

Astérisque

JACQUES HARTHONG

**Le passage de la mécanique classique à la
mécanique ondulatoire (1977)**

Astérisque, tome 111 (1984), p. 27-51

http://www.numdam.org/item?id=AST_1984__111__27_0

© Société mathématique de France, 1984, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la collection « Astérisque » (<http://smf4.emath.fr/Publications/Asterisque/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

**LE PASSAGE DE LA
MECANIQUE CLASSIQUE
A LA
MECANIQUE ONDULATOIRE**

(1977)

LE PASSAGE DE LA MÉCANIQUE CLASSIQUE A LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE (1818-1927)

I. L'OPTIQUE ONDULATOIRE (FRESNEL 1818)

L'hypothèse de la nature ondulatoire de la lumière fut postulée pour la première fois par Huyghens. Elle consistait en ceci : une émission lumineuse n'est pas (contrairement aux idées de l'époque) un flux de particules projetées en ligne droite à partir de la source, mais une déformation périodique du milieu, qui se propage à la manière des ondes à la surface de l'eau. L'intensité lumineuse n'est pas un effet de la densité du flux de particules, mais de l'amplitude de la déformation. La nature de cette déformation restait toutefois très mystérieuse. Par contre sa grandeur (numérique), son élongation si vous préférez, comme fonction des coordonnées et du temps devait vérifier certaines lois de propagation. Or, Huyghens ne s'est pas contenté d'énoncer une hypothèse qualitative, il a énoncé un principe qui porte son nom et qui exprime quantitativement la propagation. Voici ce principe : désignons l'élongation par $\psi(x,t) = a(x)e^{i\varphi(x)} \cdot e^{i\omega t}$ (*). Cela décrit bien un mouvement périodique de fréquence ω : $a(x)$ est l'amplitude et $\varphi(x)$ la phase. Les points de l'espace qui sont "en phase" sont répartis sur des surfaces $\varphi(x) = C^{te}$. Le principe d'Huyghens dit alors que l'on peut obtenir l'élongation en un point de l'espace, disons x , par l'intégrale :

(*) Cette grandeur est complexe, ce qui est plus commode pour les calculs ; au sens strict, on prendra pour l'élongation proprement dite la partie réelle, ou imaginaire, au choix.

$$(1) \quad \Psi(t, x) = \frac{\omega}{2i\pi c} \int_{\Sigma} \frac{e^{i\omega(t - \frac{r(x, \alpha)}{c}) - i\varphi_0}}{r(x, \alpha)} dS(\alpha)$$

(intégration sur la surface d'onde $\Sigma : \varphi(x) = \varphi_0$; dS : mesure uniforme ;

$r(x, \alpha)$: distance de x au point α de la surface d'onde.)

C'est la formulation de FRESNEL. On peut l'interpréter comme une superposition d'ondes sphériques : une onde sphérique est la forme que prend la propagation de la lumière à partir d'une source ponctuelle ou à peu près, comme par exemple un électron lié dans un atome : elle s'exprime par l'élongation :

$$(2) \quad \Psi(x, t) = \frac{a}{|x|} e^{i\omega(t - \frac{|x|}{c})}$$

lorsque la source est à l'origine $x = 0$. Ainsi, le principe d'Huyghens dit que lorsqu'une onde se propage, tout se passe comme si une surface d'onde quelconque était constituée d'un continuum de sources ponctuelles équiréparties.

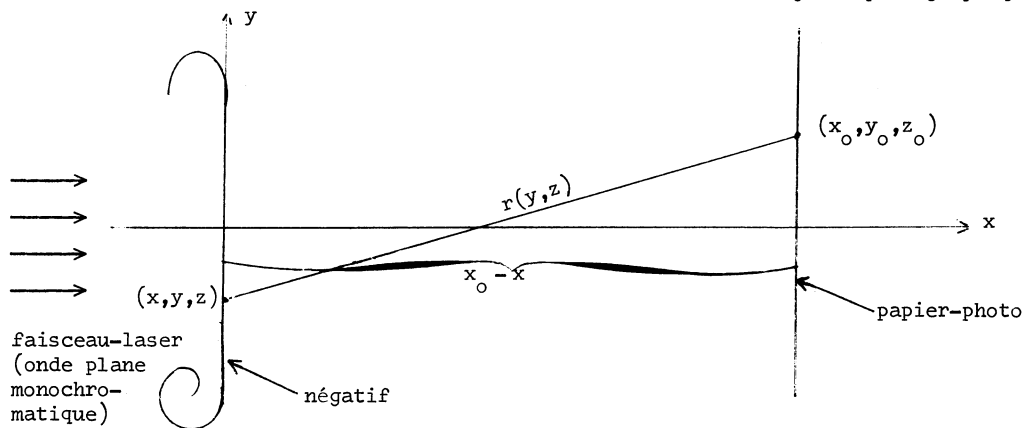
Il faut ici faire attention : par rapport à la théorie de Maxwell, qui explique la lumière comme un champ électromagnétique dans le vide, ce principe est très rudimentaire. La fonction d'onde (1) n'est qu'approximativement solution des équations de Maxwell et l'approximation est d'autant plus mauvaise qu'on est plus près d'une source (i.e. d'une charge en mouvement périodique) . Cela provient de ce que les charges électriques en mouvement périodique ne se contentent pas d'émettre ; elles sont affectées par le champ et vice-versa, effet qui est contenu dans les équations de Maxwell, mais pas dans le principe ci-dessus. De plus, l'approximation devient aussi mauvaise si les dérivées de l'amplitude a sont trop grandes.

Cela n'empêche pas que, historiquement, ce principe a joué un rôle considérable ; en effet, même très approximatif, il exprime mathématiquement la nature ondulatoire de la lumière et est totalement incompatible avec la théorie

corpusculaire : ainsi la répartition de l'intensité lumineuse derrière un objet opaque n'est pas simplement l'ombre, c'est-à-dire la projection de l'objet parallèlement aux rayons lumineux. Ce phénomène, appelé diffraction, fut expliqué par FRESNEL à partir du principe d'Huyghens, et sa mise en évidence expérimentale donna raison à ce dernier, donc à l'hypothèse ondulatoire (1818) .

Voyons cela sur un exemple simple, quelque peu modernisé par rapport à Fresnel.

On considère un faisceau-laser éclairant de face un négatif photographique.



On se propose d'appliquer, comme le fit Fresnel, le principe de Huyghens pour calculer l'onde lumineuse, c'est-à-dire la fonction $\psi(x, t)$ sur le papier-photo. Le faisceau-laser a été choisi parce qu'il donne l'onde la plus simple possible : l'onde plane monochromatique, où l'élongation est $\psi(x, t) = a e^{i\omega(t - \frac{x}{c})}$ avec a constant. Lorsque la lumière interagit avec le négatif, les électrons liés dans les atomes d'argent ou dans les molécules de celluloid réagissent par des émissions lumineuses. Immédiatement derrière le négatif, l'amplitude de ces émissions sera évidemment d'autant plus faible que le négatif est plus opaque au point considéré. Soit $a(y, z)$ la densité du négatif. La phase est modifiée, mais de façon négligeable vu la minceur du film.

On peut donc appliquer le principe d'Huyghens : sur le papier-photo, au point de coordonnées (x_0, y_0, z_0) , on a l'élongation approximative :

$$(3) \quad \psi(t, x_0, y_0, z_0) = \frac{\omega}{2i\pi c} \iint \frac{e^{i\omega(t - \frac{r(y,z)}{c}) - i\frac{\omega}{c}x}}{r(y,z)} a(y,z) dy dz$$

avec $r(y,z) = \sqrt{(x_0 - x)^2 + (y_0 - y)^2 + (z_0 - z)^2}$; l'approximation est d'autant meilleure que $|x_0 - x|$ est plus grand et que les dérivées de $a(y,z)$ sont plus petites : il ne faut pas de trop brusques variations de densité.

L'intégrale (3) ci-dessus est une intégrale oscillante ; on peut lui appliquer la méthode de la phase stationnaire : la phase $-(r(y,z) + x)$ n'a qu'un seul point critique, du type de Morse, qui est le point $y = y_0$, $z = z_0$; la valeur critique en ce point est $-x_0$ et le déterminant du hessien $(x_0 - x)^2$. On obtient donc pour $\frac{\omega}{c} \rightarrow \infty$:

$$\psi(t, x_0, y_0, z_0) = a(y_0, z_0) e^{i\omega(t - \frac{x_0}{c})} [1 + o(\frac{c}{\omega})]$$

Autrement dit, si $\frac{c}{\omega}$ est petit, l'amplitude de l'onde (et donc son carré, l'intensité) sont répartis selon la projection géométrique du négatif sur le papier parallèlement à la direction des rayons lumineux, c'est-à-dire ce que prévoyait la théorie corpusculaire. Cette situation asymptotique constitue l'optique géométrique, c'est-à-dire une description du phénomène qui se restreint exclusivement à l'étude des rayons lumineux, en négligeant les effets de diffraction.

Ici, quelques remarques s'imposent, afin de préciser la signification de tout cela. Nous venons de voir que le passage de la loi de Huyghens-Fresnel à l'optique géométrique se traduit mathématiquement par le principe de la phase stationnaire ; cela signifie que, conformément au principe d'Huyghens, le point (x_0, y_0, z_0) reçoit de la lumière de tous les points du plan du négatif. Mais comme d'après Huyghens, ce ne sont pas les intensités, mais les fonctions d'onde ψ qui s'ajoutent (on dit alors qu'elles interfèrent), elles vont s'annuler

mutuellement entre tous les points du négatif excepté le voisinage immédiat du point (x, y_0, z_0) . Par conséquent tout se passe comme si seul le point (x, y_0, z_0) envoyait de la lumière en (x_0, y_0, z_0) , ou si on préfère, tout se passe comme si la lumière se propageait le long des rayons lumineux, d'autant plus exactement que la fréquence ω est plus grande. Au contraire, si on calcule exactement l'intégrale (3) ou si on en fait un développement asymptotique à plusieurs termes, on obtient une amplitude a avec des interférences : tous les photographes ont pu observer les "anneaux" qui entourent parfois l'ombre d'un grain de poussière déposé sur le négatif, phénomène typiquement ondulatoire. Bien entendu, l'analyse que nous venons de faire s'applique à n'importe quel système optique comme on peut en trouver dans les agrandisseurs ; le choix du faisceau laser permettait seulement une étude mathématique particulièrement simple et ne change rien quant au principe.

II. ÉQUATION DES ONDES ET ÉQUATION EIKONALE.

Nous avons vu au chapitre I les idées essentielles des pionniers de l'optique ondulatoire : Huyghens et Fresnel. Mais notre histoire ne fait que commencer. Au XIX^e siècle, l'électromagnétisme a fait des progrès considérables dont l'aboutissement (provisoire bien évidemment) fut la théorie électromagnétique de Maxwell. Celle-ci a expliqué la lumière comme un champ électromagnétique, émis par des charges animées d'un mouvement périodique au sein de la source (matière incandescente). La théorie de Maxwell a codifié les lois de l'action réciproque des charges électriques en mouvement et des champs émis par elles en quatre équations. Il est inutile d'y insister ici, mais ce qui va nous intéresser au plus haut point, c'est l'équation qui codifie la loi de la propagation du champ dans le vide, loin de toute charge, l'équation bien connue des ondes :

$$(4) \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi = 0$$

que vérifie la fonction d'onde ψ . Là encore, il faut une précision : les équations de Maxwell expriment les lois de l'électromagnétisme, donc en particulier de la lumière, de façon infiniment plus élaborée que le principe d'Huyghens, et infiniment plus précise. Ainsi, elles tiennent compte de l'interaction de la lumière avec les électrons de la matière (par exemple celle du film). On aurait en principe la fonction d'onde exacte en tous les points de l'espace si on résolvait les équations de Maxwell pour toutes les particules chargées dans l'air, dans le celluloid, dans les grains d'argent etc.. Cela n'est évidemment qu'une pétition de principe. Mais on ne peut pas considérer que l'équation des ondes (4) donne la fonction d'onde exacte ; cela n'est vrai qu'asymptotiquement lorsque toutes les charges s'éloignent indéfiniment. Le lecteur doit être bien conscient qu'avec l'équation (4) nous avons un instrument plus sophistiqué que le principe d'Huyghens, mais qui reste une approximation.

Nous nous proposons maintenant de trouver une équation qui nous caractérise les rayons lumineux de l'optique géométrique : par exemple une équation dont les courbes intégrales soient les rayons. Pour cela, posons $\psi = ae^{i\varphi}$ et cherchons une équation que doit vérifier φ pour que ψ vérifie approximativement (4).

Nous partirons de la constation suivante :

$$(5) \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi = \left[\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} - \Delta a \right) + 2i \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial a}{\partial t} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \text{grad} a \cdot \text{grad} \varphi \right) + ia \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \Delta \varphi \right) - a \left(\frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right|^2 - |\text{grad} \varphi|^2 \right) \right] e^{i\varphi}$$

Tout d'abord, on vérifiera immédiatement que l'onde plane monochromatique du chapitre précédent vérifie l'équation des ondes ; en effet, dans ce cas φ est linéaire : $\omega t - k \cdot x$, où k est appelé le vecteur d'onde, tangent aux rayons lumineux et de module $\frac{\omega}{c}$. Dans ce cas φ vérifie l'équation

$$\frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right|^2 - |\text{grad} \varphi|^2 = \frac{\omega^2}{c^2} - |k|^2 = 0.$$

Nous avons vu au chapitre précédent en quoi consistait au juste l'optique géométrique pour une onde plane monochromatique ; or dans le cas général les fonctions a, ω, k sont variables, mais en tout point on a une onde plane monochromatique tangente, de fréquence $\omega = \frac{\partial \varphi}{\partial t}$, de vecteur d'onde $k = -\text{grad} \varphi$, et d'amplitude a . La fonction linéaire tangente, $\omega t - k \cdot x$, est très voisine de $\varphi(t, x)$ dans un voisinage suffisamment petit du point considéré. Pour que dans ce voisinage on puisse appliquer le raisonnement du chapitre précédent à l'onde plane tangente, il faut que l'amplitude a y varie très peu, tandis que $e^{i\varphi}$ effectue de nombreuses oscillations ; autrement dit, pour avoir l'optique géométrique, il faut que les dérivées de a soient petites, et que les dérivées de φ soient grandes. Dans ces conditions, le dernier terme du membre de droite dans (5) est dominant et par conséquent on aura $\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi = 0$ si et seulement si $\frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right|^2 - |\text{grad} \varphi|^2 = 0$. Autrement dit, dans la situation asymptotique qui constitue l'optique géométrique, l'équation des ondes se réduit à l'équation :

$$(6) \quad \frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right|^2 - |\text{grad} \varphi|^2 = 0$$

qu'on appelle équation eikonale (du grec *εἰκών*, image). Les rayons lumineux sont les courbes intégrales du champ de vecteurs $k(x) = -\text{grad} \varphi$. Or, il y a une ressemblance formelle assez frappante entre cette équation eikonale et une équation bien connue de la mécanique analytique : l'équation de Hamilton-Jacobi. Nous allons donc consacrer le chapitre suivant à un peu de mécanique analytique.

III. LA MÉCANIQUE ANALYTIQUE.

1. Une grandeur nommée action. Les progrès considérables du calcul infinitésimal pendant la fin du XVIII^e siècle et le début du XIX^e permirent une formulation des lois de la mécanique infiniment plus sophistiquée que du temps de Newton. Une manière de formuler ces lois de façon très condensée et très générale est d'utiliser un principe variationnel.

Cela avait déjà été fait par Fermat pour les lois de l'optique géométrique.

En 1850, Hamilton le fit pour les lois de la mécanique. Postuler un principe variationnel, cela consiste à affirmer que, de tous les comportements a priori possibles mathématiquement, la nature adopte toujours celui qui rend stationnaire (le plus souvent minimale) une certaine grandeur, définie par une intégrale. En quoi consiste donc le principe de Hamilton, ou principe de moindre action ?

Considérons dans l'espace de configuration d'un système $(= \mathbb{R}^n \times \mathbb{R})$ pour n degrés de liberté, plus le temps) un point initial (x_0, t_0) et un point final (x_1, t_1) . Soit γ un chemin, c'est-à-dire une application deux fois continûment dérivable de $[t_0, t_1]$ dans l'espace de configuration, tel que $\gamma(t_0) = x_0$ et $\gamma(t_1) = x_1$. On appelle action le long du chemin γ la valeur de l'intégrale :

$$S(\gamma) = \int_{t_0}^{t_1} L(t, \gamma(t), \gamma'(t)) dt$$

où L est une certaine fonction définie sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, caractéristique du système et appelée fonction de Lagrange ou lagrangien. De tous les itinéraires issus de x_0 à l'instant t_0 et aboutissant à x_1 à l'instant t_1 , celui qui est effectivement suivi par le système est celui qui rend stationnaire l'action ; autrement dit, celui qui annule la dérivée $dS(\gamma)^{(*)}$; ou encore, le point critique de $S(\gamma)$. Le théorème fondamental du calcul des variations permet d'exprimer cela sous la forme d'un système différentiel :

$$(7) \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\gamma}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial \gamma_i} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

où $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_n)$ (Equations de Lagrange) .

On obtient ainsi les équations du mouvement, pourvu qu'on sache associer à chaque système sa fonction de Lagrange. Voici des exemples :

(*) Pour définir la dérivée, il faut une norme sur l'espace (fonctionnel) des chemins : c'est la norme $|\gamma| = \left(\int_{t_0}^{t_1} |\gamma'(t)|^2 dt \right)^{\frac{1}{2}}$.

- pour un système de p particules de masses $m_1, \dots, m_p$ dont l'interaction est décrite par un potentiel U , l'espace de configuration est R^{3p} et la fonction de Lagrange

$$L(t, x_1, \dots, x_p, \dot{x}_1, \dots, \dot{x}_p) = \sum_{i=1}^p \frac{1}{2} m_i |\dot{x}_i|^2 - U(x_1, \dots, x_p)$$

(mécanique non relativiste). La Fonction de Lagrange est donc égale à l'énergie cinétique moins l'énergie potentielle.

- en mécanique relativiste, une particule de masse m et de charge e dans un champ électromagnétique de potentiel vecteur $A = (A_1, A_2, A_3)$ et de potentiel scalaire φ , lorsqu'on néglige le champ créé par la particule, est décrite dans l'espace de configuration R^3 par la fonction de Lagrange :

$$L(t, x, \dot{x}) = - mc^2 \sqrt{1 - \frac{|\dot{x}|^2}{c^2}} + \frac{e}{c} \dot{x} \cdot A(x) - e\varphi(x).$$

Si maintenant on considère uniquement les valeurs critiques de l'action, celles-ci ne dépendent plus que des points et instants initiaux et finaux. On peut fixer le point et l'instant initial et considérer l'action comme fonction du point final x et de l'instant final t . Ainsi :

$$(8) \quad S(x, t) = \int_{t_0}^t L(\tau, \gamma(\tau), \gamma'(\tau)) d\tau$$

où γ est le chemin effectué par le système, solution des équations de Lagrange.

2. Energie et impulsion.

On appelle énergie du système la quantité :

$$E = \sum_{i=1}^n \dot{x}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - L$$

En utilisant les équations de Lagrange, il est facile de voir que, au cours du mouvement, on a :

$$\frac{dE}{dt} = - \frac{\partial L}{\partial t}$$

Autrement dit, si L ne dépend pas du temps, E est une intégrale première des équations du mouvement. Calculons E dans le cas donné plus haut en exemple :

on avait $L(t, x, \dot{x}) = \sum_{i=1}^p \frac{1}{2} m_i |\dot{x}_i|^2 - U(x_1, \dots, x_p)$, d'où on déduit

$$E = \sum_{i=1}^p \frac{1}{2} m_i |\dot{x}_i|^2 + U(x_1, \dots, x_p) = \text{énergie cinétique} + \text{énergie potentielle}.$$

On appelle impulsion du système le vecteur de R^n dont les composantes sont :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}$$

Dans notre exemple avec $p = 1$ cela donne $p_i = m \dot{x}_i$ ($i = 1, 2, 3$).
 Pour deux particules de masses m_1 et m_2 ($p = 2$) cela donne
 $p_i = m_1 \dot{x}_i$ ($i = 1, 2, 3$) et $p_i = m_2 \dot{x}_i$ ($i = 4, 5, 6$). Dans notre deuxième exemple :

$$p_i = \frac{m \dot{x}_i}{\sqrt{1 - \frac{|\dot{x}|^2}{c^2}}} + \frac{e}{c} A_i(x) \quad i = 1, 2, 3$$

Remarque : dans tous ces cas il y a une relation polynômiale (à coefficients variables : ils dépendent de x) entre E et $(p_1, p_2, \dots, p_n)$

$$(9) \quad \begin{aligned} & - 1^{\text{er}} \text{ cas : } E - \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} - U(x) = 0 \\ & - 2^{\text{e}} \text{ cas : } E - \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m_1} - \frac{p_4^2 + p_5^2 + p_6^2}{2m_2} - U(x) = 0 \\ & - 3^{\text{e}} \text{ cas : } \frac{|E - e\phi(x)|^2}{c^2} - (p_1 - \frac{e}{c} A_1)^2 - (p_2 - \frac{e}{c} A_2)^2 - (p_3 - \frac{e}{c} A_3)^2 - m^2 c^2 = 0 \end{aligned}$$

Lorsque le champ électromagnétique est nul, c'est-à-dire dans le vide, cette dernière relation prend la forme très simple :

$$(9a) \quad \frac{E^2}{c^2} - |\mathbf{p}|^2 - m^2 c^2 = 0$$

On démontre en mécanique analytique les relations suivantes qui sont capitales (Jacobi - j'ignore la date exacte)

$$(10) \quad p_i = \frac{\partial S}{\partial x_i} \quad E = - \frac{\partial S}{\partial t}$$

S étant ici l'action en fonction des coordonnées et du temps comme en (8) .

Voir par exemple LANDAU-LIFCHITZ , Mécanique p. 190 .Or, en remplaçant dans (9a)

E et p par ces expressions, il vient :

$$(11) \quad \frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial S}{\partial t} \right|^2 - |\text{grad} S|^2 - m^2 c^2 = 0$$

(Equation de Hamilton-Jacobi relativiste pour une particule dans le vide) .

On obtiendrait dans tous les cas envisagés en (9) une équation de Hamilton-Jacobi exactement de la même manière.

Cette équation (11) de Hamilton-Jacobi est à rapprocher de l'équation eikonale : la ressemblance est frappante. Sont également à rapprocher les relations (10) ci-dessus et les relations analogues de l'optique géométrique :

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial x_i} \quad k_i = - \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}$$

$$E = - \frac{\partial S}{\partial t} \quad \omega = \frac{\partial \varphi}{\partial t}$$

Cette analogie entre l'optique géométrique et la mécanique analytique avait déjà été remarquée par Hamilton. Il avait comparé son principe de moindre action au principe de Fermat qu'on pourrait également nommer "principe de la moindre variation de phase" .

IV. LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE.

Ainsi, le parallèle que nous venons d'établir montre que la phase φ joue exactement en optique géométrique le même rôle que l'action en mécanique analytique. On peut donc utiliser cette correspondance : si on connaît une propriété en optique géométrique, on saura qu'on peut écrire la même propriété pour la mécanique analytique, en remplaçant simplement la phase par l'action, ou pour être plus général, par une quantité proportionnelle à l'action. De même en sens inverse. La correspondance s'exprime donc comme suit :

$$\begin{aligned} S &= - \hbar \varphi \\ (12) \quad E &= \hbar \omega \\ p_i &= \hbar k_i \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

où $\hbar$ est une constante de proportionnalité.

Formellement, on pourrait pousser l'analogie plus loin : nous avons vu au chapitre II comment l'équation eikonale se déduisait d'une équation aux dérivées partielles. Le même procédé formel peut donner l'équation de Hamilton-Jacobi (11) . La formule (5) et la correspondance (12) ci-dessus montrent immédiatement qu'il suffit de prendre l'équation aux dérivées partielles ("équation d'onde") :

$$(13) \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0$$

avec $\psi = a e^{\frac{i}{\hbar} S}$. On pourrait donc formuler l'hypothèse qu'au fond, les lois de la mécanique sont seulement des lois asymptotiques, comme l'optique géométrique. Comme cela a été vu au chapitre II, l'optique géométrique est une illusion qui provient de ce que ω est grand (de l'ordre de 10^{15} radians par seconde pour la lumière visible) . Les lois de la mécanique sont peut-être bien une illusion aussi, qui proviendrait de ce que l'énergie des systèmes mécaniques est trop grande pour laisser percevoir des phénomènes de diffraction.

Est-il alors possible de mettre en évidence expérimentalement, sur des systèmes dont l'énergie est la plus faible qu'on puisse observer, (exemple : l'électron : 1 électron-volt = 10^{-19} Joules) des phénomènes ondulatoires ? La réponse est oui. (expérience de C.J. DAVISSON et L.H. GERMER 1927) . Ainsi, pour que dans le mouvement d'un électron d'énergie 1 eV on puisse observer "autant" de phénomène ondulatoire que pour la lumière visible, il faudrait que la constante $\hbar$ soit de l'ordre de $\frac{10^{-19}}{10^{15}} = 10^{-34}$ J.s. Historiquement, cette constante fut connue avant les propriétés ondulatoires de l'électron. L'hypothèse selon laquelle la mécanique hamiltonienne est la situation limite d'une mécanique ondulatoire fut émise pour la première fois par Louis de Broglie ("Recherches sur la théorie des quanta" Thèse, Université de Paris 1924) et développée par Erwin Schrödinger ("Quantisierung als Eigenwertproblem" Annalen der Physik 79, 80, 81. (quatre articles) 1926) . On voit que cette hypothèse précéda l'expérience de DAVISSON et GERMER.

Je voudrais ici faire une remarque : plus haut, nous avons introduit cette hypothèse à partir d'une analogie ; la mécanique ondulatoire (l'équation (13)) était simplement le maillon manquant dans l'analogie optique-mécanique. Or, historiquement, l'émergence de cette hypothèse était inconcevable à partir de cette seule analogie ; pour que cette hypothèse fût viable, il fallait que l'analogie entre l'optique et la mécanique fût surdéterminée par autre chose : cette autre chose, ce fut la théorie des quanta et son explication des phénomènes surprenants observés dans l'émission et l'absorption de la lumière par les atomes. Et justement, à la base de cette théorie, il y avait une constante fondamentale dont la grandeur était de l'ordre de 10^{-34} J.s , la constante de Planck.

Voyons cela de plus près, sans entrer toutefois dans des détails trop techniques. Il s'agit du fait suivant : on avait observé que lorsque de la lumière avait traversé un corps, son spectre était entrecoupé de raies sombres, ce qui signifiait que le corps absorbait de la lumière, mais seulement à certaines fréquences dont l'ensemble était caractéristique pour chaque élément chimique.

A l'inverse, lorsque le même corps, chauffé, émettait de la lumière, on observait aux mêmes fréquences des raies brillantes. Les atomes n'émettaient ou n'absorbaient donc qu'à certaines fréquences, ce qui était en contradiction avec la théorie électromagnétique. En 1913, Bohr publia un article ("On the Constitution of Atoms and Molecules" Philosophical Magazine 26) où, reprenant la constante de Planck qui s'était déjà manifestée une première fois en 1900 dans un article de Planck sur le rayonnement du corps noir et une seconde fois en 1905 dans un article d'Einstein sur l'effet photoélectrique, il postula que dans les atomes les électrons ne peuvent avoir qu'un nombre fini d'états stationnaires (donc discrets) et que l'émission ou l'absorption de lumière provenait du passage d'un électron d'un de ces états à un autre. On pouvait ainsi comprendre le phénomène des raies. A partir de là, il apparaissait que le nombre N d'états stationnaires contenus dans un volume Δx (*) et dans un intervalle d'impulsion Δp était, pour $N \rightarrow \infty$, équivalent à $\frac{\Delta x \Delta p}{C^{\text{te}} \text{ de Planck}}$; or, cette formule asymptotique est à rapprocher d'une autre, bien connue, de l'optique : le nombre N d'états stationnaires (de fonctions propres) d'une onde électromagnétique dans une cavité de volume Δx , et dont les vecteurs d'onde sont dans l'intervalle Δk est équivalent, pour $N \rightarrow \infty$, à $\frac{\Delta x \Delta k}{2\pi}$ (**). A nouveau, on avait une analogie, qui permettait de deviner que la constante de proportionnalité $\hbar$ devait être égale à la constante de Planck divisée par 2π : $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34}$ J.s. Naturellement, il fallait attendre la preuve expérimentale, qui vint de Davisson et Germer, et tout ce qui suivit.

(*) Il faut préciser que, dans la théorie de Bohr, un électron dans un état stationnaire donné est localisé sur une orbite de dimension rigoureusement déterminée. Cela est faux en réalité, mais c'est cette erreur qui a permis d'identifier la constante $\hbar$.

(**) On aura reconnu là le célèbre résultat de Hermann Weyl sur le comportement asymptotique des valeurs propres du laplacien dans un domaine borné. (1911)

V. LE PRINCIPE DE CORRESPONDANCE (Schrödinger 1926)

Le principe de correspondance est tout simplement le principe que nous avons déjà avancé et qui est à la base de la mécanique ondulatoire : " la mécanique ondulatoire est à la mécanique analytique (classique) ce que l'optique ondulatoire est à l'optique géométrique ". Mais dans ce chapitre, nous voudrions lui donner une expression mathématique : trouver le procédé formel qui permet de passer de l'équation de Hamilton-Jacobi d'un système à l'équation d'onde dont elle constitue le cas-limite, exactement comme nous avons fait pour passer de

$$(11) \quad \frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial S}{\partial t} \right|^2 - |\text{grad} S|^2 - m^2 c^2 = 0$$

à

$$(13) \quad \frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi \right| = 0$$

(Equation de KLEIN-GORDON) .

Pour cela, posons $x_0 = t$, $x = (t, x_1, \dots, x_n)$, $\frac{\partial}{\partial x} = (\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n})$ et considérons un opérateur différentiel à coefficients variables

$P(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x})$ où P est un polynôme en $\frac{\partial}{\partial x}$ à $n+1$ indéterminées.

Pour $\psi(x) = a(x) e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}$, calculons :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i} = (i\hbar \frac{\partial a}{\partial x_i} - a \frac{\partial S}{\partial x_i}) e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} = (-\hbar^2 \frac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial x_j} - i\hbar [\frac{\partial a}{\partial x_j} \frac{\partial S}{\partial x_i} + \frac{\partial a}{\partial x_i} \frac{\partial S}{\partial x_j} + a \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j}] + a \frac{\partial S}{\partial x_i} \frac{\partial S}{\partial x_j}) e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

On montre facilement par récurrence que pour $\alpha = (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$:

$$(i\hbar)^{\alpha_0 + \dots + \alpha_n} (\frac{\partial}{\partial x})^\alpha \psi = [a (\frac{\partial S}{\partial x})^\alpha + o(\hbar)] e^{\frac{i}{\hbar} S}$$

et par conséquent :

$$P(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi = P(x, \frac{\partial S}{\partial x})\psi + O(\hbar)$$

Autrement dit, à la limite lorsque $\hbar \rightarrow 0$, l'équation aux dérivées partielles

$$P(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi = 0 \text{ se réduit à l'équation du type Hamilton-Jacobi } P(x, \frac{\partial S}{\partial x}) = 0 .$$

Etant donnée une équation Hamilton-Jacobi, qui est une relation polynomiale

entre les dérivées de S , on obtiendra l'équation d'onde en remplaçant formellement dans le polynôme :

$$\frac{\partial S}{\partial x_i} \text{ par } i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

c'est-à-dire

$$E \text{ par } -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_i \text{ par } i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

Ainsi, aux équations (9) vont correspondre en mécanique ondulatoire les équations d'onde :

1^{er} cas particule de masse m dans un potentiel U :

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x)\psi$$

(équation de Schrödinger)

2^e cas deux particules dont l'interaction est décrite par le potentiel U :

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{x_1 x_2 x_3} \psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{x_4 x_5 x_6} \psi + U(x)\psi$$

3^e cas particule relativiste dans un champ électromagnétique :

$$\frac{1}{c^2} [i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\varphi(x)]^2 \psi - \sum_{i=1}^3 (i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{e}{c} A_i(x))^2 \psi - m^2 c^2 \psi = 0$$

(équation de KLEIN-GORDON généralisée) .

Il faut être bien conscient du fait qu'aucune de ces trois équations n'est exacte ; ce sont des approximations, non pas dans le sens où "de toute façon" les équations de la physique sont toujours approximatives, mais du point de vue même de la théorie (ici, la mécanique ondulatoire) . En effet, les deux premières de ces équations négligent les effets relativistes et la troisième néglige l'effet du mouvement de la particule sur le champ électromagnétique. Il se pose alors la question : si on écrit les équations "exactes" de l'électromagnétisme (i.e. sans négliger aucun des phénomènes envisagés par la théorie elle-même) et si on leur applique le principe de correspondance, (*) obtient-on alors les équations "ultimes" , c'est-à-dire capables de rendre compte de toutes les observations expérimentales faites à ce jour ? La réponse est non. La mécanique ondulatoire est insuffisante, à elle seule, à rendre compte du spin des particules, ainsi que des interactions forte et faible. Pour être plus précis : le spin, les interactions forte et faible ne sont pas incompatibles avec la mécanique ondulatoire, mais il faut les y ajouter. On ne peut les obtenir en appliquant le principe de correspondance à aucune des équations de Hamilton-Jacobi classiques (relativité, gravitation, électromagnétisme). Il y a à cela des raisons historiques : la découverte de ces phénomènes est postérieure à la mécanique ondulatoire, et les conditions de leur découverte appartiennent d'emblée à la physique atomique ou nucléaire. Ils sont cependant susceptibles d'effets macroscopiques, c'est-à-dire appréhendables à travers des théories de type classique, dans des objets tels que les étoiles à neutrons ; mais justement, là aussi, il s'agit d'une découverte postérieure à la mécanique ondulatoire. Signalons encore que la théorie des interactions forte et faible, "ajoutée" à la mécanique ondulatoire, est encore très inachevée.

(*) appliquer le principe de correspondance aux équations de Hamilton-Jacobi du champ électromagnétique demande un formalisme différent et beaucoup plus sophistiqué que celui que nous avons exposé ici pour les particules ; en effet, ces équations ne sont pas polynomiales, mais fonctionnelles.

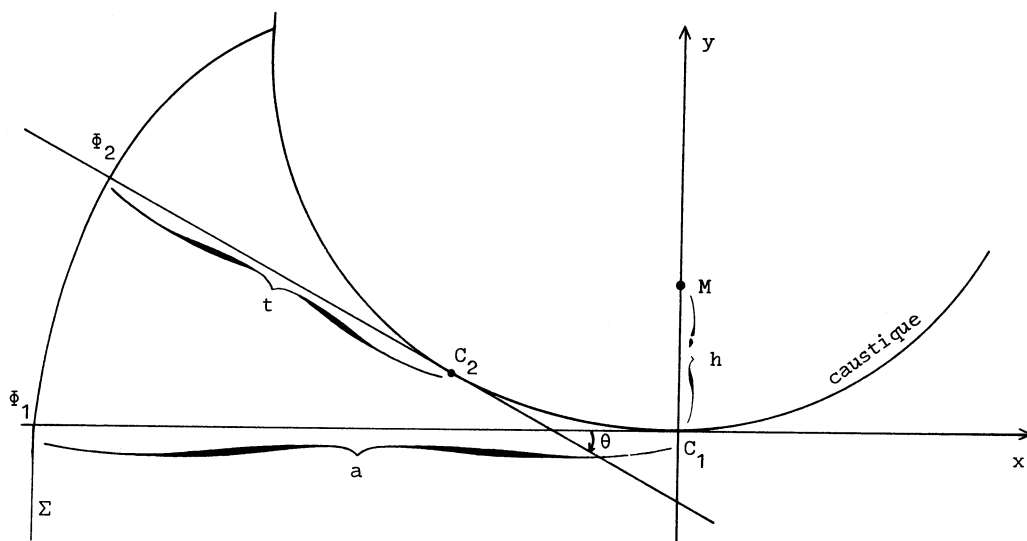
VI. CAUSTIQUES.

Nous avons vu au chapitre I l'expression du principe de Huyghens par Fresnel ; la fonction d'onde y était représentée par une intégrale oscillante :

$$\psi(x,t) = \frac{\omega}{2i\pi c} \int_{\Sigma} \frac{a(\alpha)}{r(x,\alpha)} e^{i\omega(t - \frac{r(x,\alpha)}{c})} dx$$

où Σ est la surface d'onde sur laquelle $\psi(x,t) = a(x)e^{i\omega t}$. Dans le cas de l'optique géométrique, on est dans la situation asymptotique où $\omega \rightarrow \infty$ et où, pour tout x , $\alpha \mapsto r(x,\alpha)$ a un point critique unique qui est non dégénéré ; autrement dit, lorsqu'on peut appliquer la méthode de la phase stationnaire. On s'écarte de cette situation, soit lorsque ω est trop petit (alors les effets de diffraction deviennent dominants), soit lorsque ω est grand, mais que les points critiques de $\alpha \mapsto r(\alpha,x)$ sont dégénérés. Le lieu des points x de l'espace tels que $\alpha \mapsto r(\alpha,x)$ ait un point critique dégénéré est constitué de surfaces appelées caustiques. On remarquera que ce lieu ne dépend pas du choix de la surface d'onde Σ , car entre deux surfaces d'onde, les $r(x,\alpha)$ correspondent à une constante.

Autrement dit, en un point x_0 situé sur une caustique, l'évaluation asymptotique pour $\omega \rightarrow \infty$ est plus difficile car les singularités de $r(x_0,\alpha)$ sont plus complexes. Mais en fait, ce qui va nous intéresser, ce n'est pas tant la valeur de $\psi(x_0,t)$ que la manière dont $\psi(x,t)$ varie au voisinage immédiat de la caustique, c'est-à-dire l'intégrale dépendant du paramètre x . Pour étudier asymptotiquement cette intégrale, ce ne sont pas les propriétés algébriques de la singularité en $x = x_0$ qui vont intervenir, mais celles de ses déformations universelles ; nous allons voir cela sur l'exemple le plus simple (générique) à deux dimensions : une courbe d'onde et la courbe caustique qui est sa développée, au voisinage d'un point régulier de la caustique.



Considérons deux points C_1 et C_2 de la caustique (nous ferons tendre C_2 vers C_1). Choisissons comme repère orthonormé celui d'origine C_1 et d'axes la tangente et la normale à la caustique en C_1 .

Φ_1 et Φ_2 sont les points où les tangentes en C_1 et C_2 à la caustique recoupent la courbe d'onde Σ . On appelle θ l'angle algébrique des vecteurs $\vec{\Phi_1 C_1}$ et $\vec{\Phi_2 C_2}$, et t la distance $\Phi_2 C_2$.

Dans notre repère orthonormé

C_2 a pour coordonnées (x, y)

Φ_1 a pour coordonnées $(-a, 0)$

Φ_2 a pour coordonnées $(x - t \cos \theta, y - t \sin \theta)$

Soit M le point de coordonnées $(0, h)$.

Si s est l'abscisse curviligne sur la caustique, nulle en C_1 , on pose :

$$\rho = \left. \frac{ds}{d\theta} \right|_{\theta=0} \quad (\text{rayon de courbure en } C_1)$$

$$\sigma = \left. \frac{d^2 s}{d\theta^2} \right|_{\theta=0}$$

$$\tau = \left. \frac{d^3 s}{d\theta^3} \right|_{\theta=0}$$

et on a alors les développements limités au voisinage de $\theta = 0$:

$$s = \rho \theta + \frac{1}{2} \sigma \theta^2 + \frac{1}{6} \tau \theta^3 + o(\theta^4)$$

$$x = \rho \theta + \frac{1}{2} \sigma \theta^2 + \frac{\tau - \rho}{6} \theta^3 + o(\theta^4)$$

$$y = \frac{1}{2} \rho \theta^2 + \frac{\sigma}{3} \theta^3 + o(\theta^4) .$$

Enfin, on a la relation

$$t = a + s$$

On se propose d'évaluer l'intégrale de Fresnel

$$I = \frac{\omega}{2i\pi c} \int \frac{a(\alpha)}{r(\alpha, M)} e^{i \frac{\omega}{c} r(\alpha, M)} d\alpha .$$

Pour cela, nous voulons trouver une forme canonique (ou forme normale) de $r(\alpha, M)$; or

$$r(\alpha, M) = \left| \overrightarrow{\Phi_2 M} \right| = [(x-t \cos \theta)^2 + (y-t \sin \theta - h)^2]^{\frac{1}{2}} .$$

On remarquera que pour M sur la caustique ($\Leftrightarrow h = 0$) $r(\alpha, M)$ est fonction de la seule variable θ et possède en $\theta = 0$ une singularité dégénérée ; cette singularité, comme on peut s'en rendre compte par un développement limité, est une cubique (si $\rho \neq 0$, ce que nous supposons dans la suite) ; très exactement, elle est équivalente à $\frac{1}{6} \rho \theta^3$. Or, la plus simple déformation universelle d'une telle singularité est la déformation à deux paramètres $p_1 + p_2 \theta + \frac{1}{6} \rho \theta^3$; c'est pourquoi nous allons faire de $r(\alpha, M)$ un développement limité à l'ordre 3 en θ et à l'ordre 1 en h . Cela donne :

$$\left| \overrightarrow{\Phi_2 M} \right| = a + h\theta + \frac{h\rho}{2a} \theta^2 + \frac{1}{6} \rho \theta^3 + o(\theta^4, h^2)$$

ou encore, si on remplace θ par $\theta' = \theta + \frac{h}{a}$ ce qui donne une déformation équivalente :

$$\left| \vec{\Phi}_2 M \right| = a + h\theta' + \frac{1}{6} \rho \theta'^3 + o(\theta'^4, h^2)$$

Or, puisque la déformation $a + h\theta + \frac{1}{6} \rho \theta^3$ est universelle, il existe un changement de variable

$$\xi = \theta' [1 + \epsilon(h, a, \theta')]$$

(avec $\epsilon(h, a, \theta) = 0$ si $h, \theta = 0$) tel que $\left. \frac{d\xi}{d\theta} \right|_{\theta=0} = 1$

et tel que

$$\left| \vec{\Phi}_2 M \right| = a + h\xi + \frac{1}{6} \rho \xi^3 .$$

Nous prendrons le changement de variable suivant :

$$\xi = \left(\frac{1}{2} \frac{\omega}{c} \rho \right)^{\frac{1}{3}} \left(\theta + \frac{h}{a} \right) (1 + \epsilon(h, \theta))$$

de sorte que

$$\frac{\omega}{c} r(\alpha, M) = \frac{\omega}{c} a + h \left(\frac{2\omega^2}{\rho c^2} \right)^{\frac{1}{3}} \xi + \frac{\xi^3}{3} .$$

Ainsi, on peut écrire :

$$I = \frac{\omega}{2i\pi c} \int \frac{t(\xi) a(\alpha(\xi))}{r(\alpha(\xi), M)} e^{i\left(\frac{\xi^3}{3} + \beta \xi\right)} \frac{d\xi}{\gamma(\xi)} e^{i\frac{\omega}{c} a}$$

où $\gamma(\xi)$ est une fonction différentiable telle que $\frac{d\xi}{\gamma(\xi)} = d\theta = \frac{d\alpha}{t}$ $\frac{1}{3}$
et $\gamma(0) = \left(\frac{1}{2} \frac{\omega}{c} \rho \right)^{\frac{1}{3}}$. Cette intégrale qui dépend du paramètre $\beta = \left(\frac{2\omega^2}{\rho c^2} \right)^{\frac{1}{3}} h$ est l'intégrale d'Airy. Son comportement asymptotique pour $\beta \rightarrow \infty$ est connu et nous donne :

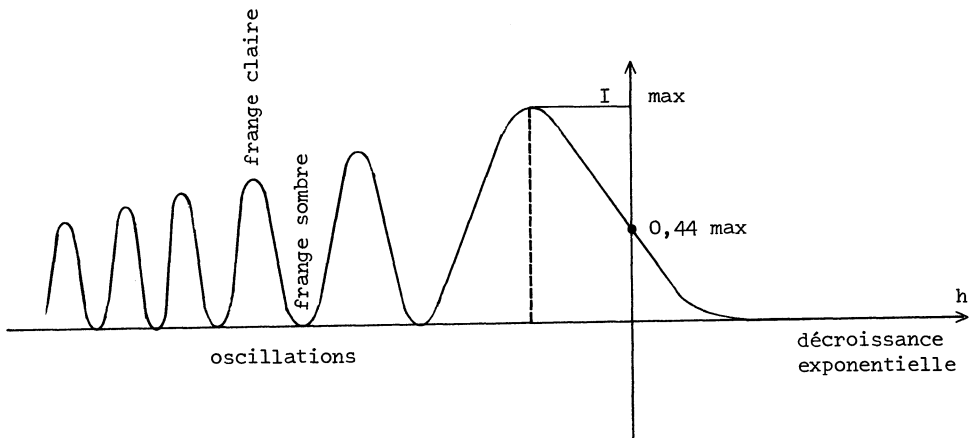
si $h > 0$,

$$I \sim \frac{c^{te}}{h^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{2h^{\frac{3}{2}}}{3} \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{2}{\rho}}\right)$$

et si $h < 0$

$$I \sim \frac{c^{te}}{(-h)^{\frac{1}{4}}} \sin\left(\frac{2(-h)^{\frac{3}{2}}}{3} \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{2}{\rho}} + \frac{\pi}{4}\right)$$

Cela montre que du côté où $h > 0$ l'intensité lumineuse, égale à I^2 , décroît exponentiellement quand h augmente ; de l'autre côté, par contre, là où se concentrent les rayons lumineux, on observera des franges sombres et claires. A condition que β soit assez grand, c'est-à-dire h pas trop petit. Au voisinage immédiat de la caustique, il faut utiliser des tables de valeurs. (Remarquons que les expressions ci-dessus, valables pour h pas trop petit, ne le sont aussi que pour h pas trop grand). On peut voir alors que le maximum est atteint, non sur la caustique, mais du côté $h < 0$, pour $\beta = -1,02$ soit $h = -(\frac{\rho c^2}{2\omega^2})^{1/3} \cdot 1,02$; le rapport des intensités entre les points de la caustique et le maximum est de 0,44. On obtient une courbe de répartition du type suivant



La largeur des oscillations tend vers 0 quand ω tend vers l'infini. Si ω est très grand, les franges ne se distinguent plus et donnent un éclaircissement moyen, qui devient très grand le long de la caustique.

Quelles leçons générales tirer de cet **exemple**? Que la répartition de l'éclairement peut être évaluée approximativement d'après le comportement asymptotique d'une intégrale oscillante, donc d'après les propriétés géométrico-algébriques des singularités de la fonction $\alpha \mapsto r(\alpha, x)$. Disons que les propriétés qualitatives de la répartition de l'éclairement, c'est-à-dire la structure générale des franges et du lieu du maximum d'intensité sont déterminées par le type de singularité de la fonction $r(\alpha, x)$, ou plutôt par sa déformation universelle. En effet, le calcul exact (quantitatif) de l'intensité lumineuse est d'un intérêt théorique secondaire.

L'exemple que nous venons de traiter est celui de la situation la plus simple : x est un point régulier de la caustique, où $\rho \neq 0$ et $\rho \neq \infty$; dans un tel cas, nous avons vu que la singularité de $r(\alpha, x)$ est cubique (forme normale α^3) et sa déformation universelle est $p_1 + p_2\alpha + \alpha^3$. Par contre, en un point x irrégulier de la caustique (point anguleux, point de rebroussement, etc..) la singularité de $r(\alpha, x)$ est plus complexe, et les caractéristiques structurales de la répartition de l'éclairement sont plus difficiles à calculer ; mais le principe général reste valable ; elles sont déterminées par le type de singularité. Ainsi, un problème d'optique "structurale" se ramène à un problème de géométrie différentielle.