.33)$$

Pour calculer les valeurs d'énergie que peut prendre une particule quantique plongée dans un potentiel harmonique, cherchons une première solution sous forme d'une série infinie

$$y(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k x^k \quad (2.34)$$

dont le terme général x^n a pour expression

$$\dots + \left\{ (n+1)(n+2)a_{n+2} - 4\alpha n a_n - \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - 2\alpha\right)a_n \right\} + \dots \quad (2.35)$$

La solution sous forme de série infinie n'est pas intéressante et, de plus, ne peut satisfaire aux conditions physiques. Le problème est contourné si la série devient un polynôme, donc si les coefficients sont nuls à partir d'un certain rang. Par conséquent, il faut arrêter la série au terme de degré n . D'après la relation précédente, on doit avoir

$$a_{n+2} = 2a_n \frac{\hbar^2\alpha(2n+1) - mE}{(n+1)(n+2)\hbar^2} \quad (2.36)$$

Si on pose $a_{n+2} = 0$, il vient

$$\hbar^2\alpha(2n+1) - mE = 0 \quad (2.37)$$

et l'énergie doit être égale à

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.38)$$

L'énergie est donc bien quantifiée, seules certaines valeurs étant permises. Le terme $\hbar\omega/2$ est appelé l'énergie du point zéro de l'oscillateur harmonique. Du point de vue classique,

la solution correspondant au minimum de l'énergie ($E = 0$) est évidemment $x = 0$ et $p = 0$: la particule est au repos au niveau de la position d'équilibre. Sa position et sa vitesse sont donc parfaitement définies, i.e. $\Delta x = 0$ et $\Delta p = 0$. Par contre, du point de vue quantique, une telle configuration est impossible en vertu des relations d'incertitude de Heisenberg. Elles sont une conséquence des fluctuations quantiques qui ne permettent jamais à une particule quantique d'être totalement au repos.

Afin d'établir les solutions normalisables de l'équation de Schrödinger indépendante du temps (2.30), introduisons le changement de variables suivant

$$\xi = ax, \quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \lambda = \frac{2E}{\omega\hbar} \quad (2.39)$$

dès lors celle-ci devient

$$(D^2 + \lambda - \xi^2)\phi(\xi) = 0 \quad (2.40)$$

où D est l'opérateur différentiel par rapport à ξ . Il est aisé de vérifier par substitution dans la dernière équation que $\phi_0(\xi) = \exp(-\xi^2/2)$ est bien une solution de cette équation avec $\lambda = 1$, i.e. $E = \hbar\omega/2$. De même, la fonction

$$\phi_1(\xi) = (\xi - D)\phi_0(\xi) = 2\xi \exp(-\xi^2/2) \quad (2.41)$$

est également solution de (2.40) mais pour $\lambda = 3$, i.e. $E = 3\hbar\omega/2$. En procédant par récurrence, on montre que la fonction

$$\phi_n(\xi) = (\xi - D)^n \phi_0(\xi) = P_n(\xi) \exp(-\xi^2/2) \quad (2.42)$$

est une solution de (2.40) pour $\lambda = 2n+1$, i.e. $E = (n+1/2)\hbar\omega$, où $P_n(\xi)$ est un polynôme d'ordre n . Par ailleurs, on définit les polynômes de Hermite $H_n(\xi)$ [voir appendice B] par l'expression

$$(\xi - D)^n \exp(-\xi^2/2) = H_n(\xi) \exp(-\xi^2/2) \quad (2.43)$$

En comparant maintenant les équations (2.42) et (2.43), nous pouvons écrire les états stationnaires solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour l'oscillateur

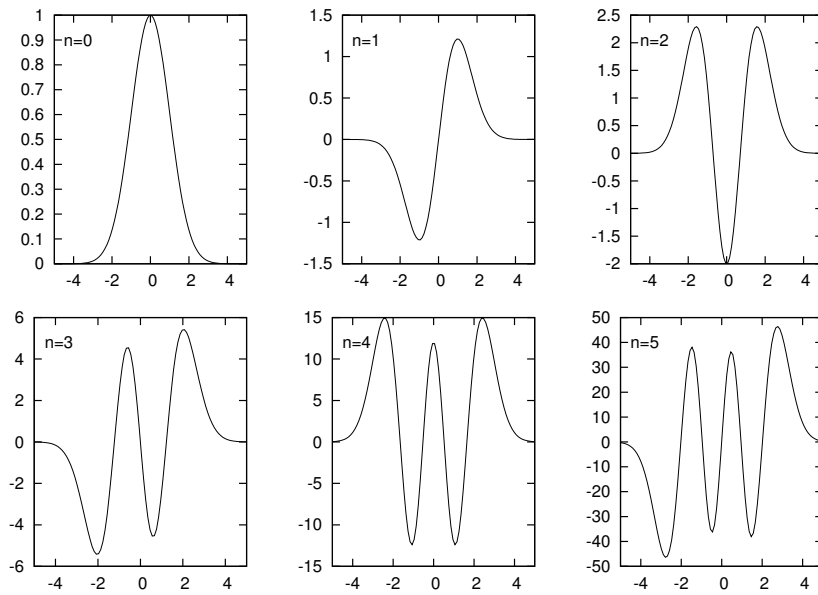


Figure 2.1 – Forme des amplitudes de probabilité correspondant aux premiers niveaux de l'oscillateur harmonique.

harmonique sous la forme

$$\phi_n(x) = H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.44)$$

Nous esquissons dans la figure (2.1) la forme des amplitudes de probabilité correspondant aux cinq premiers niveaux de l'oscillateur harmonique. Comme on peut le constater, l'amplitude de probabilité de l'état fondamental n'a pas de zéro (excepté aux extrêmités), celle du premier état excité a un zéro supplémentaire, celle du deuxième état excité a deux zéros, etc. Cette propriété est tout à fait générale et porte le nom de « théorème des noeuds » : pour des états liés, l' n ème état excité est décrit par une amplitude de probabilité qui a exactement n noeuds (ou zéros), extrêmités exclues. Ce théorème est très utile pour se faire une idée qualitative de l'allure d'une amplitude de probabilité d'un état lié, et sera utilisé par la suite pour établir une règle de quantification exacte pour les états liés dans le cadre du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique.

3

Formalisme de Hamilton-Jacobi quantique

3.1 Fonction moment quantique

L'entité centrale dans ce présent formalisme est la fonction moment quantique définie, à une dimension, par

$$p(x, E) \equiv \frac{dW}{dx} \quad (3.1)$$

où $W(x, E)$ est l'analogie quantique de la fonction caractéristique classique. La fonction W est liée à la solution de l'équation de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = 0 \quad (3.2)$$

par la relation

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{iW}{\hbar}\right) \quad (3.3)$$

qui, lorsqu'elle est substituée dans (3.2), conduit à l'analogie de l'équation de Hamilton-Jacobi en mécanique quantique pour la génératrice W qui suit

$$\left(\frac{dW}{dx}\right)^2 - i\hbar \frac{d^2W}{dx^2} = 2m [E - V(x)] \quad (3.4)$$

En substituant (3.1) dans (3.4), cette dernière prend la forme d'une équation de Riccati :

$$p^2 - i\hbar p' = 2m [E - V(x)] \quad (3.5)$$

où la fonction p est reliée à la fonction d'onde $\psi(x)$ par

$$p = -i\hbar \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} = -i\hbar \frac{d}{dx} \ln \psi(x) \quad (3.6)$$

3.2 Condition aux limites ou principe de correspondance

L'équation de Riccati (3.5) est une équation différentielle non linéaire qui donnera lieu à deux solutions. Par conséquent, on doit établir une condition aux limites pour sélectionner parmi celles-ci une solution physiquement acceptable. On discutera d'abord de la condition aux limites proposée au départ par Leacock et Padgett [11]. Cette condition aux limites vient compléter la définition de la fonction $p(x, E)$ en terme de l'impulsion classique. Lorsque x est une variable complexe, p_c doit être définie avec précaution, puisqu'il s'agit d'une fonction multiforme (ou à détermination multiple). Dans le plan complexe x , la région classique est sur l'axe réel, entre les points tournants⁽ⁱ⁾ x_1 et x_2 . En conséquence, le plan complexe x dans lequel p_c est définie, présente une coupure séparant les deux branches de la fonction. Le segment de droite partant de x_1 à x_2 est la coupure de la branche principale ; une coupure étant une ligne, constituée de points singuliers, introduite de manière à définir une branche d'une fonction multivaluée. La fonction p_c est ainsi définie comme *la branche de la racine carrée qui est positive juste en dessous de la coupure*. Avec cette définition qui fixe la valeur de la fonction moment classique $p_c(x, E)$, on obtient la condition physique qui complète la définition de la fonction $p(x, E)$, en prenant la limite classique de l'équation (3.5), comme suit :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} p(x, E) \rightarrow p_c(x, E) \quad (3.7)$$

où $p_c = \sqrt{2m(E - V(x))}$ est la fonction moment classique. Cette dernière condition n'est pas seulement une condition aux limites sur la fonction moment quantique $p(x, E)$, mais elle peut être aussi interprétée comme une forme du principe de correspondance. Elle est simple à mettre en œuvre uniquement pour des potentiels simples car la fonction p_c aura en général plusieurs points de branchement, et par conséquent la branche correcte doit

(i). Un point tournant correspond à un point de l'espace des phases où la particule classique plongée dans un potentiel rebrousse chemin, i.e. là où son énergie totale est égale à son énergie potentielle. Dans le cas d'un potentiel en forme de puit, on aura deux points tournants x_1 et x_2 solutions de l'équation $p_c^2(x, E) = 0$.

être sélectionnée. Pour cette raison, il faut imposer d'autres conditions pour sélectionner la solution physiquement correcte. Plusieurs possibilités existent quant au choix de ces autres conditions. Par exemple, l'intégrabilité de la fonction d'onde associée à l'état lié constitue une de ces exigences. Certaines autres conditions, qui s'avèrent très utiles dans le contexte de modèles à potentiels super-symétriques [8], peuvent également être imposées.

3.3 Singularités de la fonction $p(x, E)$

On a déjà mentionné que la structure singulière de la fonction moment quantique $p(x, E)$ joue un rôle important dans l'obtention des fonctions propres et des valeurs propres dans le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique. L'emplacement des singularités et le calcul des résidus associés à celles-ci sont les ingrédients essentiels requis dans ce formalisme.

La fonction $p(x, E)$ comporte deux types de singularités : les singularités mobiles et les singularités fixes. Il est bien connu du théorème d'oscillation de Sturm-Liouville [voir appendice C et la section §2.6] que, pour les états liés, l' n ème état excité est décrit par une fonction d'onde qui a exactement n noeuds (n zéros). Par ailleurs, d'après la relation (3.6), ces zéros vont correspondre aux pôles de la fonction $p(x, E)$. L'emplacement de ces pôles dépend de l'énergie et des conditions initiales d'où l'appellation « pôles mobiles », par opposition aux « pôles fixes » qui sont reliés directement à la structure singulière du potentiel $V(x)$. Dans le cas d'équations différentielles de type Riccati, il est connu que seuls des pôles simples peuvent apparaître comme des singularités mobiles [21]. Dans ce cas, il est facile de monter que le résidu de p en ces points est égal à $-i\hbar$. En effet, considérons un domaine D où le potentiel $V(x)$ reste analytique. Supposons en plus que la fonction $p(x, E)$ possède un pôle d'ordre m au point $x_0 \in D$. Calculons maintenant le résidu de la fonction $p(x, E)$ en faisant un développement en série de Laurent autour de x_0 comme suit

$$p = \sum_{k=1}^m b_k (x - x_0)^{-k} + \sum_{k=0}^{+\infty} a_k (x - x_0)^k \quad (3.8)$$

En substituant (3.8) dans l'équation de Hamilton-Jacobi quantique (3.5) et en comparant

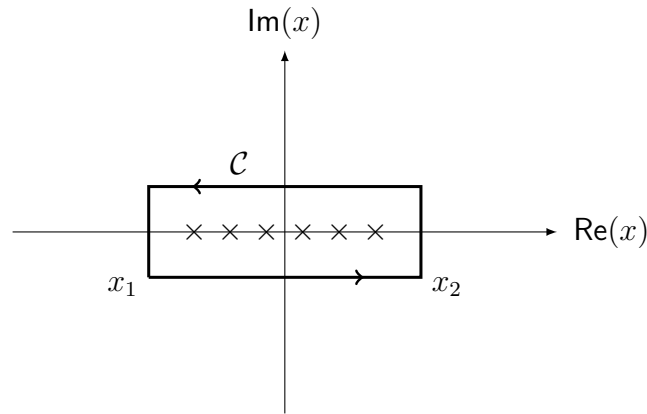


Figure 3.1 – Contour renfermant les singularités mobiles de la fonction $p(x, E)$ dans le plan complexe x .

les coefficients des différentes puissances en $x - x_0$, on obtient

$$m = 1, \quad \text{et} \quad b_1 = -i\hbar \quad (3.9)$$

En conclusion, les singularités mobiles de la fonction moment quantique $p(x, E)$ sont toutes des pôles simples avec la même valeur du résidu qui vaut $-i\hbar$.

3.4 Variable action quantique et règle de quantification exacte

Après avoir introduit la fonction moment $p(x, E)$, on définit à présent la variable action quantique en généralisant sa définition classique. La variable action classique donnée par l'intégrale suivante

$$J_c(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} p_c(x, E) dx \quad (3.10)$$

où l'intégration est effectuée le long d'un contour fermé \mathcal{C} . Le contour \mathcal{C} renferme la coupure reliant les deux points tournants x_1 et x_2 comme indiqué dans la figure (3.1).

Par analogie, on définit la variable action quantique par

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} p(x, E) dx \quad (3.11)$$

où \mathcal{C} est le contour défini immédiatement ci-dessus. Ce dernier entoure les n singularités mobiles de la fonction $p(x, E)$. Par conséquent, en appliquant le théorème des résidus sur

l'intégrale (3.11), on obtient la condition de quantification exacte suivante

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} p(x, E) dx = \frac{1}{2\pi} \left[\underbrace{2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}(p, x_k)}_{=n \times (-i\hbar)} \right] = n\hbar \quad (3.12)$$

qui peut être considérée comme une généralisation de la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld. Contrairement à cette dernière, il s'agit d'une condition de quantification exacte et résulte directement du théorème d'oscillation de Sturm-Liouville et n'est vraie que pour les états liés. Par conséquent, on ne peut l'appliquer à des états de diffusion dont les spectres d'énergie sont continus, et qui sont décrits par des fonctions d'onde qui ne s'annulent pas à l'infini.

La puissance du formalisme de Hamilton-Jacobi classique, comme on l'a déjà vu au premier chapitre, réside dans le fait qu'on peut obtenir les fréquences d'un système périodique directement à partir des variables canoniques angles-actions. De manière analogue, le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique nous permet d'accéder au spectre d'énergie des états stationnaires directement à partir de la variable action quantique en utilisant la règle de quantification exacte (3.12).

Pour obtenir l'ensemble des valeurs propres de l'hamiltonien du système, il faut connaître l'emplacement des autres singularités de la fonction $p(x, E)$, qui se situent en dehors du contour \mathcal{C} , et calculer leurs résidus correspondants. Les autres singularités de la fonction $p(x, E)$ proviennent du potentiel $V(x)$, appelées singularités fixes. Les emplacements de ces points singuliers sont indépendants de l'énergie et apparaissent dans toutes les solutions de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique. Ainsi, si le potentiel est méromorphe, la fonction $p(x, E)$ le sera également. Le résidu de l'un de ces singularités fixes peut également être calculé en utilisant l'équation (3.5). En raison de la nature quadratique de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique, on obtient deux valeurs pour chacun de ces résidus aux pôles fixes. Parmi ces deux valeurs, il faut vérifier laquelle satisfait la condition aux limites (3.7). Étant donné que p_c est définie comme étant positive juste en dessous de la coupure, on choisira la valeur de résidus qui, dans la limite classique, correspond à la valeur de p_c . Cette méthode de choix de résidu est bien détaillée dans le cas de l'atome d'hydrogène traité plus tard dans le chapitre.

3.5 Applications simples du formalisme

3.5.1 Cas d'un oscillateur harmonique

L'équation de Hamilton-Jacobi quantique pour une particule de masse m plongée dans un potentiel harmonique à une dimension s'écrit

$$p^2 - i\hbar p' = 2m(E - V(x)) \equiv p_c^2, \quad \text{avec} \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (3.13)$$

où ω est la pulsation propre de l'oscillateur harmonique. Pour une valeur d'énergie donnée, le système possède deux points tournants, solutions de l'équation $p_c^2(x, E) = 0$, donnés par $x_{1,2} = \pm\sqrt{2E/m\omega^2}$. La règle de quantification s'écrit alors

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} p(x, E) dx = n\hbar \quad (3.14)$$

où \mathcal{C} est un contour entourant les pôles mobiles entre les deux points tournants x_1 et x_2 . Noter que la fonction $p(x, E)$ possède, en plus des singularités mobiles, une autre singularité isolée située à l'infini, i.e. quand $x \rightarrow \infty$. Pour évaluer $J(E)$ dans le plan complexe, considérons l'intégrale

$$I_{\Gamma_R} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_R} p(x, E) dx \quad (3.15)$$

sur un contour circulaire Γ_R de rayon R et orienté dans le sens positif comme indiqué dans la figure (3.2). Comme la fonction $p(x, E)$ est holomorphe dans le domaine $\{-\mathcal{C}\} \cup \Gamma_R$ (pas de points singuliers dans la région délimitée par les contours \mathcal{C} et Γ_R), alors l'intégrale de l'action $J(E)$ coïncide simplement avec I_{Γ_R} . Autrement dit,

$$I_{\Gamma_R} + \frac{1}{2\pi} \oint_{-\mathcal{C}} p(x, E) dx = 0 \implies I_{\Gamma_R} = -\frac{1}{2\pi} \oint_{-\mathcal{C}} p(x, E) dx = J(E) = n\hbar \quad (3.16)$$

Il nous reste à présent qu'évaluer l'intégrale I_{Γ_R} prise sur le contour Γ_R . Pour le faire, introduisons le changement de variable $x = 1/y$, de sorte que la singularité au point $x \rightarrow \infty$ est projetée au point situé à l'origine, i.e. $y = 0$. Dans ce cas, l'intégrale I_{Γ_R} devient

$$I_{\Gamma_R} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\tilde{\gamma}_0} \frac{\tilde{p}(y, E)}{y^2} dy \quad (3.17)$$

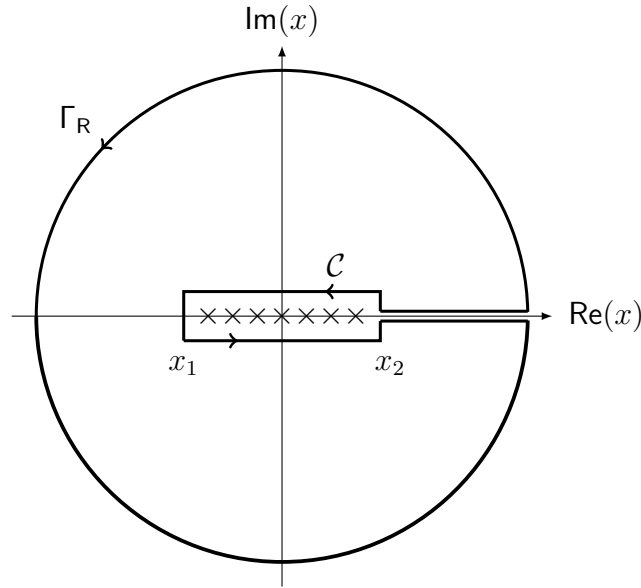


Figure 3.2 – Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'oscillateur harmonique dans le plan complexe x .

où $\tilde{p}(y, E) = p(1/y, E)$ et le contour $\tilde{\gamma}_0$, orienté dans le sens positif, renferme un seul point singulier dans le plan complexe y , c'est-à-dire le pôle au point $y = 0$, comme indiqué dans la figure (3.3). L'équation de Hamilton-Jacobi quantique (3.13) se réécrit, par rapport à la variable y , de la sorte

$$\tilde{p}^2 + i\hbar y^2 \frac{d\tilde{p}}{dy} = 2m \left(E - \frac{m\omega^2}{2y^2} \right) \equiv \tilde{p}_c^2 \quad (3.18)$$

Pour calculer la contribution du pôle au point $y = 0$, la fonction $\tilde{p}(y, E)$ est développée en série de Laurent autour du point singulier comme suit

$$\tilde{p}(y, E) = \sum_{k=1}^m \frac{b_k}{y^k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \quad (3.19)$$

En substituant le développement de $\tilde{p}(y, E)$, ci-dessus, dans l'équation (3.17), on peut montrer que la seule contribution non nulle provient du terme linéaire en y , i.e.,

$$I_{\Gamma_R} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\tilde{\gamma}_0} \frac{\tilde{p}(y, E)}{y^2} dy = ia_1 \quad (3.20)$$

L'étape suivante consiste à substituer le développement (3.26) dans l'équation de Hamilton-Jacobi quantique (3.25) et comparer les coefficients des différentes puissances en y . On

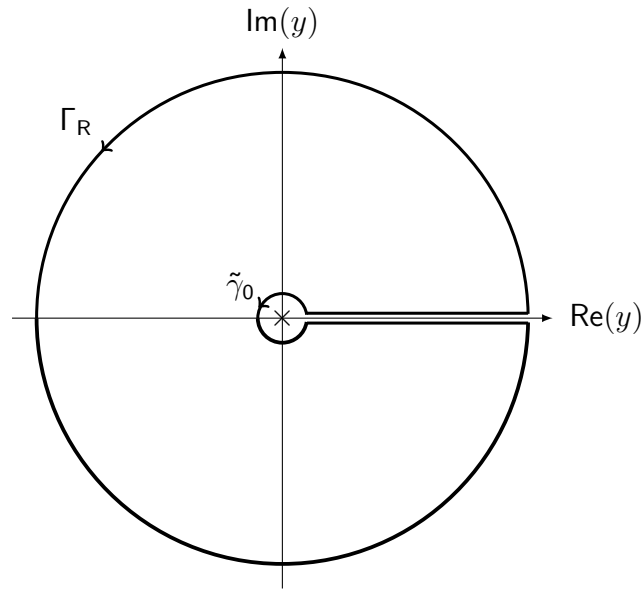


Figure 3.3 – Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'oscillateur harmonique dans le plan complexe $y = 1/x$.

obtient le système d'équations algébriques suivant

$$b_k = 0 \quad (k \neq 1) \quad (3.21a)$$

$$b_1^2 = -m^2\omega^2 \quad (3.21b)$$

$$2a_0b_1 = 0 \quad (3.21c)$$

$$-i\hbar b_1 + 2a_1b_1 + a_0^2 = 2mE \quad (3.21d)$$

À partir des équations (3.21b) et (3.21c) on trouve que $b_1 = \pm im\omega$ et $a_0 = 0$. L'ambiguïté dans le signe dans l'expression du résidu b_1 peut être enlevée en appliquant la condition aux limites (3.7). En effet, dans la limite $y \rightarrow 0$ ($x \rightarrow \infty$), $p_c \approx \pm im\omega/y$. Par ailleurs, dans la convention suivie par Leacock et Padgett [11], la fonction moment classique est définie de telle sorte que $p_c(x, E) = +i|p_c|$ sur le demi-axe réel positif, autrement dit $p_c \approx +im\omega/y$. Il s'ensuit que, pour que la condition (3.7) soit satisfaite, le choix physiquement acceptable est $b_1 = +im\omega$. En substituant maintenant cette valeur du résidu dans l'équation (3.21d), il vient que

$$a_1 = \frac{2E - \hbar\omega}{2i\omega} \quad (3.22)$$

En fin, en combinant les équations (3.22), (3.20) et (3.16), il vient

$$J(E) = I_{\Gamma_R} = ia_1 = \frac{2E - \hbar\omega}{2\omega} = n\hbar \quad (3.23)$$

d'où nous déduisons l'énergie propre de l'énième état excité pour un oscillateur harmonique à une dimension

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (3.24)$$

qui est en parfait accord avec le résultat obtenu dans la chapitre précédent [voir la section §2.6] dans le cadre de la mécanique quantique conventionnelle.

3.5.2 Cas de l'atome d'hydrogène

On va appliquer à présent le formalisme décrit ci-dessus afin de calculer les énergie propres et les états stationnaires propres associés à l'atome d'hydrogène. On se limitera uniquement à la partie radiale de l'équation de Schrödinger, i.e,

$$\frac{d^2 R_{kl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{kl}(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R_{kl}(r) = 0 \quad (3.25)$$

où $R_{kl}(r)$ est la fonction d'onde radiale, $\mu \approx m_e$ est la masse réduite du système électron-proton et $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0$. En faisant le changement de variable $R_{kl}(r) = u_{kl}(r)/r$, l'équation de Schrödinger pour la fonction $u_{kl}(r)$ prend la forme suivante

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) \right] u_{kl}(r) = 0 \quad (3.26)$$

L'équation de Hamilton-Jacobi quantique en terme de la fonction $p(r, E)$ se déduit de celle de Schrödinger en cherchant une solution sous la forme

$$u_{kl}(r) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right), \quad \text{avec} \quad W = \exp\left(\int p dr\right) \quad (3.27)$$

Ce qui conduit à

$$p^2 - i\hbar p' = 2\mu \left(E + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) \quad (3.28)$$

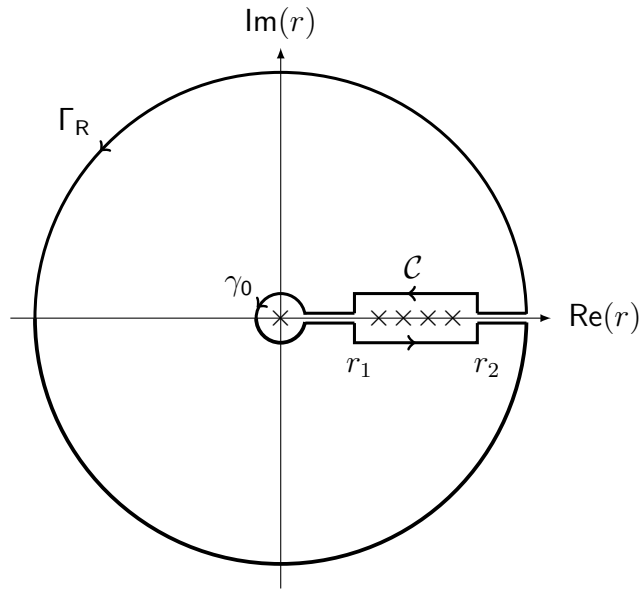


Figure 3.4 – Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'atome d'hydrogène dans le plan complexe r .

La fonction d'onde radiale $u_{kl}(r)$ devrait s'annuler à l'origine et, par conséquent, la fonction $p(r, E)$ possède une singularité fixe au point $r = 0$, en plus des n pôles mobiles situés sur l'axe des réels positifs. On suppose qu'il n'y a pas d'autres points singuliers dans le plan complexe, mis à part le point à l'infini qui est une singularité isolée de la fonction $p(r, E)$. Pour obtenir le spectre des énergies propres, on va procéder de la même manière que pour le cas de l'oscillateur harmonique, c'est-à-dire, en évaluant l'intégrale de l'action $J(E)$ comme suit

$$\begin{aligned} J(E) &= k\hbar = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}} p(r, E) dr \\ &= I_{\Gamma_R} - I_{\gamma_0} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_R} p(r, E) dr - \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_0} p(r, E) dr \end{aligned} \quad (3.29)$$

où Γ_R et γ_0 sont deux contours circulaires orientés dans le sens positif comme indiqué dans la figure (3.4). Γ_R englobe tous les pôles mobiles et fixes de $p(r, E)$, tandis que γ_0 renferme la singularité fixe au point $r = 0$. La relation (3.29) nous permet déduire, une fois que les intégrales figurant sur la droite ont été évalués, l'expression de l'énergie en terme des nombres quantiques n et l . Cela revient à calculer les résidus de la fonction $p(r, E)$ au point singulier $r = 0$ et à l'infini. Commençons par évaluer l'intégrale I_{γ_0} le long du contour γ_0 . Pour cela, considérons le développement en série de Laurent suivant

$$p(r, E) = \frac{b_1}{r} + \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^k \quad (3.30)$$

où b_1 est le résidu associé au point singulier $r = 0$. En substituant (3.30) dans (3.28) et en comparant les coefficients proportionnel à $1/r^2$, nous obtenons la quadrature suivante

$$b_1^2 + i\hbar b_1 + \hbar^2 l(l+1) = 0 \quad (3.31)$$

qui donne les deux valeurs pour b_1 suivantes :

$$b_1 = i\hbar l, \quad b_1 = -i\hbar(l+1) \quad (3.32)$$

Comme on s'y attendait, en raison de la nature quadratique de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique, on trouve bien deux valeurs pour le résidu b_1 . Maintenant pour pouvoir trancher et choisir parmi ces deux valeurs celle qui est physiquement correcte, on utilisera la condition aux limites (3.7), qui stipule qu'à la limite classique la fonction $p(r, E)$ doit tendre vers l'impulsion classique p_c . Par conséquent, on va d'abord devoir définir la fonction p_c qui est donnée, dans le plan complexe, par

$$p_c = \sqrt{2\mu \left(E + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right)} \quad (3.33)$$

ou, écrit autrement,

$$p_c = \pm \frac{i}{r} \sqrt{2\mu E \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu E} - \frac{\alpha r}{E} - r^2 \right)} \quad (3.34)$$

La fonction p_c possède donc deux branches dans le plan complexe. Celles-ci sont séparées par une coupure reliant les deux points tournants r_1 et r_2 (voir la figure (3.5)). Par conséquent, il faut choisir, à partir de (3.34), la branche de p_c qui répond à la définition proposée initialement par Leacock et Padgett [11]. Pour pouvoir le faire, on introduit les variables ρ_1 , θ_1 , ρ_2 et θ_2 telles que

$$r - r_1 = \rho_1 \exp(i\theta_1), \quad r - r_2 = \rho_2 \exp(i\theta_2), \quad (3.35)$$

où les angles θ_1 et θ_2 peuvent prendre toutes les valeurs comprises dans l'intervalle ouvert

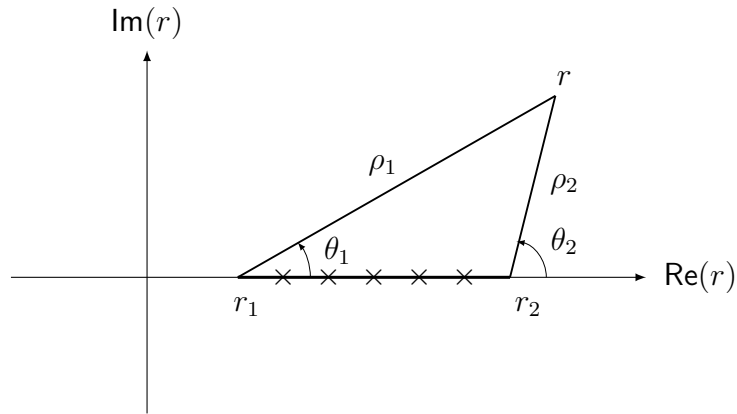


Figure 3.5 – Coupure reliant les deux points tournants r_1 et r_2 séparant les deux branches de la fonction p_c dans le plan complexe r .

$]0, 2\pi[$. Ainsi, on peut écrire p_c comme

$$p_c \sim \frac{i\lambda}{r} \sqrt{(r - r_1)(r - r_2)} \quad (3.36)$$

où $\lambda = \pm 1$ et en utilisant (3.35), p_c se met sous la forme

$$p_c \sim \frac{i\lambda}{r} (\rho_1 \rho_2)^{1/2} \exp\left(i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}\right) \quad (3.37)$$

On doit maintenant fixer le signe de λ qui, à son tour, fixe la branche de p_c à sélectionner. Pour cela, on considère un point qui se trouve juste en dessous de la coupure, donc la branche qui correspond à $\theta_1 \sim 2\pi$ et $\theta_2 \sim \pi$, ce qui donne

$$p_c \sim \frac{\lambda}{r} (\rho_1 \rho_2)^{1/2} \quad (3.38)$$

Par conséquent, pour que p_c soit positive juste en dessous de la coupure, on choisit $\lambda = +1$. Ainsi, on obtient la définition de p_c dans l'ensemble du plan complexe comme

$$p_c = \frac{ia}{r} (\rho_1 \rho_2)^{1/2} \exp\left(i \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}\right) \quad (3.39)$$

où a est une constante positive et $(\theta_1, \theta_2) \in]0, 2\pi[$. Avec la définition complète, ci-dessus, de la fonction p_c , on peut procéder à présent au calcul de son résidu au point singulier $r = 0$, et en comparant le résultat obtenu avec les deux valeurs du résidu de la fonction moment quantique associé au même point singulier, on va pouvoir fixer la valeur correcte

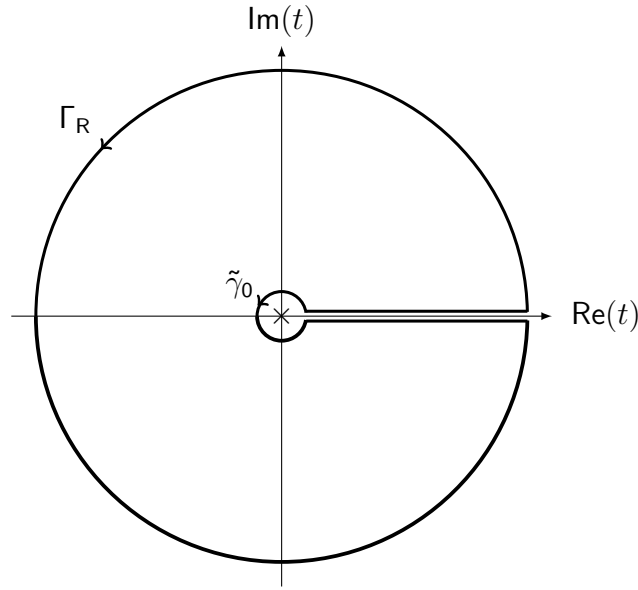


Figure 3.6 – Contour pour l'évaluation de l'intégrale de l'action $J(E)$ dans le cas de l'atome d'hydrogène dans le plan complexe $t = 1/r$.

de b_1 . En effet, à l'origine $r = 0$, on a $\theta_1 \rightarrow \pi$ et $\theta_2 \rightarrow \pi$. En substituant ça dans l'expression (3.39), on peut déduire le résidu de la fonction p_c au point $r = 0$ qui vaut : $-ia(r_1 r_2)^{1/2}$. En comparant maintenant ce dernier résultat avec les valeurs de b_1 données par (3.32), on constate que le signe de la partie imaginaire doit être négatif pour que la condition aux limites (3.7) soit satisfaite. Par conséquent, on doit choisir

$$b_1 = -i\hbar(l+1) \quad (3.40)$$

et l'intégrale I_{γ_0} donne

$$I_{\gamma_0} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_0} p(r, E) dr = \frac{1}{2\pi} (2\pi i b_1) = \hbar(l+1) \quad (3.41)$$

Pour évaluer l'intégrale I_{Γ_R} le long du contour fermé Γ_R , introduisons la nouvelle variable $t = 1/r$. Il vient

$$I_{\Gamma_R} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\tilde{\gamma}_0} \frac{\tilde{p}(t, E)}{t^2} dt \quad (3.42)$$

où $\tilde{p}(t, E) = p(1/t, E)$ et le contour $\tilde{\gamma}_0$, orienté dans le sens positif, renferme un seul point singulier dans le plan complexe t , c'est-à-dire le pôle au point $t = 0$, comme le montre la

figure (3.6). L'équation de Hamilton-Jacobi quantique (3.28) se réécrit, par rapport à la variable t , de la sorte

$$\tilde{p}^2 + i\hbar t^2 \frac{d\tilde{p}}{dt} = 2\mu \left(E + \alpha t - \frac{\hbar^2 l(l+1)t^2}{2\mu} \right) \quad (3.43)$$

Pour calculer la contribution du pôle au point $t = 0$, la fonction $\tilde{p}(t, E)$ est développée en série de Laurent autour du point singulier comme suit

$$\tilde{p}(t, E) = \sum_{k=1}^m \frac{b_k}{t^k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k \quad (3.44)$$

En substituant ce développement dans l'équation (3.42), il est facile de montrer que la seule contribution non nulle provient du terme linéaire en t , i.e.,

$$I_{\Gamma_R} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\tilde{\gamma}_0} \frac{\tilde{p}(t, E)}{t^2} dt = ia_1 \quad (3.45)$$

Par ailleurs, en substituant le développement (3.44) dans l'équation de Hamilton-Jacobi quantique (3.43) et en comparant les coefficients des différentes puissances en t , on obtient le système d'équations algébriques suivant

$$b_k = 0, \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (3.46a)$$

$$a_0^2 = 2\mu E \quad (3.46b)$$

$$a_0 a_1 = \mu \alpha \quad (3.46c)$$

En combinant maintenant les équations (3.46a) et (3.46b), on trouve que $a_1 = \pm \alpha \sqrt{\mu/2E}$, et par conséquent, d'après (3.45), on aura

$$I_{\Gamma_R} = ia_1 = \pm i\alpha \sqrt{\frac{\mu}{2E}} \quad (3.47)$$

En fin, en substituant (3.47) et (3.41) dans (3.29) et en réarrangeant les différents termes, on déduit l'expression des valeurs propres de l'énergie quantifiées de l'atome d'hydrogène donnée par

$$E_n = -\frac{\mu\alpha^2}{2n^2\hbar^2}, \quad \text{avec } n = k + l + 1 \quad (3.48)$$

Nous pouvons aboutir au même résultat en faisant appel à une autre méthode, qui est due à Kapoor et ses collaborateurs [16]-[19] et, qui se base encore sur le formalisme de Hamilton-Jacobi et les mêmes ingrédients mathématiques, à savoir, le calcul des résidus associés aux singularités de la fonction moment quantique $p(r, E)$. L'avantage de cette nouvelle méthode est qu'elle permet, en plus de calculer les énergies propres, de déduire aussi les fonctions propres pour les états liés. Jusqu'ici, on sait que p est une fonction méromorphe et possède les singularités mentionnés ci-dessus. Ce qui permet de l'écrire sous la forme suivante

$$p = \sum_{m=1}^k \frac{-i\hbar}{r - r_m} + \frac{b_1}{r} + Q(r) \quad (3.49)$$

où le premier terme représente la somme de toutes les parties principales provenant de tous les développements de Laurent individuels de la fonction p pris autour de chaque pôle mobile, avec $-i\hbar$ comme résidu ; le deuxième terme représente la partie principale dans le développement de Laurent de la fonction p autour du point $r = 0$, avec b_1 comme résidu ; et le troisième terme représente la partie régulière de la fonction p . Comme $Q(r)$ est fonction entière et bornée à l'infini ($p \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow \infty$), alors, d'après le théorème de Liouville [voir appendice C], celle-ci est constante. Par conséquent, l'équation (3.29) se réécrit comme

$$p = \sum_{m=1}^k \frac{-i\hbar}{r - r_m} - \frac{i\hbar(l+1)}{r} + C \quad (3.50)$$

où C est une constante dont la valeur sera fixée ci-après. La somme qui figure dans le premier terme peut être mise sous la forme polynômiale suivante

$$\sum_{m=1}^k \frac{-i\hbar}{r - r_m} = -i\hbar \frac{P'_k(r)}{P_k(r)} \quad (3.51)$$

où $P_k(r)$ est un polynôme d'ordre k , et l'expression de la fonction $p(r, E)$ sera donnée par

$$p = -i\hbar \frac{P'_k(r)}{P_k(r)} - \frac{i\hbar(l+1)}{r} + C \quad (3.52)$$

En substituant maintenant cette dernière expression dans l'équation (3.28), on obtient

$$\frac{P''_k(r)}{P_k(r)} + \frac{2iC}{\hbar} \left(\frac{P'_k(r)}{P_k(r)} + \frac{l+1}{r} \right) + \frac{2(l+1)}{r} \frac{P'_k(r)}{P_k(r)} - \frac{C^2}{\hbar^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 r} = 0 \quad (3.53)$$

Maintenant, pour accéder aux énergies propres, il suffit de calculer la valeur de la constante C en examinant le comportement de chaque terme dans la dernière équation lorsque $r \rightarrow \infty$. Noter que, pour des grandes valeurs de r ,

$$\frac{P''_k(r)}{P_k(r)} \sim \frac{k(k-1)}{r^2}, \quad \frac{P'_k(r)}{P_k(r)} \sim \frac{k}{r} \quad (3.54)$$

En substituant celles-ci dans l'équation (3.53) et en comparant les différents coefficients constants, d'une part, et les coefficients proportionnels à $1/r$, d'autre part, on aura

$$C = i \frac{\mu\alpha}{(k+l+1)\hbar}, \quad \text{et} \quad C^2 = 2\mu E \quad (3.55)$$

respectivement. En fin, en combinant ces deux dernières relations, on retombe sur la même expression du spectre des énergies de l'atome d'hydrogène donnée par (3.48). En remplaçant maintenant, dans (3.53), la constante C par sa valeur, il en reste une équation différentielle pour le polynôme $P_k(r)$ qui s'écrit

$$P''_k(r) + \left(\frac{2(l+1)}{r} - \lambda \right) P'_k(r) + \frac{\lambda k}{r} P_k(r) = 0, \quad \text{où} \quad \lambda = \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2(k+l+1)} \quad (3.56)$$

En introduisant le changement de variable $\rho = \lambda r$, celle-ci peut se mettre sous la forme

$$\rho P''_k(\rho) + \left((2l+1) + 1 - \rho \right) P'_k(\rho) + k P_k(\rho) = 0 \quad (3.57)$$

qui est bien l'équation différentielle de Laguerre où le polynôme $P_k(\rho)$ correspond au polynôme de Laguerre généralisés, noté $L_k^{(2l+1)}(\rho)$ [voir appendice B]. Les fonctions propres associés aux états propres sont obtenues en utilisant (3.27), qui donne

$$u_{kl}(r) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dr\right) \quad (3.58)$$

En remplaçant la valeur de p dans l'équation ci-dessus par (3.52) et en changeant la

variable r en ρ , nous obtenons les fonctions d'onde en termes de ρ comme

$$u_{kl}(\rho) = \rho^{l+1} \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L_k^{(2l+1)}(\rho) \quad (3.59)$$

qui correspond bien au résultat connu. En fin, il faut rappeler qu'il n'est pas toujours facile d'implémenter la condition aux limites (3.7). Ainsi, pour restreindre le choix des résidus aux pôles fixes, des contraintes supplémentaires seront imposées. Par exemple, il y a le fait que la fonction d'onde doit être finie partout pour les valeurs physiques de x , et qui doit s'annuler à l'infini. Il faut aussi noter que, pour les deux exemples étudiés ci-dessus, la fonction moment quantique est une fonction rationnelle et, par conséquent, la condition de quantification exacte devient équivalente à imposer que la somme de tous les résidus de la fonction moment quantique, y compris à l'infini, soit égal à zéro.

Conclusion

Notre travail théorique a été consacré à l'étude des états liés d'un système quantique à une dimension dans le cadre du formalisme de Hamilton-Jacobi quantique.

Le premier chapitre a été dédié aux rappels sur le formalisme de Hamilton et le formalisme de Hamilton-Jacobi. On a d'abord introduit la fonction de Hamilton d'un système mécanique à plusieurs degrés de liberté, déduite à partir de la fonction de Lagrange en opérant une transformation de Legendre, puis établi les équations canoniques du mouvement régissant sa dynamique dans l'espace des phases. On a ensuite réécrit ces dernières sous une forme simple et symétrique en introduisant la notion de crochets de Poisson. On a, par la suite, introduit les transformations canoniques qui consistent à effectuer un changement de variables dans l'espace des phases tout en préservant l'aspect canonique des équations du mouvement. En fin du chapitre, on a exposé en détail la méthode de Hamilton-Jacobi qui consiste à chercher une transformation canonique particulière qui conduit à des nouvelles équations du mouvement ayant une forme triviale. En particulier, on s'est intéressé à la technique des variables angles-actions qui présente un atout majeur dans l'étude des caractéristiques des mouvements périodiques ou pseudo-périodiques. En effet, cette dernière technique permet d'accéder directement aux fréquences d'oscillation ou de rotation d'un système mécanique sans passer par la résolution complète des équations canoniques du mouvement.

Au cours du deuxième chapitre, on s'est intéressé à la nouvelle mécanique de l'atome et de son développement chronologique. On a commencé par faire un bref rappel sur l'ancienne théorie des quantas en mettant en exergue son caractère heuristique, ainsi que ses limites et son échec à se rendre compte de plusieurs phénomènes atomiques comme : le spectre des atomes complexes, l'effet Zeeman, etc. Par la suite, on a introduit les deux approches modernes de la mécanique quantique, à savoir l'approche de Heisenberg et celle de Schrödinger, où on a présenté les divers concepts et principes de base que celles-ci

mettent en jeu. À la fin, on a présenté une étude quantitative d'un oscillateur harmonique quantique dans le cadre la mécanique ondulatoire. L'accent a été mis en particulier sur le théorème des nœuds qui sera à la base d'une nouvelle formulation de la mécanique quantique dans le cadre du formalisme de Hamilton-Jacobi.

Le troisième et dernier chapitre de ce mémoire a été consacré à l'obtention des énergies et fonctions propres des états liés d'un système quantique à une dimension en utilisant le formalisme de Hamilton-Jacobi quantique. On a d'abord défini la fonction moment quantique, l'analogue quantique de la fonction moment classique, puis établi une équation dynamique décrivant son évolution dans le temps. Celle-ci prend la forme d'une équation de Riccati. Elle a été déduite directement de l'équation de Hamilton-Jacobi quantique. On a vu aussi que la fonction moment quantique représente l'entité centrale dans cette nouvelle formulation de la mécanique quantique. En effet, la nature singulière de cette dernière et le calcul des résidus associés à ces singularités représentent les ingrédients essentiels requis dans ce présent formalisme. On a, par la suite, déduit une règle de quantification exacte sur la variable action quantique en prenant l'intégrale de la fonction moment quantique, sur un contour fermé dans le plan complexe, et dont les propriétés sont obtenues en la reliant directement à la fonction d'onde de Schrödinger. En effet, les zéros de la fonction d'onde des états liés correspondent aux pôles de la fonction moment quantique appelés pôles mobiles. Par ailleurs, le calcul des résidus associés aux autres singularités de la fonction moment quantique, dites fixes, a permis d'obtenir, d'une manière simple et élégante, les énergies propres des états liés dans le cas l'oscillateur harmonique à une dimension. En fin, on a décrit en détail comment utiliser ce présent formalisme pour obtenir les énergies et les fonctions propres des états liés dans le cas de l'atome d'hydrogène.

Les perspectives de ce présent mémoire sont nombreuses, on se propose à l'avenir de généraliser, d'une part, l'étude faite dans le dernier chapitre à trois dimensions et, d'autre part, considérer d'autres potentiels atomiques comme : le potentiel de Morse, le potentiel de Scarf, etc.

A

Transformation de Legendre

On peut passer d'un choix de variables indépendantes à un autre à l'aide de la transformation connue en mathématiques sous le nom de transformation de Legendre. Pour simplifier, considérons une fonction réelle à deux variables $f(x, y)$. Sa différentielle totale s'écrit

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (\text{A.1})$$

où x et y sont les variables linéairement indépendantes de la fonction $f(x, y)$. La transformation de Legendre permet de définir une nouvelle fonction $g(x, z)$ dépendante de x et z de la sorte

$$z = \frac{\partial f}{\partial y} \quad (\text{A.2})$$

$$g(x, z) = zy - f(x, y) \quad (\text{A.3})$$

Pour montrer que la nouvelle fonction g , telle qu'elle est définie, dépend effectivement de x et z , il suffit de chercher sa différentielle totale :

$$\begin{aligned} dg &= zdy + ydz - df \\ &= -\frac{\partial f}{\partial x} dx + ydz \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

À partir de cette dernière écriture, on constate que les variables indépendantes de la fonction g sont x et z . Cependant, on peut remarquer que dans la définition de la fonction $g(x, z)$ figure encore la variable y , alors qu'on vient de montrer que celle-ci dépend

seulement de x et z . La question qui se pose est la suivante : comment faire disparaître la variable y qui figure dans l'expression de g ? La réponse est simple : c'est à partir de la définition de la variable z , i.e. l'équation (A.2). Cette équation peut toujours être inversée de sorte à exprimer la variable y en fonction de x et z , i.e. $y = y(x, z)$, et la remplacer dans l'équation (A.3) pour avoir :

$$g(x, z) = y(x, z)z - f(x, y(x, z)) \quad (\text{A.5})$$

B

Polynômes de Hermite et de Laguerre

Les polynômes de Hermite $H_n(x)$ et de Laguerre $L_n(x)$ sont définis respectivement par

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.1})$$

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.2})$$

Les premiers polynômes de Hermite et de Laguerre sont donnés par

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 & L_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x & L_1(x) &= -x + 1 \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 & L_2(x) &= \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2) \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x & L_3(x) &= \frac{1}{6}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6) \end{aligned}$$

Ces derniers forment une famille orthogonale pour le produit scalaire, c'est-à-dire qu'ils vérifient respectivement

$$\langle H_n, H_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} \quad (\text{B.3})$$

$$\langle L_n, L_m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} L_n(x) L_m(x) e^{-x} dx = \frac{\Gamma(n+1)}{n!} \delta_{nm} \quad (\text{B.4})$$

et ils vérifient aussi les relations de récurrence d'ordre 2 suivantes

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (\text{B.5})$$

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (-x+2n+1)L_n(x) - nL_{n-1}(x) \quad (\text{B.6})$$

Par ailleurs, les polynômes $H_n(x)$ sont solution de l'équation différentielle, dite équation de Hermite, suivante

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + 2nH_n(x) = 0 \quad (\text{B.7})$$

et les polynômes $L_n(x)$ sont solution de l'équation différentielle, dite équation de Laguerre, suivante

$$xL_n''(x) + (1-x)L_n'(x) + nL_n(x) = 0 \quad (\text{B.8})$$

C

Théorèmes de Liouville et de Sturm-Liouville

Théorème 1 (Théorème de Liouville). *Une fonction $f(z)$ holomorphe dans tout le plan complexe et bornée est constante.*

Démonstration. Soit $f(z)$ est une fonction entière. Elle est dite bornée si seulement si : $\forall z \in \mathbb{C}, \exists M \in \mathbb{R}^+$ tel que $|f(z)| \leq M$. Soit z_0 un point de \mathbb{C} et soit γ un cercle de centre z_0 et de rayon R alors, d'après la formule intégrale de Cauchy, on a

$$f'(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{f(z)}{(z - z_0)^2} dz \implies |f'(z_0)| \leq \frac{1}{2\pi} \frac{M}{R^2} 2\pi R = \frac{M}{R} \quad (\text{C.1})$$

En faisant tendre R vers $+\infty$ on montre que $|f'| = 0$ donc que la fonction $f(z)$ est constante [20]. □

Théorème 2 (Théorème d'oscillation de Sturm-Liouville). *Soient $E_0 < E_1 < \dots$, les valeurs propres de l'opérateur $H \equiv -d^2/dx^2 + V(x)$ sur $L^2(0, a)$ avec les conditions aux limites $u(0) = u(a) = 0$, alors $u(x, E_n)$ a exactement n zéros dans $[0, a]$. Le nombre de valeurs propres de H strictement en dessous de E est exactement le nombre de zéros de $u(x, E)$ dans $[0, a]$.*

Démonstration. Voir la référence [21] (pages 35 et 36). □

Bibliographie

- [1] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko, *Classical Mechanics*, Addison Wesley, third edition, 2000.
- [2] M. G. Calkin, *Lagrangian and Hamiltonian Mechanics*, World Scientific Publishing, 1998.
- [3] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Singapore, 1986.
- [4] C. Grosche and F. Steiner, *Handbook of Feynmann's Path Integrals*, Springer-Verlag, New York, 1998.
- [5] L. Infeld and T. E. Hull, *Rev. Mod. Phys.* **23**, 21 (1951).
- [6] A. S. Focas, *J. Math. Phys.* **152**, 203 (1980).
- [7] R. Dutt, A. Khare, and U. Shukhatme, *J. Math. Phys.* **56**, 163 (1988).
- [8] F. Cooper, A. Khare, and U. Shukhatme, *Phys. Rep.* **251**, 267 (1995).
- [9] F. Cooper, A. Khare, and U. Shukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore, 2001.
- [10] D. F. Styer and al., *Am. J. Phys.* **70**, 288 (2002).
- [11] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Lett. B* **50**, 3 (1983).
- [12] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Rev. D* **28**, 2491 (1983).
- [13] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Phys. Rev. A* **33**, 2775 (1986).
- [14] R. A. Leacock and M. J. Padgett, *Am. J. Phys.* **55**, 261 (1986).
- [15] P. Boyle, W. Tian, and F. Guan, *J. Symbolic Comp.* **33**, 334 (2002).
- [16] R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, *Am. J. Phys.* **65**, 1187 (1997).
- [17] R. S. Bhalla, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, *Mod. Phys. Lett. A* **12**, 295 (1997).

-
- [18] K. G. Geojo, S. S. Ranjani, and A. K. Kapoor, *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, 4591 (2003).
- [19] S. S. Ranjani, K. G. Geojo, A. K. Kapoor, and P. K. Panigrahi, *Mod. Phys. Lett. A* **19**, 1457 (2004).
- [20] H. Cartan, *Théorie Élémentaires des Fonctions Analytiques*, Hermann, éditeurs des sciences et des arts, Paris, 1995.
- [21] E. L. Ince, *Ordinary Differential Equations*, Dover Publications, Inc, New York, 1956.