FORME LAGRANGIENNE DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

I - INTRODUCTION

Les Postulats de la Mécanique Quantique.

Les postulats de la mécanique quantique sont de deux natures essentiellement différentes :

a) Les postulats généraux : ce sont les postulats fondamentaux, qui sont communs à tous les exposés de la mécanique quantique :

1°) Principe de superposition : les états d'un système physique sont linéairement superposables : si $|\psi_1>$ et $|\psi_2>$ sont deux états du système, $\lambda_1 |\psi_1> + \lambda_2 |\psi_2>$ représente également un état du système (λ_1, λ_2 complexes).

Rappelons en fait que les états physiques sont représentés par des vecteurs d'un espace de Hilbert. Les grandeurs physiques sont alors représentées par des opérateurs hermitiques à spectre complet (observables) de cet espace. Les $|U_n>$ étant les vecteurs propres (de valeur propre a_n) de l'observable A :

$$A |U_n> = a_n |U_n> \quad ,$$

il existe entre les $|U_n>$ les relations d'orthogonalité et de fermeture :

$$<U_n | U_{n'}> = \delta_{nn'}$$

$$\sum_n |U_n> <U_n| = 1.$$

2°) Caractère probabiliste : le système physique étant dans l'état $| \psi >$, le résultat de la mesure d'une grandeur physique représentée par l'observable A ne peut être que l'une des valeurs propres a_n de A et la probabilité pour que ce résultat soit a_n est $| < U_n | \psi > |^2$, carré du module de l'amplitude de probabilité $< U_n | \psi >$.

b) Les postulats de quantification : pour trouver les observables associées aux grandeurs physiques, les relations de commutation entre ces observables et l'équation d'évolution des vecteurs d'état et des observables, on fait appel aux postulats de quantification. Ceux-ci peuvent prendre une forme différente d'un exposé à l'autre de la mécanique quantique. On leur impose toutefois une condition : si on quantifie un système classique, on doit retrouver les propriétés classiques à la limite où l'on fait tendre $\hbar$ vers zéro. Les postulats de quantification doivent ainsi traduire une certaine analogie entre les mécaniques classique et quantique .

Avant de passer en revue différents formalismes possibles de quantification, revoyons rapidement les formes que peut prendre la mécanique classique.

Les différentes formes de la mécanique classique.

a) La forme Newtonienne : elle est basée sur l'équation fondamentale de la dynamique, $\vec{F} = m\vec{\gamma}$.

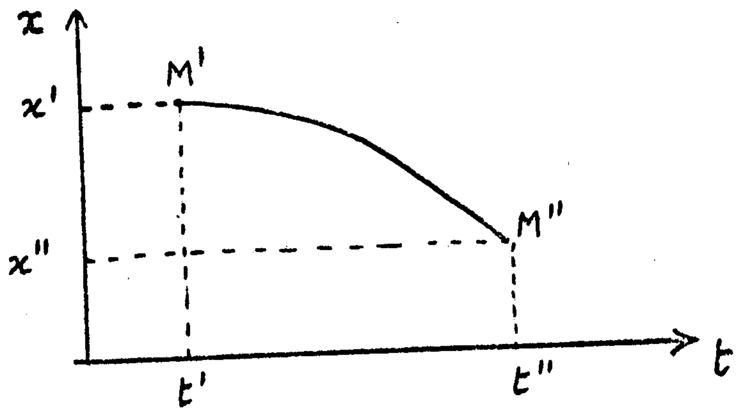
b) La forme Lagrangienne : on définit pour chaque système un lagrangien, fonction des "coordonnées généralisées" q et de leur dérivée par rapport au temps. Dans le cas d'une particule définie par ces coordonnées q = x, dans un potentiel V(x), le lagrangien s'écrit

$$\mathcal{L} \left[x(t), \dot{x}(t) \right] = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x)$$

A partir du lagrangien, on construit l'action

$$S = \int_{t'}^{t''} \mathcal{L}\left[x(t), \dot{x}(t) \right] dt$$

Parmi toutes les trajectoires x(t) possibles entre un point x' à l'instant t' et un point x" à l'instant t", la trajectoire <u>réellement</u> suivie sera celle qui rend l'action <u>S stationnaire</u>. C'est le principe variationnel de Hamilton ou de moindre action. On déduit de ce principe les équations de Lagrange, système d'équations différentielles du second ordre, et on montre l'équivalence avec le principe fondamental de la dynamique newtonienne.



c) <u>La forme Hamiltonienne</u> : l'évolution du système est décrite à l'aide de la fonction de Hamilton des coordonnées q et des "moments conjugués" $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$, H (p, q).

La trajectoire se détermine à l'aide des équations canoniques

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad ; \quad \frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

qui sont du premier degré.

C'est en général à partir de cette dernière forme que l'on bâti la mécanique quantique.

Forme habituelle des règles de quantification.

On part de la forme hamiltonienne de la mécanique classique et on postule (principe de correspondance) la relation entre commutateurs et crochets de Poisson :

$$[A, B] = i\hbar \{ A, B \}$$

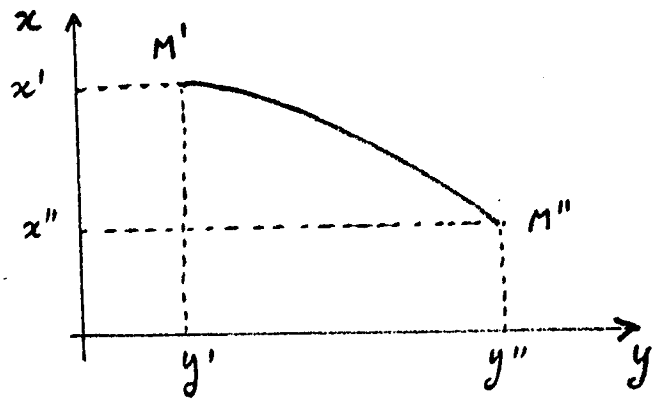
Rappelons que $\{ A, B \}$ = Crochet de Poisson = $\sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$.

On en déduit notamment les commutateurs fondamentaux $[q, p] = i\hbar$, l'équation de Schrödinger, etc.

Ce formalisme hamiltonien a l'avantage de se prêter aisément aux calculs. Cependant, la forme lagrangienne de la mécanique classique est plus fondamentale que la forme hamiltonienne : elle découle en effet d'un principe variationnel et peut ainsi se généraliser à tout système physique régi par un tel principe. Enfin, elle fait jouer au temps un rôle plus symétrique que la forme hamiltonienne, où le temps est très particularisé. Elle pourra donc prendre plus facilement une forme invariante relativiste. Il est donc intéressant de donner une règle de quantification de la mécanique lagrangienne. Pour bien comprendre le sens physique de cette règle, analysons d'abord le passage entre l'optique géométrique et l'optique ondulatoire :

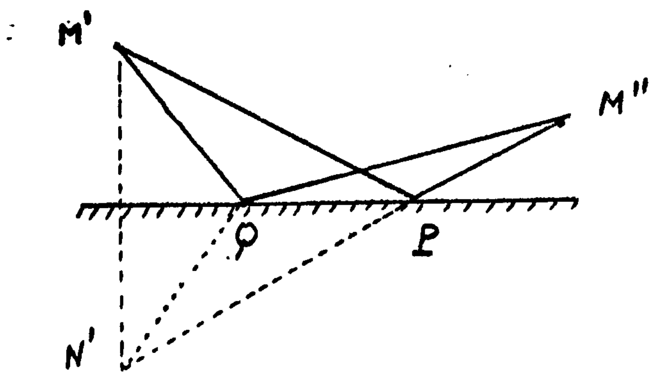
Passage de l'optique géométrique à l'optique ondulatoire.

L'optique géométrique est régie par le Principe de Fermat :



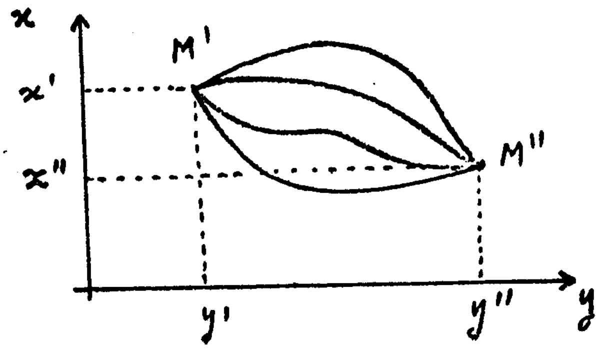
Le chemin suivi par la lumière de M' à M'' correspond au temps de parcours minimum; de façon plus précise, il correspond à un temps stationnaire, c'est-à-dire qu'une variation au premier ordre du chemin autour du chemin suivi entraîne une variation du temps au second ordre. Notons que les chemins en question ici sont des chemins d'espace ordinaire (décrits en xy) et non des chemins d'espace temps (décrits en xt) comme dans le principe de Hamilton.

Un exemple du principe de Fermat est fourni par les lois de la réflexion, le chemin $M'PM''$ suivi par la lumière entre M' et M'' étant extremum parmi tous les chemins $M'QM''$ possibles.



Une question importante se pose alors : comment le rayon lumineux trouve-t-il le chemin de temps stationnaire ? La réponse vient du caractère ondulatoire de la lumière qui lui permet de "sentir" tous les chemins possibles.

L'optique ondulatoire peut se résumer dans le Principe d'Huyghens : Soit $\phi\ (M'', M')$ l'amplitude de l'onde lumineuse issue de M' et arrivant en M'' (l'intensité de l'onde est alors $|\ \phi\ (M'', M')\ |^2$). Le principe d'Huyghens dit que $\phi\ (M'', M')$ est une somme de contributions,



une pour chaque chemin partant de M' et arrivant en M". La contribution de chaque chemin est un nombre complexe dont le module peut être considéré en première approximation comme constant et dont la phase est $2\pi i \dfrac{t_c}{T}$, t_c étant le temps mis pour parcourir le chemin en question et T la période de vibration :

Par exemple, dans le cas de la réflexion, le chemin M'QM" contribue à ϕ (M", M') par le terme $e^{2\pi i \frac{M'Q + QM''}{cT}} = e^{2\pi i \frac{M'Q + QM''}{\lambda}}$ (λ : longueur d'onde).

Dans le cas limite où toutes les dimensions sont grandes devant la longueur d'onde λ (mathématiquement $T \to 0$ ou encore $\lambda = cT \to 0$), d'un chemin à l'autre la phase varie très vite. Les seuls chemins dont les contributions ne se détruisent pas par interférence, sont ceux pour lesquels la phase est stationnaire (c'est-à-dire ceux pour lesquels une variation du chemin au premier ordre entraîne une variation de phase au deuxième ordre). Tout se passe comme si on pouvait ignorer tous les chemins autres que les chemins de phase stationnaire, c'est-à-dire de temps stationnaire. Physiquement, cela veut dire que rien n'est changé à l'amplitude ϕ (M", M') si on interpose un écran qui cache les chemins non stationnaires, à condition que le diaphragme ait des <u>dimensions grandes</u> devant λ. Tout se passe donc alors comme si la lumière suivait les chemins du <u>principe de Fermat</u>.

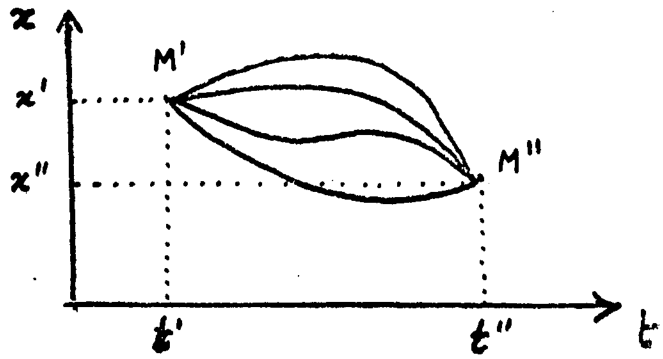
Le Principe de Huyghens contient donc le principe de Fermat à la limite où $\lambda \to 0$.

Dans le cas où λ ne peut être considéré comme négligeable, l'optique géométrique ne <u>s'applique plus</u> et les phénomènes doivent être décrits à l'aide du principe d'Huyghens : c'est le cas des expériences de diffraction.

Le passage de la mécanique classique à la forme lagrangienne de la mécanique quantique repose sur la même idée de base.

Idée de base de la formulation lagrangienne de la mécanique quantique.

La mécanique classique est basée sur le principe de Hamilton : le chemin $x(t)$ suivi par la particule correspond à l'action stationnaire (remarquons que nous raisonnons à nouveau dans l'espace temps (x, t) et non plus dans l'espace ordinaire $(x\ y)$).



Comment la particule trouve-t-elle le chemin d'action minimum ? La réponse est fournie par la théorie quantique : elle "sent" les autres chemins grâce à son aspect ondulatoire.

Appelons $< x''t'' \mid x't' >$ l'amplitude de probabilité pour que la particule soit en x'' à l'instant t'' après avoir été en x' à l'instant t'. $< x''t'' \mid x't' >$ est une somme de contributions, une pour chaque chemin d'espace temps partant de $x't'$ et arrivant en $x''t''$. La contribution d'un chemin donné s'écrit : $N\ e^{2\pi i \frac{S}{h}}$. N est un coefficient de normalisation indépendant du chemin; S est l'action classique $\int_{t'}^{t''} L\ (x.\dot{x})\ dt$ calculée le long du chemin considéré, h la constante de Planck, qui a bien les dimensions d'une action (S/h est donc sans dimensions). C'est le principe de quantification de Feynman.

A la limite où $\hbar \to 0$, les seuls chemins qui contribuent à $< x''t'' \mid x't' >$ sans se détruire par interférence correspondent à une phase stationnaire, donc à une action stationnaire.

Le Principe de Feynman contient donc le principe de Hamilton à la limite où $\hbar \to 0$.

Il existe donc une analogie précise entre l'optique géométrique et la mécanique classique d'une part, l'optique ondulatoire et la mécanique quantique d'autre part, l'action remplaçant le temps et la constante de Planck la période de l'onde lumineuse.

On peut donc dire qu'une expérience de mécanique quantique est une expérience de diffraction dans l'espace-temps; toutes les propriétés ondulatoires de la matière apparaissent clairement dans cette formulation de la mécanique quantique, dont il reste encore à montrer qu'elle est bien équivalente aux autres.

Résumons, pour terminer, les avantages de ce nouveau point de vue :

1°) Il donne un sens physique plus clair à la correspondance entre la mécanique classique et la mécanique quantique.

2°) On raisonne dans l'espace-temps, ce qui permet un passage à la relativité très aisé : il suffit de remplacer dt par $d\tau$, τ étant le temps propre de la particule, et prendre pour Lagrangien L une fonction scalaire d'espace-temps. L'action $S = \int L \, d\tau$ est alors un scalaire et la théorie acquiert l'invariance relativiste.

Dans la formulation hamiltonienne au contraire, le temps est très privilégié et la covariance relativiste des équations n'est pas apparente.

3°) Le point de vue est plus global : au lieu de considérer des amplitudes de probabilité pour un état à un instant donné, on associe une amplitude de probabilité à une <u>histoire entière</u>, ou chemin, du système. Ce point de vue se révèle souvent plus fructueux et plus intéressant.

4°) Ce procédé est applicable à des systèmes autres que mécaniques, à la seule condition que leurs équations classiques découlent d'un <u>principe variationnel</u> : c'est le cas du champ électromagnétique dont les équations de Maxwell peuvent se déduire d'un Lagrangien et d'un principe d'action stationnaire.

La quantification se fait alors en associant à chaque histoire du champ une amplitude de probabilité proportionnelle à $e^{2\pi i \frac{S}{\hbar}}$.

On voit ainsi l'importance de ce formalisme en théorie quantique des champs