

ANNALES DE L'I. H. P.

ANDRÉ ROT

**Sur les équations de base de la Mécanique
ondulatoire non relativiste**

Annales de l'I. H. P., tome 16, n° 4 (1960), p. 235-287

[<http://www.numdam.org/item?id=AIHP_1960__16_4_235_0>](http://www.numdam.org/item?id=AIHP_1960__16_4_235_0)

© Gauthier-Villars, 1960, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annales de l'I. H. P. » 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/>

Sur les équations de base de la Mécanique ondulatoire non relativiste

par

André ROT.

INTRODUCTION.

Ce travail trouve son origine dans la tentative développée depuis quelques années par M. Louis de Broglie en vue de réaliser la synthèse des notions d'onde et de corpuscule, notions que l'interprétation usuelle de la Mécanique ondulatoire ne fait que juxtaposer par l'intermédiaire de la complémentarité. On sait que M. Louis de Broglie a proposé de représenter les corpuscules par une onde possédant une région singulière, ou à la limite une singularité du type pôle, représentant le corpuscule au sens strict, le mouvement de cette singularité étant déterminé par la formule du guidage [4]. Cette formule a été établie par M. Louis de Broglie sous des conditions assez particulières; elle conduit à des ambiguïtés lorsqu'on veut l'appliquer à l'étude du mouvement relatif par exemple et nous avons entrepris de lui donner la forme la plus générale possible.

D'autre part, M. Louis de Broglie suppose que l'onde singulière dont nous venons de parler est soumise à une équation non linéaire dont la forme nous est encore inconnue aujourd'hui. Nous avons donc voulu nous rendre compte dans quelles limites l'équation de Schrödinger peut être modifiée ou complétée. Or les raisonnements qui conduisent à formuler cette équation sont loin d'être sans ambiguïté : le raisonnement suivi par M. Schrödinger, et qui n'a pas à notre connaissance été complété depuis de façon essentielle, conduit en fait, comme nous le montrons au

chapitre I, à toute une gamme d'équations de nature fort différente, gamme parmi laquelle l'équation usuelle ne se distingue que par sa simplicité. Nous avons donc cherché à formuler une déduction à la fois plus rigoureuse et plus générale des équations d'onde. Deux idées directrices nous ont servi dans cette recherche.

La première remonte à Hamilton; elle consiste à voir dans les principes variationnels de la dynamique l'analogue d'un principe de Fermat. Mais pour obtenir la formulation générale que nous désirions il nous fallait partir directement du principe d'Hamilton et non pas de celui de Maupertuis comme on le fait généralement; c'est la seule façon d'éviter par exemple l'introduction *a posteriori* des forces d'inertie dans l'équation d'onde, introduction qui n'a pu être menée à bien jusqu'ici.

La seconde idée résulte des travaux de M. Hadamard sur la Théorie des bicaractéristiques des équations aux dérivées partielles du second ordre en liaison avec la propagation des ondes. Cette théorie a déjà été largement utilisée en relativité en particulier par MM. G. Darmois et Lichnérowicz pour établir les équations du mouvement, et M. Louis de Broglie a lui-même signalé l'étroite parenté qui lui lie la formule du guidage. Après avoir rappelé les principes de la théorie des bicaractéristiques et montré que leurs équations peuvent se ramener canoniquement à un principe variationnel, nous avons appliqué ce résultat à l'optique. Contrairement à ce qui est fait d'habitude où on montre que l'optique géométrique est une approximation de l'optique physique, nous montrons qu'il est possible de déduire du principe de Fermat, non pas une mais toute une famille d'équations d'onde. Il nous restait à transposer cette méthode du principe de Fermat au principe d'Hamilton. Pour cela il nous a fallu d'abord modifier ce principe pour lui donner une forme plus homogène, ce qui conduit à retrouver un cas particulier d'un théorème dû à M. Eisenhart, et à donner une interprétation mécanique et géométrique des nouvelles quantités introduites. Tous ces résultats font l'objet du chapitre II.

Le chapitre III est consacré à l'équation d'onde. Nous avons d'abord donné l'expression générale de la famille de ces équations. Toutefois, de même que le passage du principe de Fermat à l'optique ondulatoire fait passer de la description dans l'espace à trois dimensions à une propagation d'ondes dans un espace à quatre dimensions, le passage du principe d'Hamilton aux équations d'onde fait intervenir un espace à cinq dimen-

sions. Pour pouvoir interpréter les ondes mécaniques il nous faut donc trouver un moyen de les « projeter » sur l'espace et le temps. C'est cette « projection » qui introduit le terme imaginaire dans l'équation de Schrödinger et qui permet encore l'introduction de la constante de Planck. Elle nous fournit la forme la plus générale de l'équation d'onde, forme qui n'avait jamais été donnée à notre connaissance. La fin de ce chapitre est consacrée à la généralisation de la formule du guidage et à la discussion du rôle joué par les transformations de jauge dans la théorie de M. Louis de Broglie.

Enfin le chapitre IV est consacré à l'examen de diverses possibilités qui sont contenues dans la Mécanique ondulatoire non relativiste et qui passaient pour être l'apanage des théories relativistes : c'est le cas du spin et de l'espace isotopique.

Avant de développer ces quelques résultats, nous voudrions exprimer à M. Louis de Broglie notre profonde gratitude pour l'intérêt qu'il a bien voulu témoigner à ce travail et pour les nombreuses remarques qu'il nous a prodiguées à ce sujet.

CHAPITRE I.

L'ÉQUATION D'ONDE DE SCHRÖDINGER.

1. **Introduction.** — L'idée fondamentale qui a donné naissance à la Mécanique ondulatoire est qu'il y a lieu d'associer à la matière un phénomène étendu, tout comme la théorie du rayonnement et de l'effet photo-électrique conduit à associer aux ondes lumineuses un « corpuscule de lumière », le photon.

Pour développer cette idée, M. Louis de Broglie puis M. Schrödinger se sont servis de l'analogie de forme, déjà signalée au siècle dernier par Hamilton, qui existe entre le principe de Maupertuis et le principe de Fermat. En étudiant de ce point de vue le comportement par rapport à un repère fixe et rigide d'un point matériel (corpuscule) soumis à un champ de forces extérieures dérivant d'un potentiel indépendant du temps, M. Schrödinger est parvenu de façon tout à fait satisfaisante à

formuler l'équation d'onde gouvernant les états stationnaires. Par contre, pour aborder le cas plus général des systèmes non conservatifs il n'est pas possible de reprendre le même raisonnement en partant cette fois des équations générales de la dynamique analytique, par exemple sous la forme que leur a donné Jacobi, de sorte que l'équation générale de la Mécanique ondulatoire est obtenue de façon si peu satisfaisante qu'il est préférable de la poser *a priori* sans trop chercher à la justifier. M. Schrödinger lui-même avait bien vu cette ambiguïté puisqu'il propose dans le même Mémoire [14 p. 163] deux équations différentes, ses préférences n'allant à la seconde que pour des raisons de simplicité.

Après avoir résumé le raisonnement, aujourd'hui classique, qui conduit à l'équation des ondes dans le cas des potentiels conservatifs, nous montrerons comment la méthode suivie par M. Schrödinger conduit en fait à toute une gamme d'équations.

Dans ce travail nous nous placerons toujours sous les hypothèses qui servent de base à la mécanique classique non relativiste.

2. L'équation de Schrödinger indépendante du temps. — Considérons le mouvement d'un point matériel de masse m sous l'influence d'un champ de forces dérivant d'un potentiel $V(M) = V(x^1, x^2, x^3)$ indépendant du temps. Nous supposerons que nous rapportons ce mouvement à un système fixe de coordonnées curvilignes x^1, x^2, x^3 . Ces hypothèses peuvent paraître très restrictives eu égard à la grande généralité des lois de la dynamique; c'est cependant le seul cas où les raisonnements se présentent sous une forme parfaitement claire.

Dans ces conditions, le carré de l'élément de longueur euclidienne s'exprime sous la forme :

$$ds^2 = g_{ij}(x^k) dx^i dx^j \quad (i, j, k = 1, 2, 3),$$

desorte que l'énergie cinétique T se présente comme une forme quadratique homogène des composantes de la vitesse :

$$2T = mg_{ij}(x^k) \dot{x}^i \dot{x}^j$$

Nous désignons par un point la dérivée par rapport au temps : $\dot{x}^i = \frac{dx^i}{dt}$, et nous utilisons la convention de sommation sur les indices muets, usuelle en calcul tensoriel. Les moments conjugués de Lagrange sont :

$$(2.1) \quad p_i = mg_{ij} \dot{x}^j$$

et la fonction de Hamilton, qui est, dans ce cas particulier, égale à l'énergie, a pour expression :

$$(2.2) \quad H(x^k, p_i) = \frac{1}{2m} g^{ij} p_i p_j + V(x^k),$$

g^{ij} désignant le cofacteur de g_{ij} dans le développement du déterminant g des g_{ij} .

Si dans (2.2) nous posons :

$$(2.3) \quad p_j = - \frac{\partial S(x^k, t)}{\partial x^j}$$

nous obtenons l'équation de Jacobi en égalant le résultat obtenu à $\frac{\partial S}{\partial t}$

$$H\left(x^k, -\frac{\partial S}{\partial x^i}\right) = \frac{1}{2m} g^{ij} \frac{\partial S}{\partial x^i} \frac{\partial S}{\partial x^j} + V(x^k) = \frac{\partial S}{\partial t}$$

équation dans laquelle la variable t se sépare en posant :

$$S(x^k, t) = Et - S_0(x^k)$$

L'action de Maupertuis $S_0(x^k)$ est alors déterminée par l'équation de Jacobi raccourcie :

$$\frac{1}{2m} g^{ij} \frac{\partial S_0}{\partial x^i} \frac{\partial S_0}{\partial x^j} + V(x^k) = E$$

ou encore, sous forme vectorielle :

$$(2.4) \quad (\overrightarrow{\text{grad } S_0})^2 = 2m(E - V),$$

Cette équation exprime que les surfaces $S_0(x^k) = \text{constante}$ de l'espace à trois dimensions se déplacent avec la vitesse [14, p. 26]

$$(2.5) \quad u = \frac{E}{|\overrightarrow{\text{grad } S_0}|} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

elles jouent le rôle de surface d'ondes, ondes dont $S(x^k, t)$ serait la phase. Ainsi se trouve précisée la relation pressentie par Hamilton, qui existe entre la théorie de Jacobi et celle d'Huygens. C'est cette analogie qui fut exploitée par les fondateurs de la nouvelle théorie en une induction d'une géniale simplicité : puisque l'optique géométrique n'est qu'une approximation de l'optique ondulatoire la mécanique classique n'est elle pas qu'une approximation d'une Mécanique ondulatoire ? Il s'avérerait, en effet, à l'époque que la Mécanique cesse d'être valable pour les petites trajectoires à l'échelle atomique, tout comme l'optique géomé-

trique est incapable de rendre compte des phénomènes de diffraction.

Supposons donc avec M. Schrödinger que les ondes que nous envisageons soient purement sinusoïdales; cela revient à admettre que la grandeur qui se propage est proportionnelle à :

$$(2.6) \quad \cos[kS(x^k, t) + \text{Cte}] = \cos k[Et - S_0(x^k)],$$

en choisissant convenablement l'origine des temps. Pour des raisons d'homogénéité la constante k doit avoir la dimension de l'inverse d'une action; et la relation des quanta $E = h\nu$ nous invite à écrire le facteur (2.6) sous la forme :

$$\cos \frac{1}{\hbar}[Et - S_0(x^k)] \quad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi} \right)$$

La longueur d'onde λ est par suite donnée par la relation de M. Louis de Broglie :

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V)}}$$

Si nous admettons encore que la grandeur Ψ qui se propage est de nature scalaire non pourrons écrire l'équation de propagation sous la forme classique :

$$\Delta\Psi - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0$$

Δ désignant l'opérateur laplacien qui, dans le système de coordonnées adopté ici, a pour expression

$$(2.7) \quad \Delta = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left(\sqrt{g} g^{ki} \frac{\partial}{\partial x^i} \right)$$

Tenant compte de l'hypothèse précédente et de la relation (2.5) il vient :

$$(2.8) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + (E - V)\Psi = 0,$$

Telle est l'équation aux dérivées partielles qui doit remplacer les équations du mouvement de la dynamique pour l'étude des phénomènes à très petite échelle. Elle contient en paramètre l'énergie E et les niveaux quantifiés de cette énergie sont les valeurs propres de cette équation compte tenu des conditions d'uniformité, de régularité, et de borne à imposer à la fonction d'onde.

3. L'équation de Schrödinger dépendant du temps. — L'équation précédente n'est valable que pour des ondes Ψ purement sinusoïdales et lorsque le potentiel des forces est conservatif; c'est-à-dire lorsque l'énergie est une intégrale première du mouvement. Pour étendre la théorie aux systèmes non conservatifs il faut remplacer l'équation (2.8) par une autre plus générale dont le paramètre E aura été éliminé. Pour cela remarquons que l'hypothèse « Ψ dépend sinusoïdalement du temps » est équivalente à

$$(3.1) \quad \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -E^2 \Psi.$$

Et c'est ici que les choses commencent à être beaucoup moins claires. Pour éliminer E entre (2.7) et (3.1), on peut en effet opérer de plusieurs façons qui conduisent à des résultats de nature entièrement différente.

Par exemple, on pourra appliquer l'opérateur $\left[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V \right]$ à l'équation (2.8) et obtenir :

$$(3.2) \quad \left[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V \right] \left[\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \Psi \right] + \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0,$$

C'est une équation linéaire du quatrième ordre analogue à celle des milieux élastiques. En particulier les solutions de (2.8) sont encore solutions de (3.2), ainsi que leur superposition. C'est cette équation qui avait en premier lieu été considérée par M. Schrödinger [14, p. 163] comme « l'équation des ondes, unique et générale, à laquelle satisfait le scalaire de champ Ψ ».

Mais on aurait pu tout aussi bien élever purement et simplement l'équation (2.8) au carré (au sens algébrique et non au sens des opérateurs) pour obtenir

$$(3.3) \quad \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \Psi \right)^2 = E^2 \Psi^2 = -\hbar^2 \Psi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}.$$

C'est cette fois une équation du second ordre, mais non linéaire; elle est encore satisfaite par les solutions de (2.8), mais évidemment plus par leur superposition. Il est clair que l'élimination de E entre les équations (2.8) et (3.1) peut s'effectuer d'une infinité de façons, parmi lesquelles celles que nous venons d'indiquer sont de loin les plus simples. Les équations obtenues peuvent être d'un ordre et d'un degré arbitraires.

Cependant il existe une autre méthode, proposée par M. Schrödinger et universellement adoptée depuis; elle permet d'obtenir une équation du second ordre, linéaire, donc plus simple que (3.2) et (3.3). Si l'on admet en effet que la fonction d'onde Ψ (on ne peut plus parler de grandeur au sens physique du terme) est essentiellement complexe, l'hypothèse selon laquelle le Ψ des systèmes conservatifs est sinusoïdal pourra s'écrire :

$$\Psi \text{ proportionnel à } e^{\frac{i}{\hbar} [E t - S_0(x^k)]}$$

ou, ce qui est équivalent,

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi.$$

On obtient ainsi l'équation bien connue :

$$(3.4) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V \Psi - i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0.$$

4. Le choix des équations d'onde. — Il résulte de ce qui précède que l'équation générale qui doit régir le comportement de la fonction d'onde est loin d'être univoquement déterminée, et il semble qu'aucune raison ne permette de trancher en faveur de l'une ou de l'autre des trois équations que nous avons écrites — ou même d'autres plus compliquées encore.

Une condition qui est souvent invoquée pour justifier l'équation (3.4) est la nécessité de retrouver l'équation de Jacobi lorsque, dans l'équation d'onde, on fait tendre la constante de Planck vers zéro. Or, il est très facile de vérifier que les équations (3.2) et (3.3) conduisent toutes deux à cette limite classique (approximation de l'optique géométrique). Il reste alors la confrontation des résultats théoriques avec les résultats expérimentaux. Il convient tout d'abord de remarquer que, d'après la façon même dont elles ont été obtenues, les équations précédentes se réduisent toutes à l'équation (2.8) dans le cas des systèmes conservatifs; elles fourniront donc toutes trois les mêmes niveaux d'énergie.

D'autre part, la majorité des résultats susceptibles de traduction expérimentale repose essentiellement sur l'interprétation qu'il convient de donner à la fonction d'onde. A ce sujet, de nombreux auteurs invoquent cette interprétation pour déterminer l'équation d'onde. A notre avis, cette question ne doit intervenir qu'après

l'obtention de cette équation et compte tenu justement des propriétés mathématiques que l'équation impose à ses solutions. Historiquement d'ailleurs le problème de la signification du Ψ s'est présenté après l'adoption des équations (2.8) et (3.4) et les premiers résultats obtenus dans le calcul des niveaux d'énergie des atomes. Cette façon de procéder que nous critiquons possède encore l'inconvénient majeur d'oublier les considérations physiques dont est issue la Mécanique ondulatoire, à tel point qu'il ne semble pas qu'on ait tenté sérieusement de justifier *a priori*, par un raisonnement physique, la nécessité d'utiliser une fonction d'onde essentiellement complexe, jamais susceptible de dégénérer en une quantité réelle.

Acceptons cependant cette base de discussion. On a souvent écrit que l'interprétation probabiliste impliquait pour Ψ la nécessité d'obéir à une équation linéaire. Si l'on admet ce point de vue, on ne doit pas pour autant rejeter l'équation (3.2); le fait qu'elle permette de définir plusieurs densités de probabilité qui ne soient pas définies positives n'étant pas une objection insurmontable comme le montre l'exemple de l'équation de Klein-Gordon et l'utilisation des « métriques indéfinies » en théorie quantique des champs. Ajoutons encore que l'adoption de l'équation (3.2) n'eût peut-être pas conduit à l'interprétation probabiliste de la Mécanique quantique !

Mais la nécessité d'une équation linéaire pour qu'une telle interprétation soit possible ne nous semble nullement démontrée. Ne serait-ce que parce que la théorie habituelle n'utilise pas la linéarité en définissant la densité de probabilité par $|\Psi|^2$, ce qui entraîne le rejet des axiomes du calcul des probabilités. La condition de norme par exemple n'est nullement une conséquence de la linéarité de l'équation de Schrödinger, mais bien de son homogénéité; on voit instantanément que si Ψ est une solution de l'équation non linéaire (3.3), il en sera de même de $C\Psi$ et la fonction d'onde pourra encore être normée.

Le seul postulat de la théorie orthodoxe qui semblerait devoir être abandonné par une théorie basée sur une équation non linéaire serait le principe de décomposition spectrale [4, p. 33]; ceci nous ramenant à la confrontation de la théorie avec l'expérience. En effet, l'expérience a abondamment prouvé que les particules de la microphysique sont susceptibles de produire des phénomènes d'interférence et de diffraction. Comme la théorie des interférences lumineuses rend compte de façon

très satisfaisante de ces phénomènes en admettant que la vibration résultante est la superposition, par simple addition, des vibrations composantes, on en conclut, un peu trop rapidement peut-être, que l'équation des ondes qu'il convient d'associer aux corpuscules doit être une équation linéaire.

Cependant cette loi de composition des vibrations n'est, après tout, peut-être pas absolument rigoureuse, et une loi de composition des solutions de l'équation des ondes différente de la loi d'addition permettrait de décrire des phénomènes identiques. Pour donner à cette idée un support plus concret, raisonnons par exemple sur l'expérience très classique des trous d'Young. Désignons par Ψ_1 la fonction d'onde qu'on obtient dans le cas où l'un des deux trous est obturé. De même Ψ_2 sera la fonction d'onde correspondant au cas où c'est l'autre trou qui est bouché. Lorsque les deux trous sont simultanément ouverts la fonction d'onde Ψ_3 devra traduire la composition des vibrations associées à Ψ_1 et à Ψ_2 . Tant que nous aurons affaire à une théorie basée sur une équation linéaire nous pourrons écrire que Ψ_3 est une combinaison linéaire des deux fonctions d'onde Ψ_1 et Ψ_2 . Par contre, dans le cadre d'une théorie dont l'équation de base serait non linéaire, le lien algébrique entre Ψ_3 d'une part et Ψ_1 et Ψ_2 d'autre part peut devenir extrêmement complexe. Supposons néanmoins que l'équation d'onde de cette théorie nous permette d'écrire une loi de composition :

$$\Psi_3(x, y, z, t) = \mathcal{F}[\Psi_1(x, y, z, t), \quad \Psi_2(x, y, z, t)],$$

L'expression analytique de la fonction $\mathcal{F}$ étant très compliquée nous pourrions la représenter par une série :

$$\Psi_3 = a_{10}\Psi_1 + a_{01}\Psi_2 + a_{20}\Psi_1^2 + 2a_{11}\Psi_1\Psi_2 + \dots$$

Si les fonctions Ψ_1 et Ψ_2 oscillent relativement peu autour d'une valeur moyenne assez faible, et si la suite des coefficients a_{pq} du développement précédent décroît suffisamment rapidement on pourra, tout au moins en première approximation, ne retenir que les deux premiers termes de ce développement et représenter la fonction d'onde résultante Ψ_3 par une combinaison linéaire de Ψ_1 et Ψ_2 :

$$\Psi_3 \simeq a_{10}\Psi_1 + a_{01}\Psi_2$$

tout comme dans le cas où la théorie reposerait sur une équation linéaire.

Par contre cette conclusion devient entièrement inacceptable lorsque, dans certaines régions de l'espace par exemple, l'une des deux fonctions composantes, ou les deux à la fois, prend des valeurs très élevées, de telle sorte que les puissances supérieures de la fonction d'onde, loin d'être négligeables, deviennent au contraire prépondérantes. Nous rejoignons ainsi tout naturellement l'une des idées caractéristiques émises par M. Louis de Broglie pour tenter de développer une théorie qui procure une description plus complète des particules en faisant notamment intervenir leur structure interne [4]. Nous reviendrons plus longuement sur ce sujet au paragraphe 15 de ce travail. Mais précisément au moment où diverses tentatives sont faites pour compléter la description fournie par la théorie actuelle en cherchant notamment à s'appuyer sur des équations non linéaires, il ne nous a pas paru inutile d'essayer de préciser les raisonnements qui permettent d'asseoir les équations de la mécanique ondulatoire sur des bases plus solides que celles que nous venons de rappeler.

5. Remarques générales concernant les équations précédentes. —

Les trois équations que nous avons écrites au paragraphe 3 constituent des généralisations de l'équation (2.8) obtenue elle-même à partir de l'équation de Jacobi raccourcie (2.4). Or cette équation ne s'applique qu'à des systèmes conservatifs rapportés à des axes fixes. Or, même dans ce cas particulier, l'usage de l'équation de Jacobi raccourcie ne s'impose nullement; il a en outre l'inconvénient de limiter le choix des constantes du mouvement en fixant arbitrairement l'intégrale première de l'énergie.

De toute façon, les équations du paragraphe 3 ne sont valables que dans un système de coordonnées en translation uniforme par rapport à « l'ensemble des étoiles fixes »; c'est-à-dire encore dans le cas où la fonction de Lagrange est de la forme

$$\mathcal{L}(x^i, t, \dot{x}^i) = \frac{1}{2} m g_{ik} \dot{x}^i \dot{x}^k + V(x^i, t).$$

Or ce n'est évidemment pas là le cas général. La mécanique de Newton nous permet en effet de rapporter les équations du mouvement à n'importe quel système de coordonnées, pouvant en particulier dépendre du temps, et aussi d'étudier le mouvement par rapport

à n'importe quel système de référence. On est conduit dans ce cas à employer des fonctions de Lagrange qui comportent des termes dépendant linéairement des composantes de la vitesse.

D'autre part, nous devons aussi considérer le cas où les forces agissant sur le corpuscule sont de nature électromagnétique; c'est-à-dire qu'elles dépendent non seulement d'un potentiel mais aussi d'un potentiel vecteur. Nous sommes encore ramenés dans ce cas à des fonctions de Lagrange contenant des termes linéaires par rapport aux composantes de la vitesse. On sait que dans ce cas la mécanique ondulatoire utilise un procédé aussi formel que non justifié qui oblige à toujours passer par l'intermédiaire de coordonnées cartésiennes rectangulaires.

Pour toutes ces raisons, il serait souhaitable de pouvoir reprendre le raisonnement exposé au début du second paragraphe en s'appuyant cette fois sur l'équation de Jacobi (non raccourcie). Il semble malheureusement que cela ne soit pas possible; en particulier la généralisation de la formule (2.5) définissant la vitesse des surfaces d'onde présente de grosses difficultés. C'est pour cela que nous avons cherché à nous appuyer sur le principe de Hamilton plutôt que sur l'équation de Jacobi. De cette façon nous pourrions nous placer d'emblée dans un système de coordonnées absolument quelconque ce qui nous permettra de développer une théorie ondulatoire possédant le même degré de généralité que la mécanique classique.

CHAPITRE II.

UNE FORME DES ÉQUATIONS DE LA DYNAMIQUE CLASSIQUE.

6. Les bicaractéristiques des équations aux dérivées partielles du second ordre. — Considérons une équation aux dérivées partielles du second ordre à une fonction inconnue $\varphi(x^1, \dots, x^n)$ de n variables indépendantes, linéaire par rapport aux dérivées d'ordre 2 de φ :

$$(6.1) \quad a^{ik}(x^j) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^i \partial x^k} + f\left(x^j, \varphi, \frac{\partial \varphi}{\partial x^j}\right) = 0.$$

Les coefficients $a^{ik} = a^{ki}$ sont supposés pouvoir dépendre des variables x^i mais pas de la fonction inconnue ni de ses dérivées premières. Ils sont en outre tels que

$$\det a^{ik} = 0$$

$f(x^i, \varphi, \frac{\partial \varphi}{\partial x^i})$ est une fonction quelconque des variables, de la fonction inconnue et éventuellement de ses dérivées premières.

On appelle variétés caractéristiques de cette équation les surfaces

$$\theta(x^1, \dots, x^n) = \text{Cte},$$

la fonction $\theta(x^1, \dots, x^n)$ vérifiant l'équation aux dérivées partielles du premier ordre

$$(6.2) \quad a^{ik} \frac{\partial \theta}{\partial x^i} \frac{\partial \theta}{\partial x^k} = 0.$$

On sait que ces surfaces se présentent naturellement dans l'étude du problème de Cauchy [7, p. 263]. Pour intégrer l'équation (6.2) et déterminer les fonctions θ on forme le système caractéristique

$$(6.3) \quad \frac{dx^1}{a^{1k} \frac{\partial \theta}{\partial x^k}} = \frac{dx^2}{a^{2k} \frac{\partial \theta}{\partial x^k}} = \dots = \frac{dx^n}{a^{nk} \frac{\partial \theta}{\partial x^k}}.$$

C'est un système d'équations différentielles du premier ordre qui définit une famille de courbes caractéristiques de l'équation (6.2) et appelées bicaractéristiques de l'équation (6.1).

Introduisons un paramètre arbitraire τ en désignant par $d\tau$ la valeur commune des rapports (6.3) et cherchons le système différentiel du second ordre satisfait par les bicaractéristiques. On a d'après (6.3) :

$$\frac{d^2 x^l}{d\tau^2} = \frac{d}{d\tau} \left(a^{lm} \frac{\partial \theta}{\partial x^m} \right) = a^{lm} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^m \partial x^n} \frac{dx^n}{d\tau} + \frac{\partial \theta}{\partial x^m} \frac{da^{lm}}{d\tau}.$$

Désignons par a_{il} le cofacteur de a^{il} dans le développement du déterminant des a^{ik} . Comme

$$a^{il} a_{lj} = \delta^i_j,$$

δ^i_j étant le symbole habituel de Kronecker, on a :

$$(6.4) \quad a_{lj} \frac{da^{il}}{d\tau} + a^{il} \frac{da_{lj}}{d\tau} = 0$$

de sorte que

$$(6.5) \quad a_{il} \frac{d^2 x^l}{d\tau^2} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^i \partial x^n} \frac{dx^n}{d\tau} - \frac{da_{il}}{d\tau} \frac{dx^l}{d\tau}.$$

D'autre part, en dérivant (6.2) par rapport à x^i on obtient

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(a^{jl} \frac{\partial \theta}{\partial x^j} \frac{\partial \theta}{\partial x^l} \right) = \frac{\partial a^{lj}}{\partial x^i} \frac{\partial \theta}{\partial x^j} \frac{\partial \theta}{\partial x^l} + 2 a^{jl} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^i \partial x^j} \frac{\partial \theta}{\partial x^l}$$

et en résolvant compte tenu de (6.4) et de (6.3) :

$$2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^i \partial x^n} = - \frac{\partial a^{il}}{\partial x^i} a_{ln} \frac{\partial \theta}{\partial x^l} = \frac{\partial a_{ln}}{\partial x^i} \frac{dx^n}{d\tau}.$$

En reportant cette expression dans (6.5), on obtient finalement les équations du second ordre cherchées :

$$a_{il} \frac{d^2 x^l}{d\tau^2} + \frac{da_{il}}{d\tau} \frac{dx^l}{d\tau} - \frac{1}{2} \frac{\partial a_{ln}}{\partial x^i} \frac{dx^l}{d\tau} \frac{dx^n}{d\tau} = 0.$$

Sous cette forme, on reconnaît les équations d'Euler-Lagrange déterminant les courbes extrémales de l'intégrale :

$$(6.6) \quad \int_{\tau_0}^{\tau_1} a_{il} \frac{dx^l}{d\tau} \frac{dx^i}{d\tau} d\tau$$

et d'après (6.2) et (6.3) ces extrémales satisfont à la condition

$$(6.7) \quad a_{ij} \frac{dx^i}{d\tau} \frac{dx^j}{d\tau} = 0.$$

Cette propriété des bicaractéristiques des équations aux dérivées partielles du second ordre contient en particulier le cas bien connu suivant : les bicaractéristiques de l'opérateur différentiel du second ordre de Beltrami (laplacien généralisé) d'une variété riemannienne sont les géodésiques de longueur nulle de cette variété. C'est cette propriété essentielle qui est à l'origine des travaux de MM. G. Darboux et A. Lichnerowicz sur le principe des géodésiques en relativité générale.

7. L'optique ondulatoire et l'optique géométrique. — Comme exemple d'application des résultats du paragraphe précédent, nous allons montrer qu'ils réalisent le passage de l'optique ondulatoire à l'optique géométrique et inversement. Pour cela, considérons l'équation aux dérivées partielles qui régit la propagation de la lumière dans un milieu permanent, transparent, isotrope et non dispersif d'indice $n(x, y, z)$:

$$(7.1) \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 F}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} = 0,$$

F est l'une des composantes du champ électromagnétique mais, pour ce qui nous préoccupe ici, il nous suffira de la considérer comme une « variable lumineuse » au sens de Fresnel. Nous avons en outre posé

$$v(x, y, z) = \frac{c}{n(x, y, z)}.$$

On sait que l'optique géométrique se présente comme une approximation de l'optique physique valable seulement lorsque la longueur d'onde des vibrations lumineuses est négligeable vis-à-vis des autres longueurs intervenant dans le problème. Nous chercherons donc une solution de (7.1) qui soit de la forme

$$(7.2) \quad F(x, y, z, t) = a(x, y, z, t) \cos k S(x, y, z, t)$$

en supposant que la constante k est extrêmement grande. Après avoir reporté (7.2) dans (7.1) on peut, dans ces conditions, négliger tous les termes devant ceux qui contiennent le facteur k^2 et il reste

$$(7.3) \quad \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 = 0$$

qui montre que les surfaces $S(x, y, z, t) = \text{Cte}$ sont les variétés caractéristiques de l'équation (7.1). D'après les résultats du paragraphe précédent, les bicaractéristiques de l'équation de propagation ont pour équation

$$(7.4) \quad \delta \int_{\tau_0}^{\tau_1} \left[v^2 \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{dy}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{dz}{d\tau} \right)^2 \right] d\tau = 0$$

avec la condition

$$(7.5) \quad v^2 \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{dy}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{dz}{d\tau} \right)^2 = 0.$$

L'équation d'Euler relative à la variable t fournit l'intégrale première

$$(7.6) \quad v^2 \frac{dt}{d\tau} = 0$$

et les trois autres (nous n'écrirons que celle en x , les deux autres étant identiques)

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{dx}{d\tau} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial v^2}{\partial x} \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^2 = 0$$

s'écrivent en éliminant le paramètre

$$(7.7) \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{v^2} \frac{dx}{dt} \right) + \frac{1}{2} \frac{1}{v^2} \frac{\partial v^2}{\partial x} = 0.$$

On reconnaît, sous cette forme, les équations des extrémales de l'intégrale

$$(7.8) \quad \int_{M_0}^{M_1} \frac{\sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}}{v(x, y, z)}$$

qui, compte tenu de l'intégrale première (7.6) et de la condition (7.5) n'est pas autre chose que le temps mis par la lumière pour parcourir l'arc M_0M_1 d'extrémale. En effet, prenant ce temps de parcours t comme paramètre, les équations d'Euler-Lagrange assurant l'extremum de (7.8) s'écrivent bien [10, p. 114]

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{v^2} \frac{dx}{dt} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{v^2} \right) \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 \right] = - \frac{1}{2} \frac{1}{v^2} \frac{\partial v^2}{\partial x}.$$

Donnons une interprétation géométrique de ce résultat. Désignons par R_3 l'espace physique (euclidien) à trois dimensions et considérons un espace R_4 à une dimension, l'abscisse d'un point de R_4 étant désignée par t . Formons alors l'espace produit $R_4 = R_3 \times R_1$ et munissons-le d'une structure d'espace de Riemann ⁽¹⁾ en définissant la forme fondamentale

$$(7.9) \quad d\tau^2 = v^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2.$$

Dans cet espace, les formules (7.4) et (7.5) définissent les géodésiques de longueur nulle, et les extrémales de l'intégrale (7.8) sont les projections de ces géodésiques sur l'espace R_3 , les projetantes étant les lignes le long desquelles t varie seul. Nous avons ainsi montré que les rayons lumineux de l'optique géométrique, donnés par le principe de Fermat, sont les projections sur l'espace physique, le long des lignes de temps, des bicaractéristiques de l'équation de propagation.

Inversement, considérons un rayon lumineux de l'optique géométrique. C'est une courbe C de R_3 dont les équations sont celles des extrémales de (7.8). A tout point M de C associons un point de R_4 dont la quatrième coordonnée soit égale à

$$(7.10) \quad t = \int_{M_0}^M \frac{\sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}}{v(x, y, z)}.$$

On obtient ainsi une géodésique de longueur nulle de R_4 muni de la

⁽¹⁾ On aura bien soin de ne pas confondre cet espace-temps, construit comme un espace-temps de configuration, avec l'espace-temps de la relativité restreinte, qui est (pseudo) euclidien et correspond à un indice $n(x, y, z)$ égal à 1.

métrique (7.9). Ces géodésiques sont les bicaractéristiques de toute une famille d'équations aux dérivées partielles dont les termes du second ordre sont seuls déterminés univoquement

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 F}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} + f\left(x, y, z, t, F, \frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}, \frac{\partial F}{\partial z}, \frac{\partial F}{\partial t}\right) = 0.$$

En principe, la fonction f peut être absolument quelconque. Cependant, si l'on veut que la limite obtenue avec une solution de type (7.2), où la constante k tend vers l'infini, soit justement l'équation (7.3) des caractéristiques, la fonction f doit être linéaire par rapport à F et à ses dérivées partielles du premier ordre.

Les résultats du paragraphe 6 constituent donc une méthode générale permettant non seulement de « descendre » d'une théorie ondulatoire basée sur une équation de propagation à une théorie géométrique basée sur un principe analogue à celui de Fermat, mais aussi de « remonter » d'une théorie géométrique à une théorie ondulatoire. Ils précisent, de plus, dans quelles limites le choix d'une équation d'onde reste arbitraire. Reprenant alors l'idée essentielle selon laquelle le principe d'Hamilton n'est qu'un principe de Fermat, nous allons chercher à écrire les équations aux dérivées partielles du second ordre admettant comme bicaractéristiques des courbes en correspondance biunivoque avec les trajectoires de la Mécanique classique.

8. Les équations de la dynamique analytique. — Dans tout ce qui suit nous raisonnerons sur le cas d'un corpuscule-point matériel de masse m dont la position est repérée dans l'espace physique au moyen de trois coordonnées fonctions du temps t . Il est bien évident que les calculs se généralisent d'eux-mêmes au cas d'un système de n points matériels, en remplaçant l'espace à trois dimensions par l'espace de configuration à $3n$ dimensions.

Pour conserver toute la généralité possible, nous supposerons que la position du point matériel est définie par trois coordonnées généralisées q^1, q^2, q^3 , définies par exemple à partir d'un repère cartésien fixe par :

$$x = x(q^1, q^2, q^3, t), \quad y = y(q^1, q^2, q^3, t) \quad z = z(q^1, q^2, q^3, t).$$

La force vive a alors pour expression

$$2T = m \left[\left(\frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial q^i} \frac{dq^i}{dt} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial q^i} \frac{dq^i}{dt} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial q^i} \frac{dq^i}{dt} \right)^2 \right]$$

et nous poserons comme d'habitude :

$$\begin{aligned} {}^2T_0 &= m \left[\left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)^2 \right], \\ {}^2T_1 &= 2m \left(\frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial q^i} + \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial y}{\partial q^i} + \frac{\partial z}{\partial t} \frac{\partial z}{\partial q^i} \right) \frac{dq^i}{dt} = 2b_i \dot{q}^i, \\ {}^2T_2 &= m \left(\frac{\partial x}{\partial q^i} \frac{\partial x}{\partial q^j} + \frac{\partial y}{\partial q^i} \frac{\partial y}{\partial q^j} + \frac{\partial z}{\partial q^i} \frac{\partial z}{\partial q^j} \right) \frac{dq^i}{dt} \frac{dq^j}{dt} = a_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j, \end{aligned}$$

Nous admettons que les forces qui s'exercent sur le corpuscule peuvent être soit de nature quelconque pourvu qu'elles dépendent d'un potentiel $V(q^1, q^2, q^3, t)$, soit de nature électromagnétique. Dans ce dernier cas, si $\vec{A}$ et V désignent respectivement le potentiel vecteur et le potentiel scalaire et si ε est la charge électrique portée par le point matériel, on sait qu'on peut faire dériver la force de Lorentz d'un potentiel généralisé

$$U = \varepsilon (\vec{V} - \vec{A} \cdot \vec{v}) = \varepsilon (V - A_i q^i)$$

par la formule

$$F_i = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}^i} - \frac{\partial U}{\partial q^i}.$$

Dans ces conditions et avec ces notations, le principe de Hamilton s'énonce : les trajectoires du point matériel sont les extrémales de l'intégrale d'action

$$(8.1) \quad I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i) dt = \int_{t_0}^{t_1} (T - V - U) dt.$$

Nous poserons désormais, pour simplifier les notations

$$b_i = b'_i + \varepsilon A_i, \quad c = T_0 - V' - \varepsilon V,$$

de sorte que la fonction de Lagrange prendra la forme

$$(8.2) \quad \mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i) = \frac{1}{2} a_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j + b_i \dot{q}^i + c.$$

On a évidemment $a_{ij} = a_{ji}$ et le déterminant $\alpha = \det a_{ij}$ est supposé essentiellement différent de 0. Les équations du mouvement s'écrivent donc :

$$(8.3) \quad a_{ij} \ddot{q}^j + [j^k, i] \dot{q}^j \dot{q}^k + \left(\frac{\partial a_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial b_i}{\partial q^j} - \frac{\partial b_j}{\partial q^i} \right) \dot{q}^j + \frac{\partial b_i}{\partial t} - \frac{\partial c}{\partial q^i} = 0$$

$[jk, i]$ désignant le symbole de Christoffel de première espèce formé sur les a_{ij} :

$$[jk, i] = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial a_{ki}}{\partial q^j} + \frac{\partial a_{ij}}{\partial q^k} - \frac{\partial a_{jk}}{\partial q^i} \right).$$

Comme cela s'était déjà produit au paragraphe 7 à propos du principe de Fermat, on voit sous cette forme que le principe de Hamilton ne se présente pas sous une forme convenable pour passer directement à une équation d'onde. Il nous faut donc chercher à modifier l'intégrale d'action pour la mettre sous une forme analogue à (6.6). Nous commencerons par la rendre plus symétrique en posant :

$$q^0 = t, \quad a_{00} = 2c, \quad a_{0i} = a_{i0} = b_i,$$

Puisque $\dot{q}^0 = 1$, nous pouvons écrire la fonction de Lagrange

$$(8.4) \quad \mathcal{L}(q^\alpha, \dot{q}^\alpha) = \frac{1}{2} a_{\alpha\beta} \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta,$$

les indices grecs $\alpha, \beta, \dots$ prenant les valeurs 0, 1, 2, 3. Comme $\ddot{q}^0 = 0$, les équations de Lagrange deviennent :

$$(8.5) \quad a_{i\beta} \ddot{q}^\beta + [\alpha\beta, i] \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta = 0.$$

Ces trois équations sont bien de la forme cherchée. Mais pour qu'elles réalisent l'extremum de l'intégrale de la fonction de Lagrange (8.4), elles doivent être accompagnées par une équation annulant l'expression

$$a_{0\beta} \ddot{q}^\beta + [\alpha\beta, 0] \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta.$$

Or, on voit par un calcul facile que

$$a_{0\beta} \ddot{q}^\beta + [\alpha\beta, 0] \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta = \frac{d}{dt} (b_i \dot{q}^i + 2c) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}$$

n'est pas nulle en général. En effet, multiplions (8.3) par $\dot{q}^i$ et contractons : on obtient

$$\frac{d}{dt} (a_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j - c) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = 0,$$

de sorte que finalement

$$(8.6) \quad a_{0\beta} \ddot{q}^\beta + [\alpha\beta, 0] \dot{q}^\alpha \dot{q}^\beta = \frac{d\mathcal{L}}{dt},$$

Suivant la méthode que nous avons employée pour mettre l'intégrale (7.8) de Fermat sous la forme (7.4), introduisons une variable supplé-

mentaire ξ en posant, par analogie avec (7.10) :

$$(8.7) \quad \xi = - \int_{t_0}^t \mathcal{L}(q^{\alpha}, \dot{q}^{\alpha}) dt,$$

L'équation (8.6) devient

$$\ddot{\xi} + a_{0\beta} \dot{q}^{\beta} + [\alpha\beta, 0] \dot{q}^{\alpha} \dot{q}^{\beta} = 0.$$

On obtiendra alors une écriture tensorielle en posant $q^i = \xi$ et en complétant le tenseur $a_{\alpha\beta}$, de façon à ne pas introduire de nouveaux symboles de Christoffel non nuls et à ne pas modifier les équations (8.5). Cela se fait très aisément en posant

$$a_{0i} = a_{i0} = 1, \quad a_{ik} = a_{ki} = a_{ii} = 0.$$

Nous pouvons alors réunir les équations (8.5) et (8.6) en l'équation unique

$$a_{\alpha\beta} \ddot{q}^{\beta} + [\text{BC}, \alpha] \dot{q}^{\beta} \dot{q}^{\gamma} = 0,$$

les indices majuscules prenant les valeurs 0, 1, 2, 3, 4. Quant à l'équation

$$a_{i\beta} \ddot{q}^{\beta} + [\text{BC}, i] \dot{q}^{\beta} \dot{q}^{\gamma} = 0$$

elle est automatiquement satisfaite puisqu'elle se réduit à

$$\frac{d^2 q^0}{dt^2} = \frac{d^2 t}{dt^2} = 0.$$

Il reste alors à vérifier que la condition (6.7), soit ici

$$a_{\alpha\beta} \dot{q}^{\alpha} \dot{q}^{\beta} = 2 \mathcal{L}(q^{\alpha}, \dot{q}^{\alpha}) + 2 \dot{\xi} = 0$$

est réalisée. Or cela résulte de la définition même de ξ (8.7).

Pour la commodité des calculs on peut alors introduire un paramètre arbitraire dénué de toute signification mécanique (formalisme dit homogène); si les variables $t = q^0, q^1, q^2, q^3, q^4 = \xi$ sont considérées comme des fonctions de ce paramètre, on peut résumer ainsi les résultats qui précèdent : les équations du mouvement du point matériel sont les équations des extrémales de l'intégrale

$$\int_{\tau_0}^{\tau_1} \Lambda \left(q^i, t, \xi, \frac{dq^i}{d\tau}, \frac{dt}{d\tau}, \frac{d\xi}{d\tau} \right) d\tau = \int_{\tau_0}^{\tau_1} \frac{1}{2} a_{\alpha\beta} \frac{dq^{\alpha}}{d\tau} \frac{dq^{\beta}}{d\tau} d\tau$$

qui satisfont à la condition

$$a_{\alpha\beta} \frac{dq^{\alpha}}{d\tau} \frac{dq^{\beta}}{d\tau} = 0$$

où l'on a posé :

$$\Lambda\left(q^i, t, \xi, \frac{dq^i}{d\tau}, \frac{dt}{d\tau}, \frac{d\xi}{d\tau}\right) = \frac{1}{2} a_{ij} \frac{dq^i}{d\tau} \frac{dq^j}{d\tau} + b_i \frac{dq^i}{d\tau} \frac{dt}{d\tau} + c \left(\frac{dt}{d\tau}\right)^2 + \frac{dt}{d\tau} \frac{d\xi}{d\tau},$$

9. Interprétation géométrique. Le théorème d'Eisenhart. — Les conclusions du paragraphe précédent sont susceptibles d'une traduction géométrique simple, tout à fait analogue à la traduction géométrique du principe de Fermat. Toutefois, alors que le principe de Fermat nous amenait à introduire un espace-temps riemannien quadridimensionnel, le même raisonnement nous conduit ici à introduire une variété riemannienne pentadimensionnelle, ce qui peut paraître dépourvu de sens physique. Cependant il convient de signaler que l'espace à quatre dimensions invoqué au paragraphe 7 semble, lui aussi, dénué de sens physique. En effet, comme nous l'avions signalé alors, il ne doit pas être confondu avec l'Univers de la théorie de la relativité restreinte; et le considérer comme un espace physique obligerait à introduire autant d'Univers que de milieux d'indice différent ⁽¹⁾. Et encore cela ne concerne-t-il que les milieux permanents, isotropes et non dispersifs ! Dans l'état actuel de la théorie, ce qui importe pour nous est, qu'à chaque instant, les êtres des différents espaces envisagés puissent être « projetés » dans l'espace physique à trois dimensions.

Lorsqu'en mécanique analytique, on considère le temps t comme une variable au même titre que les coordonnées généralisées (formalisme homogène), on est conduit à imaginer une variété à quatre dimensions E_4 , l'espace-temps de configuration. Un système de coordonnées locales particulier de cet espace est constitué par les paramètres q^i et le temps $t = q^0$. Ainsi, à toute position du corpuscule à l'instant t correspond un point M bien déterminé de E_4 , de sorte que le mouvement du point matériel est représenté par une trajectoire C dans cet espace-temps de configuration.

A côté de E_4 , introduisons un espace à une dimension E_1 , l'abscisse d'un point de E_1 étant désignée par ξ ou par q^4 . Considérons alors

⁽¹⁾ On comparera cette situation avec celle qui se présente dans la Théorie de la relativité lorsqu'on veut étudier les trajectoires des particules chargées dans un champ électromagnétique : on est alors amené à introduire autant d'espaces que de types de particules (ou de rapports $\frac{e}{m}$) [6], [11], [15].

l'espace produit $E_5 = E_4 \times E_1$, que nous appellerons espace d'Eisenhart. A tout point M situé sur une trajectoire C de E_4 associons le point P de E_5 dont la cinquième coordonnée soit définie par (8.7). Au mouvement du point matériel est ainsi associée une courbe Γ de E_5 qui se projette sur E_4 suivant la trajectoire C .

Définissons alors dans E_5 une structure d'espace de Riemann en y introduisant la forme fondamentale

$$(9.1) \quad ds^2 = \frac{1}{2} a_{AB} dq^A dq^B = \frac{1}{2} a_{ij} dq^i dq^j + b_i dq^i dt + c(dt)^2 + dt d\xi.$$

Les résultats du paragraphe précédent montrent que les courbes Γ définies ci-dessus sont les géodésiques de longueur nulle associées à ce ds^2 . On obtient ainsi un cas particulier d'un théorème plus général dû à M. L. P. Eisenhart [5], généralisé encore par MM. A. Lichnérowicz et Y. R. Thiry [11, 15].

Nous l'énonçons :

THÉOREME. — *Les trajectoires C représentant dans l'espace-temps de configuration E_4 le mouvement d'un point matériel défini par le principe d'Hamilton portant sur la fonction de Lagrange (8.2), sont les projections sur E_4 , le long des lignes coordonnées où ξ varie seul, des géodésiques de longueur nulle Γ de l'espace d'Eisenhart E_5 muni de la métrique riemannienne (non définie positive) (9.1).*

10. L'invariance de jauge de la mécanique. — Comme il est bien connu il est possible, dans l'énoncé du principe d'Hamilton, d'ajouter à la fonction de Lagrange $\mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i)$, la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction arbitraire $\theta(q^i, t)$ sans modifier les équations du mouvement [13, p. 201]. Par la suite, et pour des raisons qui apparaîtront bientôt, nous désignerons cette propriété sous le nom d'invariance de jauge de la mécanique. D'après ce qui précède, lorsque nous effectuons une telle transformation de jauge

$$(10.1) \quad \mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i) \rightarrow \mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i) + \frac{d\theta(q^i, t)}{dt}$$

nous devons abandonner la forme fondamentale (9.1) de l'espace d'Eisenhart pour la remplacer par la suivante :

$$ds'^2 = ds^2 + \frac{\partial \theta}{\partial q^i} dq^i dt + \frac{\partial \theta}{\partial t} (dt)^2,$$

c'est-à-dire que nous devons modifier la structure d'espace riemannien de E_3 .

Cependant, d'après la façon même dont nous l'avons construit, le tenseur métrique de l'espace d'Eisenhart a ses composantes α_{AB} , dans le système de coordonnées locales adoptées ici, qui ne dépendent pas de la nouvelle variable ξ ; ce qu'on exprime en disant que E_3 est cylindrique par rapport à la cinquième coordonnée ⁽¹⁾. Cette propriété est fondamentale puisque les équations de la dynamique peuvent être entièrement écrites à l'aide des coordonnées généralisées et du temps. Il en résulte qu'il est toujours possible de trouver un système de coordonnées adapté à la structure cylindrique de E_3 , c'est-à-dire tel que les composantes du tenseur métrique soient indépendantes de q^i .

À côté des changements de coordonnées usuels permis par la dynamique

$$t \rightarrow t' = \lambda t + \mu, \quad q^i \rightarrow q^{i'} = f^i(q^k, t), \quad \xi \rightarrow \xi' = \xi$$

et qui conservent la variété espace-temps de configuration E_4 définie par $\xi = 0$ (changements d'horloge et changements de repérage de l'espace), il existe des changements de coordonnées portant sur la variable ξ

$$(10.2) \quad t \rightarrow t' = t \quad q^i \rightarrow q^{i'} = q^i, \quad \xi \rightarrow \xi' = \xi + \theta(q^i, t)$$

et qui préservent la cylindricité; après un tel changement de coordonnées, la forme fondamentale devient en effet

$$\frac{1}{2} a_{ij} dq^{i'} dq^{j'} + \left(b_i - \frac{\partial \theta}{\partial q^i} \right) dq^{i'} dt' + \left(c - \frac{\partial \theta}{\partial t} \right) (dt')^2 + dt' d\xi'.$$

On voit ainsi que, lorsqu'on effectue simultanément une transformation de jauge (10.1) et un changement de coordonnées (10.2), la forme fondamentale de E_3 demeure inchangée, ce qui nous permet de donner une interprétation géométrique des changements de jauge de la mécanique : le ds^2 étant fixé une fois pour toutes par l'expression (9.1) et les géodésiques de longueur nulle Γ étant déterminées, effectuer un changement de jauge (10.1) est équivalent à effectuer un changement de « plan » de projection; au lieu de projeter Γ sur le sous-espace $\xi = 0$, nous les projetterons sur $\xi = \theta(q^i, t)$. On peut encore dire qu'un chan-

⁽¹⁾ Nous empruntons ici le langage des théories unitaires relativistes à cinq dimensions.

gement de jauge est un changement de section d'espace-temps de configuration. Nous reviendrons plus loin sur la signification mécanique qu'il est possible d'attribuer à ces transformations. Nous allons maintenant justifier la dénomination que nous leur avons attribuée.

On sait qu'en électromagnétisme, les potentiels scalaire V et vecteur $\vec{A}$ ne sont déterminés qu'à la transformation suivante près :

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \overrightarrow{\text{grad}} F, \quad V \rightarrow V - \frac{\partial F}{\partial t},$$

$F(q^i, t)$ étant une fonction arbitraire. Une telle transformation des potentiels est appelée transformation de jauge de l'électromagnétisme; elle conduit à remplacer le potentiel généralisé U dont dérive la force de Lorentz par le suivant :

$$U' = \varepsilon \left(V - \frac{\partial F}{\partial t} - \vec{A} \cdot \vec{v} - \vec{v} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} F \right) = U - \varepsilon \frac{dF}{dt}.$$

Il en résulte immédiatement qu'une telle transformation est équivalente à ce que nous avons appelé transformation de jauge de la mécanique :

$$\mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i) \rightarrow \mathcal{L}(q^i, t, \dot{q}^i) + \varepsilon \frac{dF}{dt},$$

CHAPITRE III.

LES MÉCANIQUES ONDULATOIRES.

11. L'équation aux dérivées partielles associée à la mécanique. — Nous sommes maintenant en mesure de former les équations aux dérivées partielles du second ordre dont les bicaractéristiques correspondent aux trajectoires de la dynamique classique. Autrement dit nous allons effectuer le passage de la « Mécanique géométrique » à la « Mécanique ondulatoire ». Bien entendu le terme « Mécanique ondulatoire » que nous employons ici ne doit pas faire illusion : il représente l'équivalent de l'optique ondulatoire au sens où Fresnel entendait ce terme et ne contient absolument aucune idée quantique. Il n'est, somme toute, que l'aboutissement mathématique des idées d'Hamilton.

Reprenons l'expression du tenseur métrique a_{AB} de l'espace d'Eisenhart obtenue au paragraphe 8 :

$$(11.1) \quad a_{AB} = \left[\begin{array}{c|ccc|c} 2c & b_1 & b_2 & b_3 & 1 \\ \hline b_1 & a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 \\ b_2 & a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ b_3 & a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right].$$

On voit immédiatement que :

$$\det a_{AB} = -\det a_{ij} = -a$$

qui n'est pas nul par hypothèse de sorte qu'on peut inverser la matrice a_{AB} pour former les composantes contravariantes a^{AB} de ce tenseur. De $a^{AB}a_{BC} = \delta_C^A$ on tire successivement :

$$\begin{aligned} a^{00} &= a^{0i} = a^{i0} = 0, & a^{0i} &= a^{i0} = 1, \\ a^{ij} &= a^{ji} & \text{avec} & \quad a^{ij}a_{jk} = \delta_k^i, \\ a^{ik} &= a^{ki} = -a^{ij}b_j, & a^{ik} &= a^{ij}b_i b_j - 2c; \end{aligned}$$

ce qu'on peut résumer par le tableau :

$$(11.2) \quad a^{AB} = \left[\begin{array}{c|ccc|c} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & a^{11} & a^{12} & a^{13} & -a^{1j}b_j \\ 0 & a^{21} & a^{22} & a^{23} & -a^{2j}b_j \\ 0 & a^{31} & a^{32} & a^{33} & -a^{3j}b_j \\ \hline 1 & -a^{1j}b_j & -a^{2j}b_j & -a^{3j}b_j & a^{ij}b_i b_j - 2c \end{array} \right].$$

Avant d'écrire les équations cherchées, il nous faut préciser la nature mathématique du champ que nous voulons associer à la dynamique. Or, de même que le passage du principe de Fermat à l'équation des ondes exposé au paragraphe 7 ne nous permettait pas d'introduire la véritable nature physique de la lumière, une théorie prenant pour base les seules équations du mouvement ne peut nous fournir aucune indication sur les caractères de ce champ. Nous ferons alors l'hypothèse la plus simple en admettant que le phénomène ondulatoire en question peut être représenté par une fonction scalaire $\Phi(q^i, t, \xi)$, moyennant quoi les diverses équations d'onde auront la forme

$$\frac{1}{2} a^{AB} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q^A \partial q^B} + f_1 \left(q^i, t, \xi, \Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial q^i}, \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) = 0,$$

la fonction f_1 demeurant arbitraire. Pour garder une forme tensorielle plus symétrique nous écrirons plutôt

$$(11.3) \quad \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \frac{\partial}{\partial q^A} \left(\sqrt{|a|} a^{AB} \frac{\partial \Phi}{\partial q^B} \right) + f \left(q^A, \Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial q^A} \right) = 0,$$

En résumé, nous pourrions donc énoncer :

THÉOREME. — *Les trajectoires C représentant, dans l'espace-temps de configuration E_4 , le mouvement d'un point matériel, et dont les équations sont obtenues à partir du principe d'Hamilton*

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{1}{2} a_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j + b_i \dot{q}^i + c \right) dt = 0$$

sont les projections sur E_4 , le long des lignes coordonnées relatives à la variable $\xi = q^i$, des bicaractéristiques d'une famille d'équations aux dérivées partielles du second ordre (11.3) dont les termes contenant les dérivées d'ordre 2 sont seuls déterminés univoquement à l'aide du tableau (11.2). Ces équations sont susceptibles de régir, dans l'espace E_5 d'Eisenhart, le comportement des « ondes mécaniques » d'Hamilton.

12. La mécanique ondulatoire quantique et l'équation de Schrödinger.

— L'équation générale que nous venons d'obtenir peut nous permettre d'introduire de façon simple la notion de *quanta*. En effet, d'après l'idée initiale de M. Louis de Broglie, confirmée par les expériences de Davisson et Germer, nous devons admettre que Φ n'est pas seulement un être mathématique purement abstrait mais est la traduction, certainement très imparfaite et très sommaire, d'un phénomène physique dont la véritable nature nous échappe encore aujourd'hui. C'est cette lacune de nos connaissances qui nous a conduits à admettre que le champ Φ est de nature scalaire, et c'est encore elle qui nous empêche de préciser l'expression de la fonction $f \left(q^A, \Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial q^A} \right)$ qui figure dans l'équation (11.3). Des considérations très générales portant par exemple sur le caractère tensoriel ou sur certaines invariances pourraient permettre de limiter le caractère arbitraire de f ; néanmoins, toujours pour la même raison de simplicité, nous supposons qu'elle est identiquement nulle. Nous admettons donc désormais que l'équation des « ondes de

Hamilton » associées à la fonction de Lagrange (8.2) s'écrit, en explicitant partiellement certains termes :

$$(12.1) \quad \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{|a|} a^{ij} \frac{\partial \Phi}{\partial q^j} \right) - a^{ij} b_j \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q^i \partial \xi} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t \partial \xi} \\ + \left(\frac{1}{2} a^{ij} b_i b_j - c \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \left[\frac{\partial \sqrt{|a|}}{\partial t} + \frac{\partial (\sqrt{|a|} a^{ij} b_j)}{\partial q^i} \right] \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} = 0.$$

Puisque nous avons projeté les bicaractéristiques de cette équation pour obtenir le mouvement du point matériel en termes d'espace-temps, il semble naturel de « projeter » aussi le champ Φ sur l'espace-temps de configuration E_4 . Or, du fait de la cylindricité de l'espace d'Eisenhart, la variable ξ ne figure pas dans les coefficients de cette équation et l'on pourra la séparer. Nous sommes donc conduits à chercher des ondes de type stationnaire en posant :

$$\Phi(q^i, t, \xi) = g(\xi) \Psi(q^i, t).$$

En reportant cette expression dans (11.2) il vient

$$g(\xi) \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{|a|} a^{ij} \frac{\partial \Psi}{\partial q^j} \right) \\ - g'(\xi) \left\{ a^{ij} b_j \frac{\partial \Psi}{\partial q^i} - \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \left[\frac{\partial \sqrt{|a|}}{\partial t} + \frac{\partial (\sqrt{|a|} a^{ij} b_j)}{\partial q^i} \right] \Psi \right\} \\ + g''(\xi) \left(\frac{1}{2} a^{ij} b_i b_j - c \right) \Psi = 0$$

et la séparation sera réalisée si

$$g(\xi) = k_1 g'(\xi) = k_2 g''(\xi),$$

k_1 et k_2 étant les deux constantes de séparation. Cela exige que

$$g(\xi) = C e^{k\xi},$$

C étant une constante d'intégration et $k_1 = k$, $k_2 = k^2$.

Maintenant, si Φ est rattachée de façon quelconque à une grandeur physique, il semble raisonnable d'exiger qu'elle soit toujours bornée; or cela exige que la constante k soit imaginaire pure, c'est-à-dire que le champ Φ soit essentiellement complexe. On voit ici comment s'introduit l'hypothèse faite arbitrairement par M. Schrödinger. Naturellement

cela implique que Φ n'est pas elle-même une grandeur physique; nous reviendrons plus loin sur ce point.

D'autre part, l'homogénéité ⁽¹⁾ exige que k ait la dimension de l'inverse d'une action. Il est donc extrêmement tentant de poser

$$k = -\frac{2\pi i}{h} = -\frac{i}{\hbar}$$

moeynnant quoi l'équation qui gouverne la fonction $\Psi(q^i, t)$ prend la forme :

$$(12.2) \quad \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{|a|} a^{ij} \frac{\partial \Psi}{\partial q^j} \right) + \frac{i}{\hbar} \left\{ a^{ij} b_j \frac{\partial \Psi}{\partial q^i} + \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \left[\frac{\partial \sqrt{|a|}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial q^i} (\sqrt{|a|} a^{ij} b_j) \right] \Psi \right\} - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} a^{ij} b_i b_j - c \right) \Psi = 0,$$

Pour voir ce que signifie cette équation, cherchons la forme à laquelle elle se réduit dans un cas particulier : comme au paragraphe 3 prenons un repère fixe et un système de coordonnées curvilignes x^1, x^2, x^3 tel que

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j.$$

Si le point matériel de masse m est soumis à un champ de forces dérivant du potentiel $V(x^1, x^2, x^3, t)$ la fonction de Lagrange prendra la forme

$$\mathcal{L}_3(x^i, t, \dot{x}^i) = \frac{1}{2} m g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j - V(x^i, t).$$

Les g_{ij} étant indépendants du temps, l'équation (12.2) prend la forme

$$(12.3) \quad \frac{1}{2m} \Delta \Psi - \frac{1}{\hbar^2} V \Psi - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0,$$

où Δ désigne l'opérateur laplacien dont l'expression est donnée en (2.7). On reconnaît là l'équation de Schrödinger (3.4).

⁽¹⁾ Comme en mécanique classique on remarquera que les variables q^A ne sont pas toutes de même dimension : si q^0 est toujours un temps [T] et q^i toujours une action [M][L]²[T]⁻¹, la dimension des q^i dépend du système de coordonnées utilisé dans l'espace à trois dimensions.

Ainsi, d'après la façon même dont nous l'avons obtenue, l'équation (12.2) apparaît comme la forme la plus générale qu'il soit possible de donner à l'équation de Schrödinger. Elle est valable dans tous les cas où les équations de Lagrange sont applicables, c'est-à-dire quel que soit le repère par rapport auquel on étudie le mouvement et quel que soit le système de coordonnées utilisé. Elle contient en particulier des termes qui tiennent compte des forces d'inertie d'entraînement et des forces de Coriolis. Malgré le nombre et l'étendue des travaux qui ont été consacrés à la mécanique quantique en général et à la théorie de Schrödinger en particulier, cette forme générale de l'équation des ondes n'avait pas, à notre connaissance, été signalée.

13. Le procédé de M. Schrödinger. — Comme exemple d'application du formalisme que nous venons de développer, nous allons justifier, dans le cas particulier d'une particule chargée en interaction avec un champ électromagnétique, le procédé, dû à M. Schrödinger, permettant de former automatiquement l'équation des ondes [4. p. 19]. On sait que ce procédé n'est utilisable qu'en coordonnées cartésiennes rectangulaires x, y, z . Pour une particule soumise à un champ de forces dérivant d'un potentiel la justification est obtenue par comparaison avec l'équation (3.4). Dans le cas d'interactions électromagnétiques on admet simplement que le procédé reste valable (toujours en coordonnées rectangulaires évidemment) et cela bien que l'expression des moments classiques ait varié. Si V désigne le potentiel scalaire et si A_x, A_y, A_z sont les trois composantes du potentiel vecteur $\vec{A}$, la fonction de Lagrange s'écrit

$$L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + e (A_x \dot{x} + A_y \dot{y} + A_z \dot{z} - V).$$

Le tableau des composantes du tenseur métrique de l'espace d'Eisenhart prend donc la forme :

$$a_{AB} = \left[\begin{array}{c|ccc|c} -2eV & eA_x & eA_y & eA_z & 1 \\ \hline eA_x & m & 0 & 0 & 0 \\ eA_y & 0 & m & 0 & 0 \\ eA_z & 0 & 0 & m & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

d'où l'on tire immédiatement

$$\det a_{AB} = -m^3 \neq 0,$$

$$a^{AB} = \left[\begin{array}{c|ccc|c} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & \frac{1}{m} & 0 & 0 & -\frac{\varepsilon}{m} A_x \\ 0 & 0 & \frac{1}{m} & 0 & -\frac{\varepsilon}{m} A_y \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{m} & -\frac{\varepsilon}{m} A_z \\ \hline 1 & -\frac{\varepsilon}{m} A_x & -\frac{\varepsilon}{m} A_y & -\frac{\varepsilon}{m} A_z & \frac{\varepsilon^2}{m} (A_x^2 + A_y^2 + A_z^2) + 2\varepsilon V \end{array} \right].$$

L'équation (12.1) des ondes d'Hamilton, que nous écrivons à titre purement indicatif ici est :

$$\frac{1}{2m} \Delta \Phi - \frac{\varepsilon}{m} \vec{A} \cdot \vec{\text{grad}} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t \partial \xi} + \left(\frac{\varepsilon^2}{2m} \vec{A}^2 + \varepsilon V \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \xi^2} - \frac{\varepsilon}{2m} \text{div} \vec{A} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} = 0$$

et si $\Phi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z, t) e^{-i \frac{\xi}{\hbar}}$ on obtient, après multiplication par $-\hbar^2$

$$(13.1) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - \frac{i\hbar}{m} \varepsilon \vec{A} \cdot \vec{\text{grad}} \Psi + i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \left(\frac{\varepsilon^2}{2m} \vec{A}^2 + \varepsilon V \right) \Psi - \frac{i\hbar}{2m} \varepsilon \text{div} \vec{A} \Psi = 0,$$

ce qui est bien l'équation d'onde obtenue en remplaçant, dans la fonction de Hamilton

$$H = \frac{1}{2m} [(p_x - \varepsilon A_x)^2 + (p_y - \varepsilon A_y)^2 + (p_z - \varepsilon A_z)^2] + \varepsilon V,$$

$$p_x \text{ par } i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \text{ par } i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad \text{et} \quad p_z \text{ par } i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

On pourrait vérifier que, dans le cas où l'on utilise des coordonnées curvilignes, il suffit de remplacer les dérivations partielles par des dérivations covariantes pour généraliser le procédé de Schrödinger [2, p. 200] et obtenir ainsi l'équation (12.3). Il ne semble cependant pas possible de généraliser encore ce procédé pour obtenir l'équation générale (12.2) à partir de la fonction de Hamilton

$$H = \frac{1}{2} a^{ij} (p_i - b_i) (p_j - b_j) + c,$$

14. L'invariance de jauge de la mécanique ondulatoire quantique. — Au paragraphe 10 nous avons discuté de l'invariance de jauge de la mécanique et nous avons donné du changement de jauge

$$(14.1) \quad \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} + \frac{d\theta}{dt}$$

une interprétation géométrique comme changement de section d'espace-temps de configuration dans l'espace riemannien d'Eisenhart. Nous nous proposons maintenant de discuter sa répercussion en mécanique ondulatoire quantique.

Sur les ondes d'Hamilton $\Phi(q^i, t, \xi)$ qui se propagent dans E_n , un changement de jauge (14.1) induit évidemment la transformation

$$\Phi(q^i, t, \xi) \rightarrow \Phi[q^i, t, \xi + \theta(q^i, t)]$$

de sorte que les ondes $\Psi(q^i, t)$ de l'espace-temps de configuration subissent la transformation

$$\Psi(q^i, t) \rightarrow \Psi(q^i, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \theta(q^i, t)}.$$

Lorsqu'on passe de l'espace-temps de configuration $\xi = 0$ à l'espace-temps de configuration $\xi = \theta(q^i, t)$, les trajectoires C du point matériel restent inchangées en ce sens qu'un point M de coordonnées (q^i, t) est remplacé par un point M' de mêmes coordonnées : cela tient au fait que les projetantes, lignes coordonnées relatives à ξ , sont des lignes de longueur nulle. Plus généralement, les êtres géométriques (scalaires, vecteurs, tenseurs, etc.) qui sont susceptibles de représenter des grandeurs physiques doivent être invariants par changement de jauge. C'est ainsi que la fonction d'onde elle-même ne peut être considérée comme une grandeur physique ; nous l'avions par ailleurs déjà constaté puisqu'elle est complexe.

Il n'est pas dans nos intentions de reprendre ici l'exposé systématique de l'interprétation probabiliste de la mécanique ondulatoire quantique ; d'autres l'ont fait mieux que nous ne saurions le faire, et avec plus d'autorité. Indiquons seulement, en renvoyant pour les détails aux nombreux traités, et notamment à [4] pour un examen critique, qu'on considère la fonction Ψ comme un simple instrument mathématique, à partir duquel on peut construire certaines grandeurs ayant un sens

physique intrinsèque, c'est-à-dire invariantes par transformations de jauge. C'est par exemple le cas du scalaire

$$(14.2) \quad \rho = \Psi \bar{\Psi} = |\Psi|^2$$

qui, après normalisation par la condition

$$(14.3) \quad \int \Psi \bar{\Psi} \sqrt{|a|} dq^1 \wedge dq^2 \wedge dq^3 = 1$$

est interprété comme la probabilité de présence du corpuscule. C'est aussi le cas du vecteur de composantes :

$$(14.4) \quad I_k = \frac{1}{2} i \hbar \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x^k} - \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x^k} \Psi \right) - b_k |\Psi|^2,$$

Ces deux grandeurs sont liées par une relation du type équation de continuité qu'on obtient par un calcul classique :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{|a|} \rho) + \frac{\partial}{\partial x^k} (\sqrt{|a|} a^{ik} I_i) = 0,$$

Elle conduit à imaginer un fluide fictif, le fluide de probabilité, de densité ρ dont le vecteur courant est le vecteur de composante I_k .

15. La théorie de la double solution. — Pour essayer de réaliser la fusion physique des aspects ondulatoire et corpusculaire de la matière au niveau atomique. M. Louis de Broglie avait entrepris, entre 1924 et 1927, l'élaboration d'une théorie susceptible de donner une description de la réalité physique plus complète que celle que procure l'interprétation orthodoxe de la mécanique ondulatoire quantique. A la suite de travaux de MM. D. Bohm et J. P. Vigier il a repris, depuis 1951, cette théorie, la théorie de la double solution, dont nous allons tenter de résumer brièvement les idées essentielles. Pour M. Louis de Broglie un corpuscule serait un phénomène ondulatoire étendu $u(q^i, t)$ contenant une très petite région, le corpuscule au sens étroit du terme, où le champ prendrait des valeurs extrêmement élevées. Cette description permettrait de comprendre pourquoi le mouvement des particules n'est pas soumis aux lois de la mécanique classique, mais dépend au contraire des conditions de la propagation de l'onde environnante. Le développement de ces idées directrices conduit à supposer que la véritable équation régissant l'évolution de l'onde u doit être en toute rigueur non linéaire.

Cependant, en première approximation et hors de la très petite région de grande concentration du champ, l'équation de Schrödinger doit fournir une description satisfaisante des phénomènes. A cet ordre d'approximation, M. Louis de Broglie admet l'hypothèse suivante : l'onde u doit pouvoir se représenter comme la somme $u_0 + v$ de deux solutions de l'équation de Schrödinger, l'une u_0 comportant une singularité ponctuelle au centre de la région de grande concentration et devenant très petite, voire négligeable, hors de cette région, l'autre v étant régulière et devant coïncider, à un facteur constant près, avec l'onde $\Psi(q^i, t)$ habituellement considérée. Moyennant cette hypothèse, il peut établir le résultat suivant, déjà connu en 1927 sous le nom de formule du guidage : la singularité de u se déplace dans l'espace avec la vitesse instantanée

$$\vec{v} = -\frac{1}{m} \overrightarrow{\text{grad}} \varphi,$$

φ étant la phase de l'onde Ψ ou de l'onde u puisque, loin de la singularité,

$$\Psi \simeq C u \simeq C v$$

C étant un facteur constant. Écrite sous la forme :

$$m \vec{v} = \vec{p} = -\overrightarrow{\text{grad}} \varphi,$$

la formule du guidage apparaît comme la généralisation naturelle de la formule classique (2.3) de la théorie de Jacobi.

L'hypothèse précédente permet encore de préciser les rapports existant entre cette théorie et la théorie probabiliste usuelle : un observateur peut construire une fonction Ψ proportionnelle à la « partie externe » v de l'onde physique, avec un coefficient de proportionnalité arbitraire puisque l'équation de Schrödinger est linéaire. En particulier il pourra choisir la valeur de ce coefficient en fonction de ses connaissances momentanées, par une condition de normalisation du Ψ de type (14.3) portant sur toute la région de l'espace où il sait pouvoir trouver le corpuscule.

Tels sont les principes essentiels de la théorie de la double solution sous la forme que leur a donné M. Louis de Broglie dans un livre récent consacré à cette théorie [4], et auquel nous renvoyons pour plus de détails, ainsi que pour les généralisations concernant la théorie relativiste et la théorie des particules à spin. Cependant M. Louis de Broglie

a toujours raisonné dans ses exposés en partant de l'équation de Schrödinger écrite sous la forme (3.4), c'est-à-dire en se plaçant dans un système de coordonnées fixe (repère absolu de la mécanique classique). Nous nous proposons de reprendre ses calculs dans le cadre du formalisme que nous venons de développer de façon à obtenir l'expression générale de la formule du guidage.

16. — La formule du guidage de M. Louis de Broglie. — Supposons qu'il nous soit permis de nous placer à l'approximation citée ci-dessus, à savoir que le comportement de l'onde réelle (singulière) $u(q^i, t)$ puisse être considéré comme régi par l'équation de Schrödinger que nous prenons sous la forme (12.2). Mettons en évidence l'amplitude et la phase de cette onde en écrivant :

$$u(q^i, t) = A(q^i, t) e^{\frac{i}{\hbar} \varphi(q^i, t)}$$

$A(q^i, t)$ et $\varphi(q^i, t)$ étant deux fonctions réelles. Si nous reportons cette expression dans (12.2) nous obtenons, en séparant les termes réels des termes imaginaires purs les deux équations :

$$(16.1) \quad \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{|a|} a^{ij} \frac{\partial A}{\partial q^j} \right) - \frac{1}{\hbar^2} A \left[\frac{1}{2} a^{ij} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^i} + b_i \right) - c - \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right] = 0$$

$$(16.2) \quad a^{ij} \frac{\partial A}{\partial q^i} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right) - \frac{\partial A}{\partial t} + A \frac{1}{2\sqrt{|a|}} \left\{ \frac{\partial}{\partial q^i} \left[\sqrt{|a|} a^{ij} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right) \right] - \frac{\partial \sqrt{|a|}}{\partial t} \right\} = 0.$$

Si nous supposons connue la phase $\varphi(q^i, t)$ nous pouvons considérer la seconde de ces équations comme une équation linéaire du premier ordre déterminant l'amplitude. Elle s'intègre par la méthode classique en formant le système caractéristique

$$(16.3) \quad \frac{dq^1}{a^{1j} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right)} = \dots = -dt$$

$$= - \frac{dA}{\frac{1}{2\sqrt{|a|}} \left\{ \frac{\partial}{\partial q^i} \left[\sqrt{|a|} a^{ij} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right) \right] - \frac{\partial \sqrt{|a|}}{\partial t} \right\}}.$$

Les trois premières de ces équations différentielles peuvent encore s'écrire :

$$(16.4) \quad \frac{dq^i}{dt} = \dot{q}^i = -a^{ij} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right),$$

Elles déterminent, dans l'espace-temps de configuration, une famille de courbes C qui dépendent de trois paramètres $\lambda^1, \lambda^2, \lambda^3$:

$$(16.5) \quad q^i = q^i(t, \lambda^1, \lambda^2, \lambda^3)$$

ou encore, puisque le déterminant fonctionnel

$$(16.6) \quad J = \frac{D(q^1, q^2, q^3)}{D(\lambda^1, \lambda^2, \lambda^3)}$$

ne s'annule pas [16, p. 318]

$$(16.7) \quad f^i(t, q^k) = \lambda^i.$$

En reportant les expressions (16.5) dans la dernière des équations (16.3), on obtient par un calcul facile :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Lambda} \frac{d\Lambda}{dt} &= - \frac{1}{2 \sqrt{|a|}} \left\{ \frac{\partial}{\partial q^i} \left[\sqrt{|a|} a^{ij} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right) \right] - \frac{\partial \sqrt{|a|}}{\partial t} \right\} \\ &= - \frac{1}{2 J \sqrt{|a|}} \frac{\partial (J \sqrt{|a|})}{\partial t} \end{aligned}$$

de sorte que l'intégrale générale de l'équation (16.2) peut s'écrire

$$(16.8) \quad \Lambda(q^k, t) = \frac{\mathcal{F}[f^i(q^k, t)]}{(J \sqrt{|a|})^{\frac{1}{2}}}$$

la fonction $\mathcal{F}(\lambda^1, \lambda^2, \lambda^3)$ étant choisie arbitrairement.

Pour achever la détermination de l'amplitude, c'est-à-dire pour déterminer la fonction $\mathcal{F}(\lambda^i)$ restée arbitraire, il reste à reporter (16.8) dans l'équation (16.1) qu'il faudra alors intégrer ⁽¹⁾ en tenant compte des conditions physiques à imposer à $\Lambda(q^i, t)$ (conditions aux limites par exemple). Supposons cette détermination effectuée et supposons encore

⁽¹⁾ On obtient ainsi une équation aux dérivées partielles dont les coefficients dépendent des λ^i et du temps; elle doit être vérifiée par une fonction $\mathcal{F}$ qui ne dépend pas du temps. Pour qu'il en soit ainsi, il faut que les coefficients vérifient certaines conditions, ce qui signifie que la phase φ ne peut être choisie arbitrairement. Nous supposons que la phase a été choisie pour que ce problème soit possible.

que la fonction obtenue possède un point singulier pour certaines valeurs λ^i_∞ des paramètres λ^i . Alors, dans l'espace-temps de configuration, la fonction d'onde $u(q^i, t)$ sera infinie tout le long d'une courbe C_∞ définie par les équations :

$$q^i = q^i(t, \lambda^1_\infty, \lambda^2_\infty, \lambda^3_\infty)$$

Autrement dit, le point où le champ $u(q^i, t)$ devient infini se déplace dans l'espace avec une vitesse de composantes :

$$\dot{q}^i = -a^{ij} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^j} + b_j \right)$$

Telle est l'expression générale de la formule du guidage. Dans un repère fixe et en présence d'un champ électromagnétique, cette formule se réduit à :

$$\vec{v} = -\frac{1}{m} (\overrightarrow{\text{grad } \varphi} - e \vec{A})$$

ce qui est bien la limite non relativiste de la formule du guidage obtenue par M. Louis de Broglie à partir de l'équation de Klein-Gordon [4, p. 109].

Il faut encore remarquer que, dans ce raisonnement, il est possible de remplacer la relation « $A(q^i, t)$ devient infinie pour $\lambda^i = \lambda^i_\infty$ » par la suivante « $A(q^i, t)$ prend la valeur A_0 pour $\lambda^i = \lambda^i_0$ ». Les points où $A(q^i, t) = A_0$ décrivent des courbes C_0 dans l'espace-temps de configuration, courbes dont les équations sont données par (16.5) où l'on donne aux λ^i les valeurs λ^i_0 ; la vitesse de ces points est encore donnée par la formule du guidage. Ce résultat peut-être obtenu de façon apparemment différente en remarquant que, lorsque dans l'expression (14.4) du vecteur I_k on remplace $\Psi(q^i, t)$ par $A(q^i, t) e^{\frac{i}{\hbar} \varphi(q^i, t)}$, on obtient :

$$I_k = -A^2(q^i, t) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^k} + b_k \right),$$

Cette relation montre que les trajectoires C , que la théorie de la double solution attribue aux corpuscules, ne sont pas autre chose que les trajectoires du fluide de probabilité défini au paragraphe 14.

17. L'invariance de jauge et la théorie de la double solution. — Si nous effectuons sur la fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ la transformation de jauge définie par la formule (14.1) nous avons vu que la phase $\varphi(q^i, t)$

de l'onde se trouve remplacée par $\varphi(q^i, t) + \theta(q^i, t)$. Comme d'autre part les coefficients b_i deviennent $b_i + \frac{\partial \theta}{\partial q^i}$, il en résulte immédiatement que la vitesse $\dot{q}^i$ donnée par la formule du guidage est invariante par cette transformation. Ce résultat est satisfaisant; il ne fait que traduire le fait que le vecteur courant I_k est intrinsèquement défini.

Il nous faut cependant ajouter une remarque importante que nous devons à M. Louis de Broglie ⁽¹⁾. Un changement de jauge arbitraire modifie évidemment la fonction d'onde de façon arbitraire. Cette conclusion est entièrement acceptable lorsqu'on adopte le point de vue de l'interprétation probabiliste où la fonction Ψ est une construction purement mathématique servant à représenter les distributions de probabilité; il suffit que les changements de jauge n'altèrent pas la probabilité des phénomènes observables, calculée à partir de Ψ . Mais si l'on admet l'existence par delà l'onde fictive Ψ , d'une onde physique à caractère concret, telle que l'onde $u(q^i, t)$ de la théorie de la double solution, la phase de cette onde ne doit absolument plus rien contenir d'arbitraire ⁽²⁾; ce qui signifie que le caractère arbitraire de la jauge ne doit être qu'une apparence, ce qui, somme toute, est fort plausible si l'on songe que l'équation d'onde véritable n'est pas linéaire.

Considérons alors le cas où l'onde représente un corpuscule en interaction avec un champ électromagnétique. Si le changement de phase provient d'un changement de jauge effectué sur les potentiels électromagnétiques la conclusion précédente entraîne qu'en réalité les potentiels vecteur et scalaire ont des valeurs bien déterminées et, par suite, peuvent être considérés comme des grandeurs physiques. On retrouve là une conclusion à laquelle M. Louis de Broglie était déjà parvenu dans une théorie apparemment sans rapport avec celle qui nous occupe ici, la théorie du photon [3, p. 56]. Cette détermination des potentiels résulte alors de l'hypothèse selon laquelle la masse propre du photon serait évanouissante mais non rigoureusement nulle.

Il existe cependant aussi des transformations de jauge de la mécanique, même lorsqu'il n'y a pas d'interaction électromagnétique, et l'on peut se demander quelles conséquences physiques peuvent résulter de l'aban-

⁽¹⁾ Communication personnelle.

⁽²⁾ Sauf bien sûr une constante arbitraire, qui correspond au choix arbitraire de l'origine du temps.

don de la possibilité de telles transformations. Pour répondre à cette question, envisageons le mouvement d'un point matériel libre de masse m par rapport à un certain repère fixe R portant, pour simplifier, un système de coordonnées cartésiennes orthogonales. Les équations du mouvement s'obtiennent à partir de la fonction de Lagrange :

$$\mathcal{L}(t, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2).$$

Imaginons maintenant un nouveau repère R' (qu'on pourra matérialiser par un fluide par exemple) animé, par rapport au repère R , d'un mouvement défini par un champ de vitesses $\vec{v}(x, y, z, t)$ de composantes v_x, v_y, v_z . Pour étudier le mouvement du point matériel par rapport à R' nous pouvons utiliser la théorie du mouvement relatif : les équations du mouvement s'obtiendront à partir de la fonction de Lagrange

$$\mathcal{L}(x, y, z, t, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \frac{1}{2} m [(\dot{x} + v_x)^2 + (\dot{y} + v_y)^2 + (\dot{z} + v_z)^2],$$

à condition d'introduire au second membre des équations des forces d'inertie convenables. Si le champ de vitesses $\vec{v}(x, y, z, t)$ est supposé dériver d'un potentiel $\frac{1}{m} \theta(x, y, z, t)$ par la formule

$$\vec{v}(x, y, z, t) = - \frac{1}{m} \overrightarrow{\text{grad}} \theta(x, y, z, t),$$

c'est-à-dire si le mouvement est supposé irrotationnel, les forces d'inertie seront données simplement par :

$$\vec{F} = -m \left(\vec{v} \overrightarrow{\text{grad}} \right) \vec{v} - m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = - \text{grad} \left[\frac{1}{2m} (\text{grad } \theta)^2 - \frac{\partial \theta}{\partial t} \right].$$

Elles dérivent donc d'un potentiel de sorte que les équations du mouvement relatif à R' pourront s'obtenir directement à partir de la fonction de Lagrange

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2} m \left[\left(\dot{x} + \frac{1}{m} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\dot{y} + \frac{1}{m} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 + \left(\dot{z} + \frac{1}{m} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^2 \right] - \left[\frac{1}{2m} (\text{grad } \theta)^2 - \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] \\ &= \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{d\theta}{dt}. \end{aligned}$$

Ainsi donc une transformation de jauge peut s'interpréter comme le passage du mouvement relatif à un certain repère R au mouvement relatif à un autre repère R' tout en conservant le même système de coordonnées. On vérifie aisément que, dans le cas général, le champ de

vitesse du repère R' par rapport au repère R (champ de vitesses d'entraînement) a pour composantes

$$v^i = -\alpha^{ik} \frac{\partial \theta(q^i, t)}{\partial q^k}$$

et que le potentiel des forces d'inertie correspondantes est

$$\frac{1}{2} \alpha^{ij} \frac{\partial \theta}{\partial q^i} \frac{\partial \theta}{\partial q^j} + \alpha^{ij} b_i \frac{\partial \theta}{\partial q^j} - \frac{\partial \theta}{\partial t}.$$

En définitive, nous voyons que l'invariance de jauge de la mécanique newtonnienne ne fait que traduire la possibilité qu'a un observateur d'étudier un mouvement par rapport à n'importe quel système de référence de son choix. Si donc, comme le propose M. Louis de Broglie, on admet que le caractère arbitraire de la jauge n'est qu'apparente il faut admettre corrélativement qu'il existe dans la nature un système de référence privilégié et que ce n'est que par rapport à ce repère absolu que l'onde $u(q^i, t)$ et son comportement doivent être considérés. Pour matérialiser ce repère absolu il est alors possible d'envisager avec MM. D. Bohm et J. P. Vigier, l'existence d'un éther ou milieu subquantique sous-jacent. Naturellement l'existence de cet éther ne se manifesterait qu'au niveau des particules élémentaires.

La conclusion à laquelle nous aboutissons ainsi peut paraître très restrictive. En fait, elle ne vaut que parce que nous nous sommes toujours placés sous les hypothèses de la mécanique classique. Nous rencontrons ainsi les mêmes difficultés que celles qu'avait rencontrées l'optique électromagnétique prérelativiste. En réalité, une étude analogue faite à partir des hypothèses qui sont à la base de la théorie de la Relativité devrait permettre de remplacer le repère absolu lié au milieu subquantique par l'ensemble des repères galiléens, qui s'en déduisent par un mouvement rectiligne et uniforme.

CHAPITRE IV.

QUELQUES PROPRIÉTÉS DES ONDES D'HAMILTON,

18 Sur les hypothèses du paragraphe 12. — Pour conclure ce travail, nous nous proposons d'examiner diverses possibilités de développement de la théorie à partir de l'équation (12.1) des ondes d'Hamilton. Toute-

fois, ce travail étant essentiellement consacré aux équations de la mécanique ondulatoire, nous nous bornerons à signaler ces possibilités en renvoyant leur étude détaillée et leur interprétation physique à un travail ultérieur.

L'onde $\Phi(q^i, t, \xi)$ d'Hamilton se propage dans l'espace E_5 d'Eisenhart, espace que nous avons défini au paragraphe 9 comme le produit de l'espace-temps de configuration E_4 par une variété à une dimension E_1 sur laquelle nous n'avons pas formulé d'hypothèses particulières, ce produit étant muni de la forme quadratique fondamentale (9.1). Pour pouvoir attacher une signification quelconque à cette onde il nous a fallu en chercher une traduction en termes d'espace et de temps en considérant les ondes de type stationnaire par rapport à la cinquième coordonnée ξ :

$$(18.1) \quad \Phi(q^i, t, \xi) = \Psi(q^i, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \xi}$$

hypothèse qui entraîne que $\Psi(q^i, t)$ satisfait à l'équation (12.1). Cependant, si cette méthode nous permet de comprendre la raison de l'apparition de termes imaginaires dans l'équation de Schrödinger, elle nous oblige à supposer que $\Phi(q^i, t, \xi)$ est elle-même une grandeur complexe; ce qui semble assez arbitraire puisque l'équation d'onde (12.1) est réelle. Il est possible d'éviter cette hypothèse en remplaçant (18.1) par

$$(18.2) \quad \Phi(q^i, t, \xi) = \Psi(q^i, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \xi} + \overline{\Psi(q^i, t)} e^{\frac{i}{\hbar} \xi}.$$

Si nous reportons cette expression dans l'équation (12.1) nous obtenons cette fois simultanément, pour $\Psi(q^i, t)$ l'équation de Schrödinger, et pour $\overline{\Psi(q^i, t)}$ l'équation complexe conjuguée. Ainsi se trouvent unifiées en un même symbole mathématique Φ les deux fonctions d'onde Ψ et $\overline{\Psi}$ qui, dans la théorie de Schrödinger sont inséparables l'une de l'autre et qui jouent un rôle symétrique.

Parmi tous les êtres mathématiques que nous avons introduits dans l'espace E_5 , seule la fonction d'onde $\Phi(q^i, t, \xi)$ dépend effectivement de la cinquième coordonnée, et elle en dépend périodiquement. Il en résulte que nous pouvons sans inconvénient supposer que ξ varie seulement entre 0 et $\hbar$, autrement dit que la variété à une dimension E_1 est homéomorphe à une circonférence. Avec cette hypothèse ξ apparaît

comme une variable angulaire et une transformation de jauge comme une rotation d'angle $\theta(q^i, t)$ sur cette circonférence. On peut alors se demander si la représentation (18.2) n'est pas trop restrictive et s'il n'est pas préférable d'envisager *a priori*, pour représenter $\Phi(q^i, t, \xi)$, un développement complet en série de Fourier

$$(18.3) \quad \Phi(q^i, t, \xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Psi_n(q^i, t) e^{-\frac{i}{\hbar} n \xi}$$

la réalité de Φ étant encore obtenue en exigeant que $\Psi_{-n}(q^i, t) = \overline{\Psi_n(q^i, t)}$. En reportant (18.3) dans l'équation (12.1), on constate que $\Psi_n(q^i, t)$ obéit à une équation analogue à celle de Schrödinger, mais où la constante de Planck aurait été divisée par n . Quant à $\Psi_{-n}(q^i, t)$, il satisfait évidemment à l'équation complexe conjuguée. Pour examiner certaines conséquences de cette hypothèse nous allons d'abord étudier une propriété générale des coefficients de Fourier d'une fonction.

19. Une propriété des coefficients de Fourier. — Considérons une fonction $F(x)$ d'une variable réelle x , de période 2π et développable en série de Fourier

$$(19.1) \quad F(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i n x},$$

Effectuons le changement de variable défini par

$$(19.2) \quad x' = x + \alpha f(x)$$

$f(x)$ étant une fonction réelle périodique et de période 2π , développable en série de Fourier :

$$f(x) = \sum_{\rho=-\infty}^{\infty} f_{\rho} e^{i \rho x} \quad (\overline{f_{\rho}} = f_{-\rho})$$

et α étant un paramètre que nous supposons infiniment petit (transformation infinitésimale). D'après l'hypothèse, on peut admettre que $F(x)$ est définie sur une circonférence unité, x représentant l'abscisse curviligne. La transformation (19.2) revient à supposer que chaque point x de cette circonférence est animé d'un mouvement vibratoire, sorte de fluctuation de très faible amplitude, autour de sa position initiale.

Après une telle transformation, la fonction $F(x')$ pourra de nouveau être décomposée en série de Fourier

$$(19.3) \quad F(x') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c'_n e^{inx'}$$

et nous nous proposons de calculer les nouveaux coefficients c'_n en fonction des anciens. Pour cela remarquons que, puisque la transformation (19.2) est infinitésimale, elle s'inverse immédiatement en

$$x = x' - \alpha f(x') = x' - \alpha \sum_{p=-\infty}^{\infty} f_p e^{ipx'}.$$

En reportant cette expression dans (19.1), nous obtenons

$$(19.4) \quad F(x') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \varphi_n(x'),$$

les fonctions $\varphi_n(x')$ constituant l'ensemble des fonctions orthogonales transformé de l'ensemble des e^{inx} . Comme on a d'une part :

$$e^{inx} = e^{in[x' - \alpha f(x')]} = e^{inx'} - i\alpha \sum_{k=-\infty}^{\infty} n f_k e^{i(n+k)x'}$$

et d'autre part

$$\frac{dx}{dx'} = 1 - i\alpha \sum_{k=-\infty}^{\infty} k f_k e^{ikx'} = 1 - \frac{i\alpha}{2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} k f_k e^{ikx'} + \frac{i\alpha}{2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} k f_{-k} e^{-ikx'}$$

la condition d'orthogonalité s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{inx} e^{-ipx} dx &= \int_0^{2\pi} \varphi_n(x') \overline{\varphi_p(x')} dx' \\ &= \int_0^{2\pi} \left[e^{inx'} - i\alpha \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(n + \frac{k}{2} \right) e^{i(n+k)x'} \right] \\ &\quad \times \left[e^{-ipx'} + i\alpha \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(p + \frac{k}{2} \right) e^{-i(p+k)x'} \right] dx', \end{aligned}$$

de sorte que

$$\varphi_n(x') = e^{inx'} - i\alpha \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{n+j}{2} f_{j-n} e^{ijx'}$$

et, en reportant dans (19.4) puis en comparant avec (19.3)

$$(19.5) \quad c'_n = c_n - i\alpha \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{n+j}{2} f_{n-j} c_j,$$

Introduisons alors la matrice T de composantes

$$(19.6) \quad T_{np} = \frac{n+p}{2} f_{n-p}.$$

Puisque $f(x)$ est réelle, cette matrice est hermitienne, de sorte que la matrice de transformation $\delta_{np} - i\alpha T_{np}$, qui figure dans (19.5) est unitaire.

Étudions la matrice T . On voit sur (19.6) que le terme f_k ne figure que sur la parallèle à la diagonale principale décalée de k rangs vers la gauche, donc

$$\begin{aligned} T_{np} &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{n+p}{2} f_k \delta_{n-k,p} \\ &= f_0 n \delta_{np} + \sum_{k=1}^{\infty} k f_k (F_k)_{np} + \sum_{k=1}^{\infty} k f_k (G_k)_{np} \end{aligned}$$

où l'on a posé

$$(F_k)_{np} = \frac{n+p}{2k} \delta_{n-k,p}; \quad (G_k)_{np} = \frac{n+p}{2k} \delta_{n+k,p}.$$

Le calcul du commutateur de ces deux matrices, nous amène à leur associer la matrice diagonale d'éléments $(H_k)_{np} = \frac{n}{k} \delta_{np}$ et l'on a alors :

$$[F_k, G_k] = -2H_k; \quad [H_k, F_k] = F_k; \quad [H_k, G_k] = -G_k.$$

Ces relations sont les relations de structure de l'Algèbre de Lie du groupe des rotations d'un espace pseudo-euclidien à trois dimensions [1, p. 604, éq. §.2.2 a, §.2.3], groupe des transformations conservant la forme quadratique

$$(\eta_0)^2 - (\eta_1)^2 - (\eta_2)^2.$$

La matrice H_k est associée aux rotations autour de l'axe $O\eta_0$ tandis que les rotations autour de $O\eta_1$ et $O\eta_2$ sont représentées respectivement par les matrices $\frac{1}{2}(F_k + G_k)$ et $-i\frac{1}{2}(F_k - G_k)$. Ce sont ces deux matrices qui ont été utilisées par M. O. Hara [8] dans une étude analogue à celle-ci. Nous renvoyons au Mémoire cité de M. V. Bargmann pour une

étude détaillée de ces relations de structure et du groupe des rotations correspondant.

20. Application aux ondes Φ . — Revenons maintenant à la fonction d'onde $\Phi(q^i, t, \xi)$ et à sa représentation (18.3). Parmi toutes les transformations qui laissent invariante l'équation (11.3) des ondes d'Hamilton, nous n'avons jusqu'à présent envisagé que les changements de coordonnées d'espace et de temps et les transformations de jauge (10.2), transformations qui conservent toutes deux le caractère cylindrique de E_s . Cependant, les transformations de coordonnées de E_s , si elles conservent l'équation (11.3), ne peuvent pas être retenues ici dans toute leur généralité car les composantes a_{ij} du tenseur métrique a_{AB} doivent se transformer entre elles comme les composantes d'un tenseur de l'espace à trois dimensions puisqu'elles sont proportionnelles aux coefficients de la forme fondamentale de cet espace. C'est ainsi qu'il nous est permis de considérer encore les transformations de la forme :

$$(20.1) \quad t' = t; \quad q^i = q^i; \quad \xi' = \xi + \theta(q^i, t, \xi).$$

A cause de l'hypothèse faite sur E_1 , nous devons supposer que $\theta(q^i, t, \xi)$ est réelle et périodique en ξ avec la période $\hbar$. De telles transformations ont déjà été introduites en théorie unitaire à cinq dimensions par M. O. Klein [9] pour généraliser les transformations de jauge. Or, d'après les résultats du paragraphe précédent, si nous effectuons sur la fonction d'onde (18.3) une transformation de Klein infinitésimale définie par

$$(20.2) \quad \xi' = \xi + \alpha \sum_{k=-\infty}^{\infty} \theta_k(q^i, t) e^{\frac{i}{\hbar} k \xi},$$

les différentes $\Psi_n(q^i, t)$ se transforment entre elles suivant

$$\Psi'_n(q^i, t) = \Psi_n(q^i, t) + i\alpha \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{n+k}{2} \theta_{k-n}(q^i, t) \Psi_k(q^i, t)$$

et cette opération se trouve mise en correspondance avec les rotations d'un espace auxiliaire pseudo-euclidien à trois dimensions. Dans le cas particulier où seule $\theta_0(q^i, t)$ n'est pas nulle, la transformation (20.2) se réduit à un changement infinitésimal de jauge, auquel correspond une rotation de l'espace auxiliaire autour de l'axe $O\eta_0$. Comme on sait

d'autre part que les transformations de jauge de l'électromagnétisme sont directement associées avec la conservation de la charge on peut, suivant MM. O. Klein [9] et O. Hara [8], considérer cet espace auxiliaire comme un espace isotopique, espace qui se trouve ainsi naturellement introduit. Or, il existe aussi des représentations de dimension finie du groupe des rotations de cet espace. Elles ne sont plus unitaires et ne peuvent évidemment plus être mises en correspondance avec les transformations de Klein. Cependant, elles font apparaître deux nombres « quantiques » $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ et $-j \leq m \leq j$, exactement comme les représentations du groupe des rotations d'un espace euclidien [1. p. 629]. Elles pourraient permettre d'entreprendre une recherche analogue à celles développées actuellement par différents auteurs et en particulier par MM. L. de Broglie, P. Hillion et J. P. Vigier pour l'étude et la classification des particules élémentaires.

Bien entendu, une étude comme celle-ci apparaît nécessairement comme incomplète, car nous n'avons à aucun moment parlé du spin des particules. Or, contrairement à une opinion fort répandue selon laquelle « le spin est lié à la relativité » ; celui-ci peut être aisément introduit dans la théorie. En effet, sous la forme (11.3) avec $f(q^\Lambda, \Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial q^\Lambda}) = 0$, l'équation des ondes d'Hamilton n'est autre que l'équation de d'Alembert attachée à la forme quadratique indéfinie (9.1) à cinq variables. Il sera donc possible de la décomposer en équations du premier ordre, du même type que celles de Dirac, en utilisant par exemple la méthode employée par MM. Fock, Schrödinger et Pauli [12] pour développer la théorie des particules à spin dans les théories unitaires pentadimensionnelles de Kaluza et Einstein-Mayer. Afin d'alléger les notations nous n'écrirons ces équations que dans le cas où l'espace est rapporté à trois axes de coordonnées cartésiennes rectangulaires. Mais pour cela il nous faut auparavant préciser le formalisme hamiltonien dans l'espace d'Eisenhart.

21. Le formalisme Hamiltonien dans E_5 . — Puisque les trajectoires Γ de l'espace d'Eisenhart, représentant dans cet espace le mouvement du point matériel, peuvent être déduites d'un principe variationnel portant sur la fonction de Lagrange (§ 8) :

$$\Lambda = \frac{1}{2} a_{ij} \frac{dq^i}{d\tau} \frac{dq^j}{d\tau} + b_i \frac{dq^i}{d\tau} \frac{dt}{d\tau} + c \left(\frac{dt}{d\tau} \right)^2 + \frac{dt}{d\tau} \frac{d\xi}{d\tau},$$

nous pourrons, en suivant les raisonnements habituels de la dynamique analytique, développer un formalisme analogue à celui d'Hamilton et Jacobi. Définissons à cet effet les moments conjugués

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\partial \Lambda}{\partial \left(\frac{dq^i}{d\tau} \right)} = a_{ij} \frac{dq^j}{d\tau} + b_i \frac{dt}{d\tau}, \\ p_t &= \frac{\partial \Lambda}{\partial \left(\frac{dt}{d\tau} \right)} = b_t \frac{dq^i}{d\tau} + 2c \frac{dt}{d\tau} + \frac{d\xi}{d\tau}, \\ p_\xi &= \frac{\partial \Lambda}{\partial \left(\frac{d\xi}{d\tau} \right)} = \frac{dt}{d\tau}; \end{aligned}$$

soit encore, en notations tensorielles de E_3 :

$$p_A = \frac{\partial \Lambda}{\partial \left(\frac{dq^A}{d\tau} \right)} = a_{AB} \frac{dq^B}{d\tau}.$$

Ces quatre équations peuvent être résolues en exprimant les « vitesses » $\frac{dq^A}{d\tau}$ en fonction des moments :

$$\frac{dq^A}{d\tau} = a^{AB} p_B,$$

ou encore, en explicitant :

$$\begin{aligned} \frac{dt}{d\tau} &= p_\xi, \\ \frac{dq^i}{d\tau} &= a^{ik} (p_k - b_k p_\xi), \\ \frac{d\xi}{d\tau} &= p_t - a^{ik} b_i (p_k - b_k p_\xi) - 2cp_\xi. \end{aligned}$$

Nous formerons la fonction hamiltonienne :

$$\begin{aligned} (21.1) \quad \mathcal{H}(q^A, p_A) &= p_A \frac{dq^A}{d\tau} - \Lambda = \frac{1}{2} a^{AB} p_A p_B \\ &= \frac{1}{2} a^{ik} (p_i - b_i p_\xi) (p_k - b_k p_\xi) + p_\xi (p_t - cp_\xi) \end{aligned}$$

et l'on vérifie que les équations des géodésiques de longueur nulle de E_3 peuvent se mettre sous la forme canonique :

$$(21.2) \quad \frac{dp_A}{d\tau} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q^A}, \quad \frac{dq^B}{d\tau} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_B}$$

En particulier remarquons que pour $A = 4$ et $B = 0$ on a :

$$\frac{dp_z}{d\tau} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{dt}{d\tau} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_t} = p_z,$$

de sorte que, λ et μ étant deux constantes d'intégration,

$$t = \lambda \tau + \mu,$$

ce qui permet de retrouver, à partir de (21.2), les équations d'Hamilton ordinaires de la dynamique.

Soit alors $\mathcal{S}(q^A, \alpha_A)$ une fonction des coordonnées q^A et de cinq constantes arbitraires α_A non additives. Si cette fonction est une intégrale complète de l'équation de Jacobi

$$(21.3) \quad \mathcal{H}\left(q^A, \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q^A}\right) = \frac{1}{2} \alpha^{AB} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q^A} \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q^B} = 0,$$

les équations

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \alpha_A} = \dot{q}^A, \quad p_A = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial q^A},$$

où les $\dot{q}^A$ sont cinq nouvelles constantes arbitraires, définissent une géodésique Γ de longueur nulle de E_5 , donc un mouvement possible du point matériel dans l'espace. On voit immédiatement sur (21.3) que les surfaces $\mathcal{S}(q^A, \alpha_A) = \mathcal{S}_0$ sont les surfaces caractéristiques de l'équation (12.1) des ondes d'Hamilton. On peut encore remarquer avec M. Eisenhart [5] que si l'on se restreint aux fonctions $\mathcal{S}$ de la forme

$$\mathcal{S}(q^A, \alpha_A) = \xi - S(q^i, t, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3),$$

où ne figurent plus que trois constantes arbitraires non additives, la fonction $S(q^i, t, \alpha_i)$ sera une intégrale complète de l'équation de Hamilton-Jacobi de la dynamique analytique.

22. La factorisation de l'équation des ondes d'Hamilton du point libre. — Ainsi que nous l'avons déjà annoncé, nous nous limiterons au cas où l'espace est rapporté à un repère cartésien fixe et nous envisagerons tout d'abord le cas d'une particule libre. Dans ce cas particulier la fonction de Hamilton (21.1) prend la forme simple :

$$(22.1) \quad \mathcal{H} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + p_t p_z,$$

Suivant la méthode utilisée par M. Dirac, nous chercherons à représenter cette forme quadratique par le carré d'une forme linéaire dont les coefficients β_A sont des grandeurs non commutatives, grandeurs qui engendrent l'algèbre de Clifford associée à la forme quadratique (22.1) :

$$2m\mathcal{H} = \left(\beta_1 p_x + \beta_2 p_y + \beta_3 p_z + \beta_0 p_t + \frac{m}{2} \beta_4 p_\xi \right)^2,$$

On voit immédiatement que la « table de multiplication » des β_A doit être

$$(22.2) \quad \begin{cases} \beta_i \beta_j + \beta_j \beta_i = 2\delta_{ij}, & \beta_0^2 = 0, \\ \beta_i \beta_0 + \beta_0 \beta_i = 0, & \beta_4^2 = 0, \\ \beta_i \beta_4 + \beta_4 \beta_i = 0, & \beta_0 \beta_4 + \beta_4 \beta_0 = 4. \end{cases}$$

On sait qu'il est possible de construire des systèmes de cinq matrices à quatre lignes et quatre colonnes qui anticommulent et dont le carré est égal à l'unité; on pourra donc représenter les grandeurs β_A par des matrices de ce type ⁽¹⁾. Donnons, par exemple, une telle représentation : partons pour cela des matrices de Pauli

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Il est alors facile de vérifier qu'il suffit de poser

$$\beta_i = \sigma_3 \otimes \sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \end{pmatrix} \\ (\beta_0 = \sigma_1 - i\sigma_2) \otimes \sigma_0 = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta_4 = (\sigma_1 + i\sigma_2) \otimes \sigma_0 = 2 \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

pour satisfaire aux relations (22.2).

Revenons alors à l'équation aux dérivées partielles du second ordre des ondes d'Hamilton qui, dans notre cas particulier s'écrit :

$$(22.3) \quad \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + 2m \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t \partial \xi} = 0$$

A l'aide des matrices définies ci-dessus nous pouvons l'écrire

$$\left(\beta_1 \frac{\partial}{\partial x} + \beta_2 \frac{\partial}{\partial y} + \beta_3 \frac{\partial}{\partial z} + \beta_0 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{m}{2} \beta_4 \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \\ \times \left(\beta_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \beta_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \beta_3 \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \beta_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{m}{2} \beta_4 \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) = 0$$

⁽¹⁾ Il est bien évident que les matrices que nous utilisons se rattachent directement aux matrices α_μ ou γ_μ utilisées dans la théorie de Dirac. Ce n'est que pour éviter toute confusion entre les relations (22.2) et les relations de commutation usuelles que nous désignons nos matrices par β_A .

où maintenant Φ représente une matrice-fonction d'onde à quatre lignes et une seule colonne. Le nouveau système d'équations du premier ordre remplaçant l'équation (22.3) s'écrira donc

$$\beta_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \beta_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \beta_3 \frac{\partial \Phi}{\partial z} + \beta_0 \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{m}{2} \beta_4 \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} = 0.$$

Pour pouvoir interpréter physiquement ces équations il nous faut revenir à des équations où seules les coordonnées x, y, z et le temps t interviennent. Pour cela nous opérerons comme nous l'avons fait au paragraphe 12 en posant :

$$\Phi(x, y, z, t, \xi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \xi} \Psi(x, y, z, t)$$

Le système d'équations satisfait par la matrice-fonction d'onde $\Psi(x, y, z, t)$ est alors

$$(22.4) \quad \beta_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \beta_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \beta_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \beta_0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{im}{2\hbar} \beta_4 \Psi = 0.$$

Il est très souvent commode d'introduire la notation suivante, d'ailleurs usuelle en théorie de Dirac :

$$(22.5) \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{(1)} \\ \Psi_{(2)} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{(1)} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{(2)} = \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix},$$

de sorte que le système (22.4) prend la forme

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \text{ grad } \Psi_{(1)} - \frac{im}{\hbar} \Psi_{(2)} &= 0 \\ \vec{\sigma} \text{ grad } \Psi_{(2)} - 2 \frac{\partial \Psi_{(1)}}{\partial t} &= 0 \end{aligned}$$

On vérifie alors aisément, en éliminant $\Psi_{(2)}$ (respectivement $\Psi_{(1)}$), que $\Psi_{(1)}$ (respectivement $\Psi_{(2)}$) satisfait à l'équation de Schrödinger,

$$\Delta \Psi - 2 \frac{im}{\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0.$$

23. Les équations non relativistes de la particule douée de spin. — Toujours en coordonnées cartésiennes la fonction de Hamilton (21.1) pour une particule de charge ε placée dans un champ électromagnétique dérivant des potentiels $\vec{A}$ et V s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \frac{1}{2m} [(p_x - \varepsilon A_x p_\xi)^2 + (p_y - \varepsilon A_y p_\xi)^2 \\ + (p_z - \varepsilon A_z p_\xi)^2] + p_\xi (p_t + \varepsilon V p_\xi), \end{aligned}$$

expression que nous pouvons encore, en utilisant les matrices β_A introduites au paragraphe précédent, mettre sous la forme :

$$2m\partial\mathcal{C} = \left[\beta_1(p_x - \varepsilon A_x p_\xi) + \beta_2(p_y - \varepsilon A_y p_\xi) + \beta_3(p_z - \varepsilon A_z p_\xi) + \beta_0(p_t + \varepsilon V p_\xi) + \frac{m}{2} \beta_4 p_\xi \right]^2.$$

Le raisonnement du paragraphe précédent nous conduit alors au système d'équations d'onde :

$$\begin{aligned} \beta_1 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \varepsilon A_x \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) + \beta_2 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial y} - \varepsilon A_y \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) \\ + \beta_3 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z} - \varepsilon A_z \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) + \beta_0 \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \varepsilon V \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) + \frac{m}{2} \beta_4 \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} = 0 \end{aligned}$$

Φ étant toujours une fonction d'onde à quatre composantes.

Nous reviendrons encore dans l'espace-temps de configuration en posant :

$$\Phi(x, y, z, \xi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \xi} \Psi(x, y, z, t),$$

ce qui nous conduit à remplacer l'équation de Schrödinger (13.1) par le système

$$\begin{aligned} (23.1) \quad \beta_1 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} A_x \Psi \right) + \beta_2 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} A_y \Psi \right) \\ + \beta_3 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} A_z \Psi \right) + \beta_0 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \Psi \right) - \frac{im}{2\hbar} \beta_4 \Psi = 0. \end{aligned}$$

Pour nous rendre compte de la façon dont ces équations introduisent les moments magnétique et électrique propres de la particule appliquons leur l'opérateur

$$\begin{aligned} \beta_1 \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} A_x \right) + \beta_2 \left(\frac{\partial}{\partial y} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} A_y \right) \\ + \beta_3 \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} A_z \right) + \beta_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V \right) - \frac{im}{2\hbar} \beta_4. \end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi :

$$\begin{aligned} (23.2) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - \frac{i\hbar\varepsilon}{m} \vec{A} \text{ grad } \Psi - \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \text{div } \vec{A} \Psi + \left(\frac{\varepsilon^2}{2m} \vec{A}^2 + \varepsilon V \right) \Psi \\ + i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\varepsilon\hbar}{2m} (i\beta_2\beta_3 H_x + i\beta_3\beta_1 H_y + i\beta_1\beta_2 H_z) \Psi \\ - \frac{\varepsilon\hbar}{2m} (i\beta_1\beta_0 E_x + i\beta_2\beta_0 E_y + i\beta_3\beta_0 E_z) \Psi = 0, \end{aligned}$$

où H_x, H_y, H_z et E_x, E_y, E_z représentent les composantes des champs magnétique et électrique.

Si les deux dernières parenthèses n'existaient pas ces équations seraient simplement, pour chaque composante de la fonction d'onde, l'équation de Schrödinger (13.1) correspondant à une particule chargée placée dans un champ électromagnétique. Cependant l'opérateur qui, dans (23.2) est appliqué aux fonctions d'onde n'est pas hermitien et ne peut être directement interprété comme correspondant à une grandeur physique. Mais si nous multiplions cet opérateur par la matrice hermitienne

$$\beta = -\sigma_2 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_0 \\ -i\sigma_0 & 0 \end{pmatrix},$$

nous obtiendrons des équations où cette fois l'opérateur du premier membre est hermitien ⁽¹⁾. Nous sommes ainsi conduits à attribuer à la particule un moment magnétique de composantes :

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_k &= \frac{\varepsilon \hbar}{2m} i\beta_i \beta_j \beta_k \quad (i, j, k \text{ permutation circulaire de } 1, 2, 3) \\ &= \frac{\varepsilon \hbar}{2m} \sigma_2 \otimes \sigma_k = \frac{\varepsilon \hbar}{2m} \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Avec les unités utilisées ici, la valeur absolue de ce moment magnétique est bien égale, pour une particule de charge e , à un magnéton de Bohr B ; quant aux valeurs propres de ce moment, elles sont égales à $\pm B$.

De même, nous devons attribuer à la particule un moment électrique de composantes

$$\mathfrak{E}_k = \frac{\varepsilon \hbar}{2m} i\beta_k \beta_0 \beta = \frac{\varepsilon \hbar}{m} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}.$$

Ses valeurs propres sont 0 et $\pm 2B$ soit, en valeur moyenne et seulement en valeur moyenne, la valeur habituelle $\pm B$. Pour comprendre ce fait il faut remarquer que le terme correspondant à l'énergie potentielle du moment électrique dans le champ n'intervient que dans deux seulement des quatre équations (23.2). De façon plus précise, si nous utilisons la notation (22.5), les équations (23.1) s'écrivent

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \left(\vec{\text{grad}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \vec{A} \right) \Psi_{(1)} - \frac{im}{\hbar} \Psi_{(2)} &= 0 \\ \vec{\sigma} \left(\vec{\text{grad}} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \vec{A} \right) \Psi_{(2)} - 2 \left(\frac{\partial}{\partial t} - i\varepsilon V \right) \Psi_{(1)} &= 0 \end{aligned}$$

⁽¹⁾ Ce raisonnement est analogue à celui qui est fait en théorie de Dirac où ce sont les matrices $i\sigma_i \sigma_j \sigma_k$ et $i\sigma_j \sigma_k$ qui doivent être interprétées comme les moments magnétiques et électriques. Voir par exemple L. DE BROGLIE, *La théorie des particules de spin $\frac{1}{2}$* , Paris, 1952, p. 72.

et les équations du second ordre (23.2) :

$$(23.3) \quad \begin{cases} \left(H_{0p} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_{(1)} + \frac{\varepsilon \hbar}{2m} \vec{\sigma} \vec{H} \Psi_{(1)} = 0 \\ \left(H_{0p} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_{(2)} + \frac{\varepsilon \hbar}{2m} \vec{\sigma} \vec{H} \Psi_{(2)} + \frac{\varepsilon \hbar}{m} i \vec{\sigma} \vec{E} \Psi_{(1)} = 0, \end{cases}$$

où H_{0p} est l'opérateur hamiltonien correspondant de la théorie de Schrödinger :

$$H_{0p} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{i\varepsilon \hbar}{m} \vec{A} \text{ grad} - \frac{i\varepsilon \hbar}{2m} \text{div } \vec{A} + \left(\frac{\varepsilon^2}{2m} \vec{A}^2 + \varepsilon V \right).$$

La première de ces équations est l'équation de Pauli sans le terme habituel de moment électrique ou, dans le cas d'un champ de forces centrales, sans le terme de couplage spin-orbite. La seconde de ces équations est l'équation de Pauli complétée par deux fois ce terme. Si l'on compare cette situation avec celle qui se présente quand, dans la théorie de Dirac, on veut passer à l'approximation non relativiste pour retrouver la théorie de Pauli, on voit immédiatement pourquoi nous avons été obligés d'utiliser des matrices singulières ne comportant que deux éléments non nuls : leur rôle est « d'effacer » purement et simplement les deux petites composantes. Cependant, comme les équations du premier ordre (23.1) ou (23.3) font effectivement intervenir les quatre composantes, il convient de compenser en moyenne cet « effacement » en doublant les termes qui correspondent au couplage spin-orbite. Une étude approfondie de ces équations et de leur interprétation physique dépasserait le cadre de ce travail, nous renverrons donc pour plus de détails à une publication ultérieure. Indiquons seulement pour conclure que cette théorie, qui n'est pas relativiste, ne peut évidemment prétendre atteindre tous les résultats de la théorie de Dirac : par exemple, dans le cas de l'atome d'hydrogène on peut vérifier que, si ces équations conduisent bien à l'effet Zeemann anormal, elles sont incapables de prévoir la structure fine. Par contre, nous pouvons espérer obtenir ainsi une bonne approximation et une formulation cohérente des équations relatives aux systèmes de particules à spin qu'il est difficile d'aborder à l'aide d'une théorie relativiste.

*Laboratoire de Théories Physiques,
Institut Henri Poincaré.*

BIBLIOGRAPHIE

- [1] V. BARGMANN, *Ann. of Math.*, t. 48, 1947, p. 568.
 - [2] L. BRILLOUIN, *Les tenseurs en Mécanique et en élasticité*, Paris, 1949.
 - [3] L. DE BROGLIE, *Mécanique ondulatoire du photon*, Paris, 1949.
 - [4] L. DE BROGLIE, *Une tentative d'interprétation causale de la Mécanique ondulatoire*, Paris, 1956.
 - [5] L. P. EISENHART, *Ann. of Math.*, 30, 1929, p. 591.
 - [6] F. GONSETH et G. JUVET, *Helv. Phys. Acta*, 1, 1928, p. 421.
 - [7] J. HADAMARD, *Leçons sur la propagation des ondes*, Paris, 1903.
 - [8] O. HARA, *Progr. of theor. Phys.* 21, 1959, p. 919.
 - [9] O. KLEIN, *Cinquantenaire de la théorie de la Relativité (Helv. Phys. Acta suppl.*, 4, 1956, p. 58).
 - [10] A. LICHTNEROWICZ, *Éléments de calcul tensoriel*, Paris, 1951.
 - [11] A. LICHTNEROWICZ, *Théories relativistes de la gravitation et de l'électromagnétisme*, Paris, 1955.
 - [12] W. PAULI, *Ann. der Physik*, t. 18, 1933, p. 337.
 - [13] J. PÉRÉS, *Mécanique générale*, Paris, 1953.
 - [14] I. SCHRÖDINGER, *Mémoires sur la Mécanique ondulatoire*, Paris, 1933.
 - [15] Y. R. THIRY, *Thèse*, Paris, 1950.
 - [16] G. VALIRON, *Équations fonctionnelles*, Paris, 1950.
-