$$m\frac{d^2\gamma}{dt^2} = -\nabla V(\gamma) \quad \rightsquigarrow \quad ? \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi + V(x)\right)\psi$$

(Newton) (Schrödinger)

a) - Calcul des variations : généralise le principe de Héron-Fermat

b) - équations de Hamilton

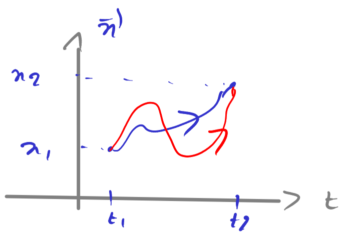
c) - équation de Hamilton-Jacobi (optique / mécanique)

a) Calcul des variations : retrouver $m\frac{d^2\gamma}{dt^2} = -\nabla V(\gamma)$ à partir d'un principe

2 instants $t_1 < t_2$
2 points x_1, x_2

$$\mathcal{C} = \{\gamma : [t_1, t_2] \to \mathbb{R}^3 \ ; \ \gamma(t_1) = x_1, \ \gamma(t_2) = x_2\} \ \boxed{\mathcal{C}^2}$$

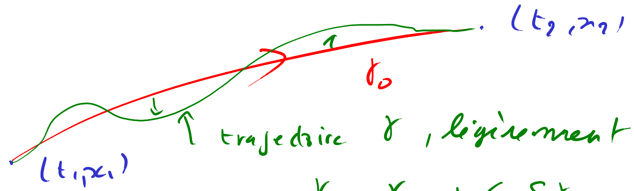
$= \{\text{histoires}\}$



$$\mathcal{C} \longrightarrow \mathbb{R}$$
$$\gamma \longmapsto \mathcal{A}[\gamma] = \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2}m\|\dot\gamma\|^2 - V(\gamma)\right]dt}_{\text{Action.}}$$

($\int \frac{1}{2} m \|\dot\gamma\|^2 dt$: proposé par Maupertuis)

→ Principe de Hamilton : la trajectoire réelle γ_0 est celle qui rend stationnaire $\mathcal{A}[\gamma]$



trajectoire γ, légèrement déviée

$$\gamma = \gamma_0 + \varepsilon\,\delta\gamma \qquad \varepsilon \ll 1$$

$$\mathcal{A}[\gamma] = \mathcal{A}[\gamma_0 + \varepsilon\,\delta\gamma] = \mathcal{A}[\gamma_0] + o(\varepsilon)$$

Lemme (Calcul) : γ_0 rend stationnaire $\mathcal{A}$ ssi $m\frac{d^2\gamma_0}{dt^2} = -\nabla V(\gamma_0)$.

Ce principe est à l'origine des équations de Hamilton (découvert par Lagrange 20 ans)

Lien et Hamilton

$$\underset{\text{Action}}{A[\gamma]} = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{1}{2} m \|\dot\gamma\|^2 - V(\gamma)\right) dt = \int_{t_1}^{t_2} \underbrace{L(\overset{\text{position}}{r}, \overset{\text{vitesse}}{\dot\gamma})\, dt}_{\text{plus générale.}}$$

(L) Densité lagrangienne

= transformée de Legendre : "changement de variable dans l'espace des phases"

$$\mathbb{L} : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \xrightarrow{H} \mathbb{R}$$

(Legendre)

$$(x, v) \longmapsto (q, p)$$

(position, vitesse) (position, moment et impulsion)

$$\begin{cases} q^i = x^i \\ p_i = \dfrac{\partial L}{\partial v^i}(x, v) \end{cases}$$

Si $L(x, v) = \frac{1}{2} m \|v\|^2 - V(x)$

$$\frac{\partial L}{\partial v^i} = \frac{1}{2} m \, 2 v^i = m v^i$$

alors $\begin{cases} q^i = x^i \\ p_i = m v^i \end{cases}$

Définition de l'hamiltonien (de façon implicite)

$H : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ telle que

$$\begin{cases} H(q, p) = \sum_{i=1}^{3} p_i v^i - L(q, v) \\ \text{où } \dfrac{\partial L}{\partial v^j}(q, v) = p_j \end{cases}$$

← équation à "résoudre" pour obtenir v en fonction de (q, p)

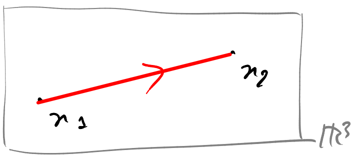
Exemple $L(x, v) = \frac{1}{2} m \|v\|^2 - V(x)$

$$\frac{\partial L}{\partial v^i}(x, v) = m v^i = p_i \quad \text{donc} \quad \begin{vmatrix} q = x \\ v = \dfrac{p_i}{m} \end{vmatrix}$$

Donc
$$H(q, p) = \sum_{i=1}^{3} p_i \frac{p_i}{m} - \left(\frac{1}{2} m \left\|\frac{p}{m}\right\|^2 - V(q)\right)$$
$$= \frac{\|p\|^2}{m} - \frac{1}{2}\frac{\|p\|^2}{m} + V(q) = \frac{\|p\|^2}{2m} + V(q)$$

Retour à l'optique : principes de Fermat et de Huygens.

Fermat : un rayon lumineux rend extrémale la quantité



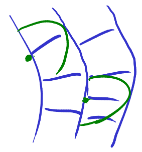
$$\int_{x_1}^{x_2} n(\gamma) \left\|\frac{d\gamma}{dt}\right\| dt = L(\gamma)$$

"temps" mis par la lumière

Huygens Surfaces d'onde $\Sigma_t \subset \mathbb{R}^3$

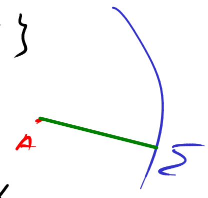
Ω dans l'espace est feuilleté par une famille continue de surfaces $(\Sigma_t)_{t \in [t_1,t_2]}$

Postulat : ces surfaces sont équidistantes entre elles.



Déf a) Soit $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ une surface et $A \in \mathbb{R}^3 \setminus \Sigma$

$$dis(A, \Sigma) = \inf \{ dist(A, M) ; M \in \Sigma \}$$



b) Soit $\Sigma, \Sigma' \subset \mathbb{R}^3$ deux surfaces, $\Sigma \cap \Sigma' = \emptyset$.

Σ et Σ' sont équidistantes (ou parallèles) si

$\exists d > 0, \quad \forall A \in \Sigma, \quad dist(A, \Sigma') = d.$

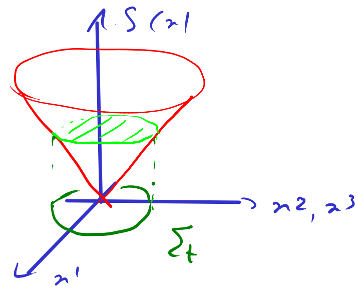
Je cherche à feuilleter $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ par des surface Σ_t équidistantes entre elles..

a) Pour cela je cherche $S : \Omega \to \mathbb{R}$ $\mathcal{C}^2$ telle que

$\forall t, \exists s \in \mathbb{R}, \quad \Sigma_t = \{ x \in \Omega ; \ S(x) = s \} = S^{-1}(\{s\})$

Exemple $S : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$
$x \mapsto \|x\|.$

Graphe :



b) Normalisation si $t_1 < t_2$

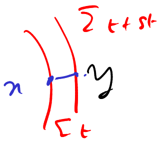
si $x_1 \in \Sigma_{t_1}$, $x_2 \in \Sigma_{t_2}$, $\quad S(x_2) - S(x_1) = c\,(t_2 - t_1)$
$= dist(\Sigma_{t_1}, \Sigma_{t_2})$

On cherche S

Supposons que $\delta t \ll 1$, $\Sigma_t \to \Sigma_{t+\delta t}$

Soit $x \in \Sigma_t$, je cherche le point x' sur $\Sigma_{t+\delta t}$ le plus proche de x.

$\delta t << 1 \Rightarrow$ Approximation : y sera dans un voisinage de x



$y \in$ ouvert petit dans $\Sigma_{t+\delta t}$

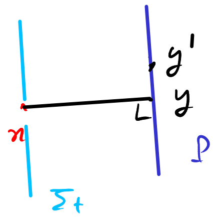
$\rightarrow$ je remplace $\Sigma_{t+\delta t}$ par un plan.

Développement de taylor.

$$S(y) = S(x) + \langle \nabla S(x), y-x \rangle + o(\underbrace{\|x-x\|}_{\text{petit}})$$
$$\simeq S(x) + \langle \nabla S(x), y-x \rangle$$
$$= S(x) + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial S}{\partial x^i}(x)\,(y^i - x^i)$$

$$y \in \Sigma_{t+\delta t} \underset{\sim}{\Leftrightarrow} S(y) = C^{ste} > S(x)$$
$$\Leftrightarrow \underbrace{\langle \nabla S(x), y-x \rangle = C^{ste}}\ \Leftrightarrow \langle \nabla S(x), y \rangle = \underbrace{C^{ste} + \langle \nabla S(x), x \rangle}_{\text{constante.}}$$

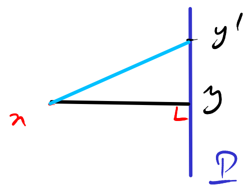
Situation simplifiée



Plan $\mathcal{D}$ $(\perp \nabla S(x)) \simeq \Sigma_{t+\delta t}$

Affirmation : Point le + proche de x sur le plan = projection orthogonale de x sur $\langle \nabla S(x), y-x \rangle = C^{ste}$.

Preuve (Pythagore)



$$\|x-y'\|^2 = \|x-y\|^2 + \underbrace{\|y-y'\|^2}_{\geq 0}$$
$$\geq \underbrace{\|x-y\|^2}_{\text{minimum.}}$$

égalité $\Leftrightarrow y = y'$.

Conséquence $\exists \lambda \in \mathbb{R}$, $\boxed{y - x = \lambda \nabla S(x)}\ (a)$ = morceau de rayon lumineux.

J'utilise la normalisation $S|_{\Sigma_{t_2}} - S|_{\Sigma_{t_1}} = \underline{\text{distance}(\Sigma_{t_1}, \Sigma_{t_2})}$

$$\Rightarrow S(y) - S(x) = c\,\delta t$$

$(x \in \Sigma_t,\ y \in \Sigma_{t+\delta t})$

$$\Leftrightarrow S(x) + \langle \nabla S(x), y-x \rangle - S(x) \simeq c\,\delta t$$
$$\Leftrightarrow \boxed{\langle \nabla S(x), y-x \rangle = c\,\delta t}\ (b) = S(y) - S(x)$$

Affirmation $\boxed{\|\nabla S\| = 1}$

$$(a),(b) \Rightarrow \langle \nabla S(x), \lambda \nabla S(x) \rangle = c\,\delta t = \delta s = \|y-x\| = \lambda \|\nabla S(x)\|$$
$$\Leftrightarrow \lambda \|\nabla S(x)\|^2 = \lambda \|\nabla S(x)\|$$
$$\Leftrightarrow \|\nabla S(x)\| = 1$$

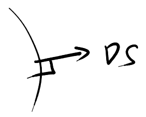
Conclusions a) On peut construire $S : \Omega \to \mathbb{R}$ (localement)
telle que : $\forall s \in \mathbb{R}$, $S^{-1}(\{s\})$ = surface d'onde

b) la distance entre un point de $S^{-1}(\{s\})$ et $S^{-1}(\{s+\delta s\})$ est réalisé par une courbe orthogonale

c) $\boxed{\|\nabla S\| = 1}$ équation eikonale (pour la lumière)

Hypothèse

Proposition Soit $\gamma : [t_1, t_2] \to \Omega$ tel que $\frac{d\gamma}{dt} = \nabla S(\gamma)$



Alors $\frac{d^2\gamma}{dt^2} = 0$ (Conclusion : γ décrit un mouvement et uniforme).

Preuve $\forall i$, $\underbrace{\frac{d\gamma^i}{dt} = \frac{\partial S}{\partial x^i}(\gamma)}$ $\Rightarrow$ $\frac{d^2\gamma^i}{dt^2} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial S}{\partial x^i}\circ\gamma\right)$

$$= \sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial}{\partial x^j}\left(\frac{\partial S}{\partial x^i}\right)\circ\gamma\right)\frac{d\gamma^j}{dt}$$

$$= \sum_{j=1}^{3}\underbrace{\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^i \partial x^j}\circ\gamma\right)\left(\frac{\partial S}{\partial x^j}\circ\gamma\right)}_{=0}$$

$= 0$

Or, $\forall x \in \Omega$, $\boxed{\|\nabla S\|^2_{(x)}} = \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial S}{\partial x^i}(x)\right)^2 = \boxed{1}$

$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x^j}\left(\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{\partial S}{\partial x^i}(x)\right)^2\right) = 0$

$\Leftrightarrow \underbrace{\sum_{i=1}^{3} 2\,\frac{\partial S}{\partial x^i}\,\frac{\partial^2 S}{\partial x^i \partial x^j}} = 0.$

Exemples a) $S(x) = \|x\|$, $\forall i$, $\frac{\partial S}{\partial x^i} = \frac{x^i}{\|x\|}$ $\Leftrightarrow$ $\nabla S = \frac{x}{\|x\|}$
$\Rightarrow \|\nabla S\| = 1$

(ondes sphériques)

b) $S(x) = x^1$, $\nabla S = (1, 0, 0)$, $\|\nabla S\| = 1$

(onde plane)

Travail analogue en partant du principe de Maupertuis-Euler-Lagrange-Hamilton

Lumière

$\{$ chemins entre 2 points dans $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ $\}$

Longueur $\int_{x_1}^{x_2} n(\gamma) \, \|\frac{d\gamma}{dt}\| = 1$

Surfaces d'onde

Décrit par $S : \Omega \to \mathbb{R}$

Solution de : $\|\nabla S\| = 1$

(équation eikonale)

Mécanique

$\{$ histoires dans $\mathbb{R}_{temps} \times \mathbb{R}^3_{espace}$

$(t_1, x_1) \overset{\gamma}{\leadsto} (t_2, x_2) \}$

Action $\int_{t_1}^{t_2} \underbrace{\left(\frac{1}{2} m \|\dot\gamma\|^2 - V(\gamma)\right)}_{L(\gamma, \dot\gamma)} dt$

Fonction génératrice

$S : [t_1, t_2] \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$

$(t, x) \mapsto S(t, x)$

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(x, \frac{\partial S}{\partial x_1}, \frac{\partial S}{\partial x_2}, \frac{\partial S}{\partial x_3}\right) = 0}$$

Equation de Hamilton-Jacobi

"distance" utilisée : $L(x, v) \, \underset{\text{intervalle de temps}}{\tau}$

Cas $H(q, p) = \frac{\|p\|^2}{2m} + V(q)$ $\quad \nabla S = \left(\frac{\partial S}{\partial x^1}, \frac{\partial S}{\partial x^2}, \frac{\partial S}{\partial x^3}\right)(t, x)$

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \|\nabla S\|^2 + V(x) = 0}$$

Mécanique quantique Planck, 1900 Einstein, 1905 Bohr, 1913 (2) de Broglie 1923

$\to$ à une particule de masse E_0 et de moment p, on associe une onde.

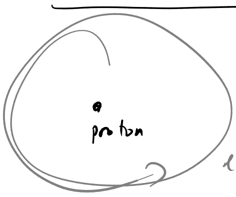
énergie $\boxed{\begin{array}{l} E = \hbar \omega \\ \vec{p} = \hbar \vec{k} \end{array}}$ $\quad \omega = 2\pi \times$ fréquence $\quad \vec{k} =$ vecteur d'onde $\quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$ $\quad h$: (constante de Planck)

onde plane $\boxed{e^{i(\langle \vec{k}, \vec{x} \rangle - \omega t)}}$

$\| \quad e^{i\left(\frac{\langle \vec{p}, \vec{x} \rangle - E t}{\hbar}\right)}$

Pourquoi ?

Atome hydrogène



électron : son énergie est quantifiée.

Question : Associer une onde à une particule ?

Idée de de Broglie - Schrödinger $\quad \psi : \underset{\text{temps, espace}}{\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3} \to \mathbb{C}$

$$\psi(t,x) = e^{i\frac{S(t,x)}{\hbar}} \quad \leftarrow \text{onde associée à la matière.}$$

où S : $\frac{\partial S}{\partial t} + H(x, DS) = 0 \iff \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\|DS\|^2 + V(x) = 0.$
(Hamilton-Jacobi)

Onde planes $\quad \frac{S(t,x)}{\hbar} = \frac{\langle \vec{p}, \vec{x}\rangle - Et}{\hbar} \iff \boxed{S(t,x) = \langle \vec{p}, \vec{x}\rangle - Et}$

solution de HJ la plus simple

Alors $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$, $\frac{\partial S}{\partial x_i} = p_i$ $\implies$ S est solution de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \underbrace{H(x, DS)}_{E} = 0$$

Cela confirme que $\psi \simeq e^{i\frac{S(t,x)}{\hbar}}$ (fonction associé à une onde plane)

Trouver une équation sur ψ (indépendamment de S)

Conséquence: $\psi = e^{iS/\hbar}$

- $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t} e^{i\frac{S(t,x)}{\hbar}} = \frac{i}{\hbar}\underbrace{\frac{\partial S}{\partial t}}\psi$
- $\frac{\partial \psi}{\partial x_j} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x_j}\psi$

$$\implies \Delta\psi = \sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_j^2} = \frac{i}{\hbar}\left[\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial^2 S}{(\partial x_j)^2}\right)\psi + \sum_{j=1}^{3}\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\partial S}{\partial x_j}\right)^2\psi\right]$$

$$\Delta\psi = \frac{i}{\hbar}\Delta S\,\psi - \frac{1}{\hbar^2}\underbrace{\|DS\|^2\psi}$$

Si S : $\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\|DS\|^2 + V(x) = 0$

$$\implies \frac{\partial S}{\partial t}\psi + \frac{1}{2m}\|DS\|^2\psi + V\psi = 0$$

$$\iff \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{i\hbar\Delta S\,\psi - \hbar^2\Delta\psi}{2m} + V\psi = 0$$

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

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

Remarque: pour une onde plane, c'est nulle.

On néglige $-i\hbar\frac{\Delta S}{2m}\psi$

Hypothèse $\rightarrow$ $\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi}$ Schrödinger.

Validation : Schrödinger vérifie qu'on retrouve le spectre de l'hydrogène à partir de son équation.

Retrouver p_i et H

$$\psi = e^{i\frac{S}{\hbar}} \quad , \quad \bar{\psi} = e^{-iS/\hbar}$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x^j} = \frac{\partial S}{\partial x^j} \psi \quad \Rightarrow \quad \bar{\psi} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \psi = \frac{\partial S}{\partial x^j} |\psi|^2 = \frac{\partial S}{\partial x^j} = p_j$$

D'où $\boxed{p_j = \bar{\psi} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x^j}}$ $\xrightarrow[\text{quantique}]{\text{Mécanique}}$ $p_j \longrightarrow$ opérateur $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}$

De même H (hamiltonien) $\longrightarrow$ opérateur $\hat{H} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$