

Sur le formalisme canonique : la condition accessoire $H + p(f+1) = 0$ et la réversibilité de la mécanique classique et de la théorie des quanta

Autor(en): **Mercier, André**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Archives des sciences [1948-1980]**

Band (Jahr): **2 (1949)**

PDF erstellt am: **13.09.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-739762>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern. Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

SUR LE FORMALISME CANONIQUE,
 LA CONDITION ACCESSOIRE $H + p_{f+1} = 0$
 ET LA RÉVERSIBILITÉ DE LA MÉCANIQUE
 CLASSIQUE
 ET DE LA THÉORIE DES QUANTA

PAR

André MERCIER

1. La transformation de réversibilité dans le formalisme non homogène.
2. La transformation de réversibilité et le formalisme homogène.
3. Sur les formes possibles d'hamiltoniens.
4. La transformation de réversibilité en théorie des quanta.
5. Sur l'existence d'une « condition accessoire » en mécanique des quanta.

1. *La transformation de réversibilité dans le formalisme non homogène.* — Soit: q l'ensemble des coordonnées q_k d'un système mécanique, p l'ensemble des moments conjugués, $H(q, p, t)$ l'hamiltonien, t le temps considéré comme paramètre indépendant, f le nombre de degrés de liberté du système, $F = F(q, p, t)$ une fonction des q_k , des p_k et de t , G une autre,

$$[F, G] = \sum_{k=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial G}{\partial p_k} - \frac{\partial G}{\partial q_k} \frac{\partial F}{\partial p_k} \right) = [F, G]_f \quad (1)$$

la parenthèse de Poisson construite en faisant varier k de 1 à f (indice f éventuellement écrit).

Les équations canoniques

$$\dot{p} = - \frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

entraînent

$$\dot{F} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F, H] \quad (2)$$

et inversement.

Soient $f + 1$ nouvelles fonctions

$$\tau(t) = -t \quad \text{et} \quad \pi_k(p) = -p_k \quad (k = 1, \dots, f) \quad (3)$$

et leurs inverses

$$t = t(\tau) \quad \text{et} \quad p_l = p_l(\pi) \quad (\pi : \text{l'ensemble des } \pi_k) . \quad (3')$$

On a

$$\frac{d\tau}{dt} = -1 = \frac{dt}{d\tau}, \quad \frac{\partial \pi_k}{\partial p_l} = -\delta_{kl} = \frac{\partial p_l}{\partial \pi_k} .$$

Définissons $\Phi(q, \pi, \tau)$ et $Y(q, \pi, \tau)$ tels que

$$\begin{cases} F(q, p(\pi), t(\tau)) = \Phi(q, \pi, \tau) \\ H(q, p(\pi), t(\pi)) = Y(q, \pi, \tau), \end{cases} \quad (4)$$

puis la parenthèse

$$[\Phi, Y]^* = \sum_k \left(\frac{\partial \Phi}{\partial q_k} \frac{\partial Y}{\partial \pi_k} - \frac{\partial \Phi}{\partial \pi_k} \frac{\partial Y}{\partial q_k} \right) . \quad (5)$$

Le calcul donne

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y}{\partial \pi_l} &= \sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial p_k}{\partial \pi_l} = -\frac{\partial H}{\partial p_k} \delta_{kl} = -\frac{\partial H}{\partial p_l}, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \pi_l} &= -\frac{\partial F}{\partial p_l} \end{aligned}$$

donc

$$[F, H] = -\frac{\partial \Phi}{\partial q} \frac{\partial Y}{\partial \pi} + \frac{\partial \Phi}{\partial \pi} \frac{\partial Y}{\partial q} = -[\Phi, Y]^* . \quad (6)$$

De plus,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = -\frac{\partial F}{\partial t} . \quad (7)$$

Définissons

$$\dot{\Phi} = \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + [\Phi, Y]^* . \quad (8)$$

Le calcul montre alors en vertu de (6) et (7) avec la définition (8), que

$$\dot{\Phi} = -\dot{F} . \quad (9)$$

Si donc on porte F comme fonction entière (après intégration des équations de mouvement) de t et Φ comme fonction de τ , avec les mêmes conditions initiales,

$$F(t = 0) = \Phi(\tau = 0) ,$$

on obtient en graphique pour F et Φ des courbes qui sont images l'une de l'autre, et comme numériquement $\tau = -t$, on trouve en réalité pour F et Φ au cours du même temps exactement les mêmes valeurs.

Cela montre (énoncé I) que si l'on a une équation canonique générale (2) pour F on a automatiquement une équation canonique formellement identique si l'on remplace simultanément t par $-t$ et tous les p_k par $-p_k$, tout en laissant les q_k inchangés. } (10)

Formellement (énoncé II), on pourrait d'une manière semblable montrer que si l'on a une équation canonique (2) pour F , on a automatiquement une autre équation canonique si l'on remplace t par $-t$ et tous les q_k par $-q_k$, tout en laissant les p_k inchangés.

Mais seul l'énoncé I donne lieu à l'interprétation *habituelle* consistant à dire que les phénomènes décrits par la mécanique classique sont réversibles, aussi longtemps qu'on distingue les moments p des coordonnées q . On ne peut introduire explicitement les p que si on a déjà une fonction de Lagrange $L = L(q, \dot{q}, t)$, grâce à la définition

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = f(q, \dot{q}, t) \quad (11)$$

d'où l'on tire

$$\dot{q} = r(q, p, t)$$

et par conséquent

$$H = \Sigma p \dot{q} - L = H(q, p, t) . \quad (12)$$

Sinon, on ne peut pas introduire les p explicitement, si bien qu'on n'a aucun critère pour distinguer l'ensemble des p de l'ensemble des q , car il n'y a aucun moyen de savoir s'il faut poser les équations canoniques sous la forme ordinaire

$$\dot{q} = + \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = - \frac{\partial H}{\partial q} \quad (13)$$

ou sous la forme

$$\dot{q} = - \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = + \frac{\partial H}{\partial q}, \quad (14)$$

ce qu'on peut exprimer aussi en disant qu'on n'a aucun critère pour choisir le signe dans la définition suivante de la parenthèse de Poisson

$$\pm \left[\frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} \right]. \quad (15)$$

Mais cela implique (voir (2)) qu'on ne sait pas non plus comment choisir le signe du temps t , et c'est là le fait typique de la réversibilité de la mécanique.

Quoi qu'il arrive, on voit que le temps t joue un rôle singulier, puisqu'il faut changer le signe de t en même temps que celui des p (ou celui de t en même temps que celui des q) pour effectuer la transformation de réversibilité.

2. *La transformation de réversibilité et le formalisme homogène.* — Pour lever cette singularité du temps, on a imaginé le moyen des coordonnées homogènes. Or nous allons voir que cela laisse persister une singularité.

Convenons de laisser leur signe aux q (plutôt qu'aux p), et passons à la forme homogène. Soit k un indice romain allant de 1 à f , et α un indice grec allant de 1 à $f + 1$. On définit une parenthèse homogénéisée

$$[F, G]_{f+1} = [F, G]_f + \frac{\partial F}{\partial q_{f+1}} \frac{\partial G}{\partial p_{f+1}} - \frac{\partial F}{\partial p_{f+1}} \frac{\partial G}{\partial q_{f+1}}, \quad (16)$$

où l'on suppose F et G dépendre des coordonnées homogènes

$$q_\alpha = q_\alpha(s) \quad (17)$$

et de moments canoniquement conjugués

$$p_x = p_x(s) \tag{18}$$

fonctions d'un paramètre indépendant s nouveau, et parmi lesquels on a en particulier

$$t \equiv q_{f+1}(s) = s \tag{19}$$

On définit alors une fonction $\mathfrak{H}(q_1 \dots q_{f+1}, p_1 \dots p_{f+1})$ comme suit :

$$\mathfrak{H} \equiv H + p_{f+1} \tag{20}$$

où $H = H(q_1 \dots q_{f+1}, p_1 \dots p_f)$, donc $\frac{\partial H}{\partial p_{f+1}} = 0$ et par conséquent

$$\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial p_{f+1}} = 1 \tag{21}$$

De plus,

$$\frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial s} = 0 \tag{22}$$

Alors \mathfrak{H} est automatiquement une *intégrale première* dans la représentation homogène (c'est-à-dire après l'introduction de s comme variable absolument indépendante):

$$\mathfrak{H} = \text{const.} \tag{23}$$

Cela résulte en effet de ce que pour n'importe quelle fonction

$$\mathfrak{S} = \mathfrak{S}(q_1 \dots q_{f+1}, p_1 \dots p_{f+1}) \tag{24}$$

on a

$$\frac{d\mathfrak{S}}{ds} = [\mathfrak{S}, \mathfrak{H}]_{f+1} \tag{25}$$

comme on le vérifie par le calcul, et \mathfrak{H} est une fonction du type \mathfrak{S} , pour laquelle on a évidemment $[\mathfrak{H}, \mathfrak{H}]_{f+1} = 0$.

En coordonnées non homogènes, on considère le cas où H est une intégrale première, ce qui se présente lorsque $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$. Mais il y a une différence fondamentale entre les deux cas: H n'est une intégrale première (pour la variable indépendante t)

que dans des circonstances particulières, tandis que \mathfrak{S} est toujours une intégrale première (23) (pour la variable indépendante s).

En d'autres termes, quel que soit le système, la condition (23) doit être vérifiée.

Il y a plus: si on introduit les q_x et p_x , c'est en supposant que p_x est canoniquement conjugué à q_x ; cela est automatiquement réalisé pour $x = k$; mais pour qu'il en soit de même pour $x = f + 1$, on démontre qu'une *condition accessoire* doit être remplie, à savoir

$$\mathfrak{S} \equiv H + p_{f+1} = \text{const.} \quad (26)$$

Nous ne démontrerons pas ce théorème ici.

Il est totalement indifférent de choisir une valeur ou l'autre pour la constante dans l'une ou l'autre des équations (23) ou (26). On peut, sans restriction, poser

$$\mathfrak{S} = 0 \quad (26')$$

Revenons alors à la transformation de réversibilité.

Si, dans la forme non homogène, on renverse le signe des p_k , il pourrait sembler « évident » que, dans la forme homogène, on doive renverser le signe des p_x . Mais si on procédait ainsi, la parenthèse $[\mathfrak{S}, \mathfrak{S}]_{f+1}$ serait tout simplement changée de signe sans qu'il faille remplacer s par $-s$. Alors, pour qu'on obtienne par suite de ce renversement une nouvelle relation canonique formellement identique à (25) en tant que conséquence de l'équation (25) elle-même, il faudrait quand même renverser le signe de s , et alors on tomberait sur une contradiction, du fait que le dernier terme serait muni deux fois du signe $-$, bien qu'il doive être muni formellement une seule fois de ce signe.

On ne peut lever cette contradiction qu'en convenant de ne renverser que le signe des p_k mais pas celui de p_{f+1} , tout en renversant celui de s . Dans ce cas, on ne fait absolument rien d'autre que dans le cas des coordonnées non homogènes.

D'ailleurs, on ne peut renverser le signe de p_{f+1} sans renverser celui de H si l'on veut conserver la condition accessoire (26'). Et l'on ne saurait admettre que le signe de H change

lors d'une transformation de réversibilité. Examinons cela dans le détail.

Désignons par un astérisque les grandeurs transformées par la transformation de réversibilité censée correcte en coordonnées homogènes. Par suite de cette transformation,

s devient s^*

les q_x deviennent q_x^* , mais on sait que $q_k^* = q_k$

les p_x deviennent p_x^* , toutefois on ne sait pas si tous les p_x changent simplement de signe,

$$\begin{aligned} \mathfrak{H}(q, p) \text{ devient } \mathfrak{H}^* &= \mathfrak{H}(q^*, p^*) \\ &= \mathfrak{H}(q, p^*) . \end{aligned}$$

Pour le problème posé avant la transformation de réversibilité, \mathfrak{H} est une intégrale première:

$$\frac{d\mathfrak{H}}{ds} = 0, \quad \mathfrak{H} = c_1,$$

où c_1 ne dépend ni de s , ni des q_x , ni des p_x . Une fois la transformation de réversibilité effectuée, \mathfrak{H}^* doit être une intégrale première par rapport à s^* :

$$\frac{d\mathfrak{H}^*}{ds^*} = 0, \quad \mathfrak{H}^* = c_2,$$

où c_2 ne dépend ni de s^* , ni des q^* ni des p^* .

Donc

$$\mathfrak{H}^* - \mathfrak{H} = c,$$

c'est-à-dire, dans le détail,

$$\mathfrak{H}(q, p^*) - \mathfrak{H}(q, p) = c,$$

où c ne dépend ni des q , ni des p , ni des p^* . Mais on a, d'un point de vue formel, $c_2 = c_1^*$, donc $c = c_1^* - c_1$, alors que c_1 ne peut pas changer du tout. Il faut en conclure que $c = 0$, ce qui entraîne

$$\mathfrak{H}(q, p^*) = \mathfrak{H}(q, p) \quad (27)$$

quelles que soient les valeurs numériques individuellement prises par les p .

3. *Sur les formes possibles d'hamiltoniens.* — Pour que la transformation $p \rightarrow p^*$ ne change ni la valeur, ni le signe de \mathfrak{H} , il faut: soit que, pour quelques-uns des p_x , $p_x^* = p_x$, ce qui est le cas certainement de ceux qui apparaissent linéairement sans que leurs coefficients puissent varier par suite de la transformation, donc en particulier p_{f+1} , soit que, pour les p_x^* qui sont différents des p_x , ces p_x apparaissent dans \mathfrak{H} d'une manière fonctionnelle telle que \mathfrak{H} reste invariable lors de la transformation $p_x \rightarrow p_x^*$, ce qui serait par exemple le cas si un p_x apparaissait sous la forme du carré p_x^2 et s'il était remplacé par $p_x^* = -p_x$ par suite de la transformation.

Dans un grand nombre de problèmes, H est quadratique en les p_k (énergie cinétique). Un changement de signe des p_k ne modifie pas H . Par contre, \mathfrak{H} est toujours linéaire en p_{f+1} ; on voit de nouveau là une distinction entre p_{f+1} et les p_k .

Il existe des problèmes où H contient des termes linéaires en les p_k (électrodynamique). Or si, comme on vient de le constater, p_{f+1} ne doit pas changer de signe, H ne le doit pas non plus. Cela entraîne que les coefficients des p_k dans les termes linéaires en p_k de H changent, eux, de signe en même temps que les p_k . En électrodynamique, ces coefficients sont proportionnels aux composantes A_k du vecteur potentiel, la constante de proportionnalité contenant la charge qui ne change naturellement pas de signe, et des constantes universelles ou de définition des unités. Par exemple (formule non relativiste):

$$H = \sum_{\text{particules}} \left(\sum_{xyz} \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + e\varphi \right) \quad (28)$$

qui contient des termes bilinéaires en p_x, A_x, \dots

Que le signe des A_k doive changer aussi, cela se comprend lorsqu'on se rappelle qu'en vertu du caractère axial du champ d'induction magnétique $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, la force est proportionnelle à $\vec{p} \times \vec{B}$, et le renversement de \vec{p} dû à la transformation de réversibilité entraîne celui de \vec{B} (donc de \vec{A} , car les q restent inchangés).

Dans le cas de la relativité, les termes p_k sous le signe $\sqrt{\quad}$ en l'absence de champ sont remplacés par $p_k - \frac{e}{c} A_k$ lorsqu'un champ existe, et le raisonnement est le même.

C'est l'axialité de \vec{B} qui est en grande partie responsable de la forme à donner à la force d'origine magnétique, donc à l'apparition linéaire des A_k dans H . Il est remarquable que φ ne soit pas soumis à la même règle de transformation de réversibilité. En effet, φ doit rester inchangé. Au point de vue relativiste, φ est une composante temporelle, tandis que les A_k sont spatiaux (pour un référentiel choisi). On constate alors que la structure de l'espace-temps n'est, malgré les apparences, homogène ni au sens géométrique, ni au sens électro-dynamique.

Il semble à première vue que le passage des coordonnées non homogènes aux coordonnées homogènes satisfait à une exigence de type relativiste. Considérons une particule unique; ses trois coordonnées $x_i(t)$ sont des fonctions du temps; on peut alors passer à une description homogène soit par l'introduction d'un espace-temps comme dans la géométrie de Minkowski, soit en exigeant que t soit une variable canonique possédant un moment canoniquement conjugué. Dans les deux cas, les x_i ($i = 1, 2, 3$) et t doivent être considérés comme fonctions d'un paramètre nouveau. Cependant, les deux procédés d'homogénéisation ne sont pas isomorphes; d'une part, l'homogénéisation du formalisme canonique suppose l'existence d'un temps unique et universel, ce qui permet de la réaliser quel que soit le nombre des q_k du système, tandis qu'en relativité restreinte, on doit toujours s'en référer à un système particulier dès qu'on veut faire une comparaison d'ordre expérimental, ce qui fait qu'en fin de compte le paramètre employé ne se distingue que formellement du temps propre attaché à ce système. D'autre part, l'électrodynamique est une théorie covariante de la relativité, on en conclut par généralisation à la nécessité d'une covariance générale où toutes les grandeurs sont des tenseurs. Or le procédé d'homogénéisation du formalisme canonique ne fait pas, des grandeurs employées, des tenseurs. En effet, le passage des q_k, p_k aux q_x, p_x permettrait bien de remplacer

par exemple l'intégrale d'action $\int (\sum_k p_k dq_k - H dt)$ par une intégrale $\int \sum_x p_x dq_x$, à la condition qu'on l'interprète comme suit :

$$\int \left(\sum_k p_k \frac{dq_k}{dt} - H \right) dt \rightarrow \int \left(\sum_x p_x \frac{dq_x}{ds} \right) ds \quad (29)$$

avec la condition accessoire

$$p_{f+1} + H(q_1 \dots q_{f+1}, p_1 \dots p_f) = 0,$$

mais alors quelle serait la signification tensorielle de cette relation ? La somme $\sum p_x \frac{dq_x}{ds}$ ne peut guère être interprétée autrement que comme produit scalaire (non pas nécessairement entre deux vecteurs, mais au sens d'une contraction d'indice entre deux grandeurs tensorielles ayant les p et $\frac{dq}{ds}$ respectivement pour composantes). Mais alors il paraît impossible d'attribuer à la condition accessoire une signification tensorielle car il serait essentiel que H soit aussi une composante tensorielle du même ordre que p_{f+1} , ce qui ferait surgir une lacune dans les p_x ou ailleurs.

Ne faut-il pas reconnaître que le passage des q_k, p_k aux q_x, p_x est une véritable homogénéisation, tandis que le passage à la forme relativiste n'en est pas une ?

Que l'on puisse éventuellement mettre sous forme canonique les équations de la dynamique relativiste ne veut pas dire qu'il y ait isomorphie entre les deux procédés. Ce qu'on fait en réalité, c'est déterminer un hamiltonien à partir duquel, dans l'hypothèse où l'on peut appliquer des équations canoniques au nombre de $2(f+1) = 8$, on puisse établir les équations du mouvement relativistement correctes.

Soit τ le temps propre; on cherche $H'(x_1 x_2 x_3 x_4, p_1 p_2 p_3 p_4)$ de façon que

$$\frac{dx_i}{d\tau} = \frac{\partial H'}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{d\tau} = - \frac{\partial H'}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (30)$$

conduise aux équations dynamiques correctes. On démontre¹ que

$$H' = \frac{1}{2m_0} \sum_i \left(p_i - \frac{e}{c} \Phi_i \right)^2 \quad (31)$$

avec la condition d'avoir constamment

$$H' + \frac{m_0 c^2}{2} = 0 . \quad (32)$$

C'est l'équation (32) qui a un caractère tensoriel, H' étant un invariant. Il est vrai qu'on en déduit la condition

$$H + icp_4 = 0 \quad (33)$$

formellement identique à notre condition accessoire $\mathfrak{H} = 0$, H étant la fonction $H(x_1, x_2, x_3, t, p_1, p_2, p_3)$ à partir de laquelle on calcule correctement

$$\dot{x}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l}, \quad \dot{p}_l = - \frac{\partial H}{\partial x_l} \quad (l = 1, 2, 3) . \quad (34)$$

La fonction H en question n'est pas l'hamiltonien *non* relativiste, mais bien celui qui se déduit formellement à partir de H' . De plus, la fonction \mathfrak{H} du formalisme canonique homogène n'est pas, ici, égale au premier membre de (32), alors qu'elle devrait l'être s'il y avait identité entre le formalisme relativiste et le formalisme canonique homogène, car c'est avec \mathfrak{H} que s'écrivent les équations canoniques sous la forme homogène

$$\frac{dq_x}{ds} = \lambda \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial p_x}, \quad \frac{dp_x}{ds} = - \lambda \frac{\partial \mathfrak{H}}{\partial q_x}, \quad (35)$$

λ étant un multiplicateur de Lagrange provenant de l'intégrant du principe d'Hamilton et se trouvant dépendre du choix de s

$$\left(\lambda = \frac{dq_{j+1}}{ds} \right) .$$

¹ Voir par exemple R. BECKER, *Théorie des électrons*, trad. française, Paris, 1938, § 64.

Si on avait, avant même l'apparition de la théorie de la relativité, eu connaissance de la forme de H qui fait de (33) la conséquence de (32), le passage des coordonnées non homogènes aux coordonnées homogènes du formalisme canonique n'aurait fourni aucun résultat *dit* relativiste qui fût nouveau par rapport à une théorie non relativiste ¹.

4. *La transformation de réversibilité en théorie des quanta.* —
Considérons maintenant l'équation de Schrödinger

$$\mathcal{H}\psi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi = 0 \quad (36)$$

où \mathcal{H} est un opérateur

$$\mathcal{H} = H\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q, t\right).$$

On sait que s'il y a une correspondance au sens de Bohr-Schrödinger (ce qui diffère de la correspondance habituelle au

¹ C'est dans l'hypothèse d'une condition accessoire de la forme

$$H + p_{f+1} = \text{const.}$$

que nous tirons non seulement les conclusions ci-dessus, mais aussi celles des paragraphes suivants; et là, la linéarité de son premier membre par rapport à p_{f+1} importe.

Il est possible de généraliser en posant une condition accessoire

$$\mathcal{G}(q_1, \dots, q_{f+1}, p_1, \dots, p_{f+1}) = 0$$

non linéaire, pour y associer un système d'équations dont la forme est encore canonique. Ce procédé nécessiterait une révision de toutes nos conclusions, mais alors, on n'aurait plus la forme particulière de condition accessoire conduisant à l'équation de Schrödinger habituelle par simple application d'une correspondance $p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_x}$

de Bohr-Schrödinger !

Il convient d'indiquer ici que W. Pauli s'est déjà posé des questions analogues. Ainsi, dans ses « Vorlesungen über Optik und Elektronentheorie » (cours multigraphié de l'École polytechnique fédérale, obligeamment communiqué par l'auteur), il traite un cas qui, toutefois, à cause de la structure du problème posé, est pour ainsi dire dégénéré, du fait qu'il s'appuie sur une fonction de Lagrange du premier degré en les q' .

sens de Bohr-Heisenberg), il existe un hamiltonien classique H dans lequel il suffit de remplacer p_k par $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k}$ pour obtenir \mathcal{H} .

L'équation (36) s'obtiendrait symboliquement à partir de l'équation

$$\mathfrak{H} = 0 \quad (37)$$

si on convenait d'y faire, de \mathfrak{H} , un opérateur en y remplaçant les p_x par $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_x}$ (et non pas k) et de faire alors agir \mathfrak{H} sur ψ :

$$\mathfrak{H} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q \right) \psi = 0 \quad (q \rightarrow q_1, q_2, \dots, q_{f+1}) \quad (38)$$

Cette constatation, qui généralise la correspondance au sens de Bohr-Schrödinger, est surprenante, mais on n'a pas de moyen du genre de la correspondance au sens de Bohr-Heisenberg pour justifier le procédé qui conduit à écrire (38). La constatation est juste esquissée dans l'ouvrage de Kramers¹, mais elle est si frappante qu'il convient d'examiner de plus près ce qu'elle dévoile.

Nous savons qu'à la suite d'une transformation de réversibilité, les q_k d'une part et p_{f+1} de l'autre restent inchangés, tandis que $t^* = -t$ et $p_k^* = -p_k$. Raisonnons sur (36) en y considérant l'opérateur $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$ comme s'il était obtenu à partir de p_{f+1} . Cet opérateur ne devrait donc pas changer lorsqu'on remplace t par $t^* = -t$, ce qui n'est possible que si on y remplace aussi i par $-i$; c'est là le passage à la grandeur complexe conjuguée. Débutons alors en remplaçant (36) directement par l'équation complexe conjuguée

$$H \left(-\frac{\hbar}{i}, q, t \right) \bar{\psi} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi} = 0 \quad (39)$$

En y opérant la transformation de réversibilité sur le temps seulement, $t \rightarrow t^* = -t$, on trouve

$$H \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q, -t \right) \bar{\psi} + \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = 0 \quad (40)$$

¹ H. A. KRAMERS, « Die Grundlagen der Quantentheorie », *Hand- und Jahrbuch der chemischen Physik*, Leipzig, 1938, I, 2, § 11, page 46.

Si l'équation symbolique (38) est correcte, l'opérateur $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$ dans (40) correspondrait symboliquement à p_{f+1}^* ; cela serait correct, puisque cet opérateur reproduit identiquement celui dont il provient dans (36) au sens de (38); les opérateurs $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k}$ seraient corrects aussi puisqu'ils correspondraient à $p_k^* = -p_k$. Il existe des opérateurs hamiltoniens pour lesquels on a

$$H\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q, -t\right) = \overline{H\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q, -t\right)}. \quad (41)$$

Nous pouvons montrer alors que, pourvu que (41) soit vérifié, la transformation de réversibilité complète à effectuer sur la mécanique quantique consiste en la double opération que voici: remplacer l'équation de Schrödinger par la complexe conjuguée et renverser le signe du temps. Ces choses sont connues, mais il est désirable de les reprendre ici: Dans l'hypothèse (41), l'équation (40) s'écrit aussi

$$\overline{H\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q, -t\right)} \psi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial (-t)} = 0.$$

On y peut poser $-t = \mathfrak{S} (\equiv t^*)$, et repasser à la conjuguée complexe, ce qui s'écrit

$$H\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}, q, \mathfrak{S}\right) \psi + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \mathfrak{S}} = 0.$$

Cette équation est formellement identique à l'équation primitive (36). Or pour l'établir, nous sommes partis d'un état conjugué $\overline{\psi}$. Nous avons donc montré que pour des hamiltoniens soumis à la condition (41), la transformation de réversibilité de la théorie des quanta conjugue les états ψ , ce qui ne produit aucune modification effective, puisque en fin de compte ce sont les valeurs moyennes du type $\int \overline{\psi} A \psi d\tau$ qui comptent. C'est un résultat déjà annoncé par Watanabe¹. Mais notre démon-

¹ WATANABE, *Le deuxième théorème de la thermodynamique et la mécanique ondulatoire*. Hermann & Cie, Paris, 1935.

tration diffère notablement de la sienne, elle est même, pour le moment, attaquable, puisque nous n'avons pas justifié le passage symbolique exprimé dans l'équation (37).

Avant de fournir cette justification, faisons une remarque sur le formalisme de Heisenberg-Dirac de la mécanique quantique.

5. *Sur l'existence d'une « condition accessoire » en mécanique des quanta.* — Etant donné un opérateur A, on postule

$$\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} A - A \mathcal{H}) \quad (42)$$

qui est la traduction quantique de

$$\dot{A} = \frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] .$$

On a une intégrale première lorsque

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} A - A \mathcal{H}) = 0 ,$$

ce qui correspond à

$$\frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] = 0 .$$

Selon une remarque de L. de Broglie¹, on peut introduire l'opérateur

$$L = \mathcal{H} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} ,$$

et A est intégrale première lorsque

$$LA - AL = 0 . \quad (44)$$

S'il est vrai qu'on peut traduire la condition accessoire (37) dans le langage quantique, l'opérateur L n'est autre que la

¹ L. DE BROGLIE, *L'électron magnétique*, Paris, 1934, p. 85. Dans cet ouvrage, c'est $L = H - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$ qui est employé, tous les signes placés devant \hbar/i ayant été inversement choisis.

traduction quantique de \mathfrak{Q} . Or, en coordonnées homogènes, on a

$$\frac{dA}{ds} = [A, \mathfrak{H}]_{f+1} .$$

Il devrait donc y correspondre, par généralisation,

$$\frac{dA}{ds} = \frac{i}{\hbar} (LA - AL) . \quad (45)$$

Si A est intégrale première, $LA - AL = 0$, et si $A = L$, on ne peut écrire autre chose que

$$L = \text{const.} , \quad (46)$$

si bien que L fournirait en toute circonstance une intégrale première de la mécanique quantique.

De cette remarque ressort l'impression que l'équation de Schrödinger est l'équivalent d'une intégrale première. Reste à voir si elle est aussi la condition accessoire du formalisme canonique quantique. Rappelons que Dirac a développé un passage très délicat de l'équation canonique quantique à l'équation de Schrödinger en introduisant un opérateur de déplacement dans le temps ¹. Le calcul de Dirac fournit déjà la justification qui nous manque. Nous allons cependant la reprendre en la modifiant, pour l'adapter à notre but et l'accompagner d'un commentaire utile.

Postulons l'équation dynamique simplifiée ²

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}A - A\mathcal{H}) . \quad (47)$$

Si on interprète A et \mathcal{H} au sens des observables de Dirac, c'est que ces opérateurs agissent sur des états φ qui sont les vecteurs d'un espace d'Hilbert. Le passage de la représentation de Heisenberg à celle de Schrödinger revient à échanger la dépendance temporelle des observables contre celle de l'état ψ

¹ P. A. M. DIRAC, *Principes de la mécanique quantique*, trad. Proca et Ullmo, Paris, 1931, § 37.

² Absence du temps dans l'expression explicite de A.

du système. Soit alors φ_i un système complet de fonctions propres orthogonales. A chaque instant, on doit pouvoir développer ψ selon les φ_i : $\psi = \sum c_i \varphi_i$. Or les φ_i sont indépendants du temps, ce qui fait qu'à chaque instant on a de nouveaux coefficients c_i ; autrement dit les c_i sont des $c_i(t)$ et, au cours du temps

$$\psi = \sum c_i(t) \varphi_i . \quad (48)$$

Ce que nous voulons démontrer, c'est que si (42), par le fait que ses membres gauche et droit sont des opérateurs, s'applique à tous les φ_i , la fonction ψ , censée d'une part développable selon la formule (48) et censée d'autre part décrire l'état variable du système, est *nécessairement* solution de l'équation de Schrödinger. Pour cela, imaginons tout d'abord que l'on prépare au temps t une observation du système par un arrangement déterminé des appareils de mesure et des actions extérieures auxquelles le système est soumis. Par suite de cette préparation, le système se trouve dans un état décrit par une certaine fonction ψ_I . L'expérience n'est pas encore faite, de sorte que ψ_I désigne non pas un état propre mais la fonction d'état pour ce système préparé. Supposons alors que l'on refasse exactement le même arrangement des appareils de mesure et des forces agissant sur ce système, mais au temps $t + \Delta t$; il y correspond une fonction ψ_{II} , et nous poserons pour définition d'un opérateur $\frac{D\psi}{Dt}$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\psi_{II} - \psi_I}{\Delta t} = \frac{D\psi}{Dt} . \quad (49)$$

Soit maintenant A une observable qui, quand on l'exprime en fonction des q, p , ne contient pas explicitement le temps t , et effectuons l'opération $A\psi$.

Rien ne nous empêche de calculer la limite (49) pour $A\psi$, et on a

$$\frac{D}{Dt} A\psi = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(A\psi)_{II} - (A\psi)_I}{\Delta t} .$$

Or $(A\psi)_{II}$ est le résultat de l'opération $A\psi$ dans le second arrangement de mesure, de sorte que

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} A\psi &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{A_{t+\Delta t} \left(\psi_I + \frac{D\psi}{Dt} \Delta t \right) - A_t \psi_I}{\Delta t} \\ &= \frac{dA}{dt} \psi + A \frac{D\psi}{Dt} \end{aligned} \quad (50)$$

soit, en écrivant \dot{A} pour $\frac{dA}{dt}$:

$$\dot{A}\psi = \left(\frac{D}{Dt} A - A \frac{D}{Dt} \right) \psi \quad (51)$$

Or ψ_{II} est censé représenter exactement le même état préparé pour une observation que ψ_I , mais où l'état ψ_{II} est déplacé de Δt dans le temps. Une fois ψ connu, c'est une fonction des paramètres choisis, q ; il faut donc que ψ_{II} soit la même fonction des q que ψ_I , mais après que le temps a été augmenté de Δt ; c'est donc $\psi_I(q_{t-\Delta t})$, et par conséquent

$$\frac{D\psi}{Dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\psi_I(t - \Delta t) - \psi_I(t)}{\Delta t} = - \frac{d\psi}{dt} \quad (52)$$

Telle est la partie du raisonnement délicat de Dirac qui nous sera utile.

Appliquons maintenant formellement l'équation (47) membre à membre à la fonction ψ telle qu'elle est développée en (48) (aucun des opérateurs contenus dans (47) n'est égal à $p_{j+1} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$). Cette application nous donne identiquement

$$\dot{A}\psi = \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}A - A\mathcal{H})\psi$$

En comparant avec (50), on en conclut que

$$\left(\frac{D}{Dt} A - A \frac{D}{Dt} \right) \psi = \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}A - A\mathcal{H})\psi$$

Cette relation est identiquement vérifiée si l'observable \mathcal{H} est identique à l'observable $\frac{\hbar}{i} \frac{D}{Dt}$ ¹, auquel cas on a, en vertu de (52), une équation $(\mathcal{H} + \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt})\psi = 0$ qui s'écrit, aussitôt qu'on emploie des paramètres de représentation :

$$\left(\mathcal{H} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\right)\psi = 0 \quad (53)$$

et qui apparaît comme la condition connexe de toute équation dynamique (47). En d'autres termes, l'opération différentielle $-\frac{\partial}{\partial t}$, aussitôt qu'elle est égalée à l'opérateur $\frac{D}{Dt} = \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}$, fournit une sorte d'intégrale première nécessairement valable dans tout problème quantique.

Notre démonstration établit deux faits d'une certaine importance. D'une part, il est établi que c'est l'équation $\mathfrak{S} = 0$ en tant que condition accessoire de la mécanique classique, qui correspond à l'équation de Schrödinger, et non pas l'équation d'Hamilton-Jacobi pour la fonction d'action S. (L'équation d'Hamilton-Jacobi est une première approximation de l'équation de Schrödinger lorsqu'on pose $\psi = a_0 e^{\frac{2\pi i}{\hbar} S}$.) D'autre part, cette démonstration révèle que l'équation de Schrödinger ressortit à l'existence d'une intégrale première universelle de la mécanique classique, à savoir $\mathfrak{S} = \text{const.} = 0$, cela paraît bien normal, puisque la correspondance

$$[A, H] \longrightarrow \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} A - A \mathcal{H})$$

a pour conséquence les théorèmes de non-simultanéité des variables quantiques canoniquement conjuguées, qui eux-

¹ Elle pourrait en différer tout au plus par une constante additive α . Dans ce cas, l'équation de Schrödinger s'écrirait, au lieu de (53):

$$\left(\mathcal{H} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}\right)\psi = \alpha \psi,$$

ce qui est en accord avec la condition accessoire classique et ne change en principe rien aux applications (théorie de l'atome, etc.).

mêmes nécessitent pour la représentation paramétrique un choix entre les q et les p , si bien que par rapport à la mécanique classique (équations différentielles du deuxième ordre pour les q ou double système d'équation du premier ordre pour les q et les p) la théorie des quanta doit travailler avec des équations dont l'ordre est de un inférieur et correspond donc à celui d'une intégrale première de la mécanique classique.

Si on se refuse à considérer l'équation de Schrödinger comme une sorte d'intégrale première pour réserver ce nom uniquement à l'espèce d'intégrale $\dot{A} = 0$ obtenue par correspondance, il faut s'exprimer alors en disant que l'indétermination quantique a pour effet de faire perdre à $\mathfrak{Q} = \text{const.}$ son caractère d'intégrale première tout en lui laissant son caractère de condition accessoire universelle.

En résumé nous avons montré que le procédé souvent évoqué dans les ouvrages, qui consiste à établir l'équation de Schrödinger en remplaçant les p_k par $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k}$ et H par $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$ n'est pas correct ¹, tandis que cela a un sens de convenir d'une correspondance faisant passer des grandeurs classiques aux observables de Dirac, correspondance qu'on peut appliquer directement en remplaçant les p_x par $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_x}$ dans la condition accessoire.

*Université de Berne.
Séminaire de Physique théorique.*

¹ Voir aussi: A. MERCIER et E. KEBERLE, L'énergie et le temps, et les relations canoniques, *Archives des Sciences*, 2, 186, 1949, où il est expliqué pourquoi $-H$ et t ne sont pas canoniquement conjugués.