



**HAL**  
open science

# Proposition d'une reformulation de la mécanique quantique basée sur une dérivation déterministe des équations quantiques

Laurent Millot

## ► To cite this version:

Laurent Millot. Proposition d'une reformulation de la mécanique quantique basée sur une dérivation déterministe des équations quantiques. 2024. hal-04369358

**HAL Id: hal-04369358**

**<https://hal.science/hal-04369358>**

Preprint submitted on 2 Jan 2024

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Proposition d'une reformulation de la mécanique quantique basée sur une dérivation déterministe des équations quantiques

Laurent Millot

ENS Louis-Lumière, La cité du Cinéma, 20 rue Ampère, 93200 Saint-Denis Cedex, France  
l.millot@ens-louis-lumiere.fr

1<sup>er</sup> janvier 2024

## Résumé

En partant des différentes formulations d'un problème classique de propagation d'ondes planes en champ libre, on montre comment obtenir l'équation quantique associée à un problème mécanique donné en partant de l'équation de conservation de l'énergie totale. On illustre l'efficacité de cette reformulation en retrouvant des équations quantiques usuelles, relativistes ou non, appartenant aux familles d'équations de Schrödinger, de Klein-Gordon et de Dirac. L'étude des conséquences de cette reformulation permet notamment de proposer des éléments de réponses à des problèmes tels que la réduction de la fonction d'onde, la superposition quantique, la dualité onde/corpuscule, ou les inégalités d'Heisenberg. En effet, on constate que la description quantique d'un problème donné ne concerne pas l'espace-temps ordinaire mais un espace-temps quantique virtuel. Ainsi, dans le cadre de la reformulation proposée, la description quantique se révèle incapable de rendre compte des grandeurs telles que la position, la quantité de mouvement ou les trajectoires des particules composant le système étudié.

## 1 Introduction

Dans l'approche traditionnelle de la mécanique quantique [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7], les équations quantiques de Schrödinger, de Klein-Gordon ou de Dirac sont introduites comme des postulats et, en général, le lien avec la description classique se fait en ayant recours à un principe de correspondance reliant notamment l'énergie totale  $E$  et l'opérateur  $j\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ , la quantité de mouvement  $\vec{p}$  et l'opérateur  $-j\hbar\vec{\nabla}$ . On aboutit alors à des opérateurs quantiques que l'on applique à une fonction d'onde, elle aussi quantique. Et, on utilise généralement l'hypothèse, proposée par Born [8], selon laquelle le carré du module de la fonction d'onde correspond à la densité volumique de probabilité d'existence d'une particule dans un petit volume centré sur le point considéré.

Mais, cette formulation n'est pas satisfaisante parce qu'un certain nombre de questions ou de problèmes restent sans réponse claire. On peut citer l'hypothèse de la superposition des états quantiques qui a donné lieu à la proposition du paradoxe dit du chat de Schrödinger et peut conduire à supposer que les particules du système mécanique étudié n'adopteraient un état précis que lorsqu'une interaction ou une mesure est réalisée. Ce problème met en évidence l'absence d'une solution claire aux problèmes de définition de la mesure et de la réduction de la fonction d'onde entraînant la fin instantanée de la superposition quantique et l'adoption d'un état unique quand on cherche à mesurer un système. Les inégalités d'Heisenberg conduisent à proposer que l'on ne peut pas réaliser de mesures simultanées sur la position et la quantité de mouvement d'une particule, que le concept de trajectoires des particules n'aurait

aucun sens, ainsi qu'au principe de l'existence de fluctuations quantiques du vide. Le fait que les phénomènes quantiques se manifestent sous l'apparence de phénomènes corpusculaires ou ondulatoires selon les conditions de l'expérience réalisée a conduit certains physiciens à proposer qu'il existe une dualité onde-corpuscule, d'autres que les phénomènes ne sont qu'ondulatoires, et d'autres encore à proposer que les corpuscules et les ondes quantiques coexistent simultanément. En fait, il semble que les phénomènes à l'échelle atomique ne se comportent pas du tout comme les phénomènes aux échelles supérieures sans que l'on sache vraiment comment et que la question de la transition d'un comportement quantique à un comportement différent à l'échelle supérieure reste non tranchée. Certains physiciens ont suggéré que c'est ainsi que la nature fonctionne quand d'autres soupçonnent, par exemple, que la description quantique n'est pas définitive ou complète, voire qu'il existerait des variables cachées que la description quantique ne prendrait pas en compte. Tous ses soucis ou questions conduisent à l'existence d'interprétations différentes de la formulation quantique la plus courante, souvent associée à l'interprétation dite « de Copenhague » et proposée notamment par Born et Heisenberg, voire même à d'autres formulations.

Au travers de cet article, nous exposons la proposition d'un principe de reformulation de la mécanique quantique en partant de la description classique par l'équation de conservation de l'énergie totale du système mécanique et en considérant une autre définition pour la fonction d'onde. Et, pour construire cette reformulation, nous nous inspirons du traitement d'un problème de propagation d'ondes classiques, pris comme référence, où, partant d'une équation d'onde, valide dans l'espace-temps, nous aboutissons notamment à la relation de dispersion valide dans un espace fréquentiel dual relié à l'espace-temps par une transformée de Fourier spatio-temporelle. Le principe de reformulation proposé reposera alors sur la reprise du processus, utilisé dans le problème de référence, mais à rebours, avec comme point de départ l'équation de conservation de l'énergie totale pour le système mécanique étudié.

Nous verrons que l'adoption de ce schéma de construction nous conduit à introduire un problème étendu faisant intervenir un objet classique qui est supposé associé, par transformée de Fourier quantique inverse, à la fonction d'onde quantique du système. Or cette étape d'extension du problème mécanique, nécessaire pour retrouver au final l'équation quantique associée au système mécanique étudié, va introduire des modifications conséquentes ne serait-ce que concernant l'interprétation de la fonction d'onde. En effet, il ne sera plus possible de supposer comme Born [8] que la fonction d'onde correspond à l'amplitude de probabilité de présence de la particule étudiée dans un petit voisinage d'un point donné à un instant donné.

Avec le principe de reformulation proposé, nous verrons que la description quantique ne correspond pas à une description des phénomènes dans l'espace-temps ordinaire et que cette description ne donne pas d'information, notamment, sur la position, la quantité de mouvement (ou l'impulsion), ou sur les trajectoires de particules composant le système mécanique étudié. Cette reformulation permet, par contre, de proposer une justification et/ou origine mathématique au principe de correspondance et elle semble indiquer que l'on peut dériver l'équation quantique associée à un système mécanique en partant de l'équation de conservation de l'énergie pour ce système. Elle permet aussi de proposer des éléments de réponses à des questions ou des problèmes usuels : superposition des états, réduction de la fonction d'onde ou du paquet d'ondes, problème de la mesure, dualité onde-corpuscule, inégalités de Heisenberg et leurs conséquences, question des variables cachées, par exemple. Cette reformulation met aussi en évidence le besoin d'une extension de la mécanique quantique réalisant une quantification complète de tous les termes intervenant dans l'équation de conservation de l'énergie et pas seulement de l'énergie mécanique totale et des termes d'énergie cinétique, la quantification partielle interdisant le retour de la description quantique à la description classique dans l'espace-temps ordinaire.

Dans la deuxième section, on commence par introduire le problème classique de la propagation d'ondes en champ libre qui va servir de problème de référence pour expliquer la construction de la reformulation proposée. Partant de l'équation de propagation scalaire usuelle d'ondes planes, non dissipatives, on introduit les définitions de transformées de Fourier, directes et inverses, temporelles, spatiales puis spatio-temporelles. Ensuite, en utilisant ces transformées, on dérive l'équation de Helmholtz ainsi que l'équation purement fréquentielle correspondant à l'application de la transformée de Fourier spatio-temporelle à l'équation de propagation. Enfin, on déduit la relation de dispersion associée à cette description duale purement fréquentielle.

Dans la troisième section, on montre que le principe de reformulation correspond à la reprise de la démarche adoptée pour le problème de référence de propagation d'ondes en champ libre, mais, en progressant à rebours. En effet, en considérant l'équation de conservation de l'énergie comme l'analogue de la relation de dispersion, on construit d'abord un nouveau problème constituant l'analogue de la description duale purement fréquentielle du problème de référence. Puis, on définit la transformée de Fourier quantique inverse adaptée au problème considéré qui, appliquée au nouveau problème, donne l'équation quantique associée à la configuration mécanique étudiée.

Dans la quatrième section, on commence par proposer un résumé du principe générique de dérivation d'une équation quantique. Puis, on illustre ce que donne l'application de ce principe de dérivation pour une sélection de cas classiques non relativistes puis relativistes faisant ou non intervenir un champ électromagnétique. Ces exemples illustrent le fait que la reformulation proposée semble permettre la dérivation, à partir de l'équation de conservation de l'énergie classique considérée, relativiste ou non, des principales familles d'équations quantiques : équations de Schrödinger, équations de Klein-Gordon et équations de Dirac.

Enfin, dans les deux dernières sections, on discute des conséquences associées à la reformulation proposée en s'intéressant aux hypothèses ou principes quantiques fondamentaux tels que la superposition quantique, la réduction de la fonction d'onde, la dualité onde/corpuscule ou les inégalités d'Heisenberg, puis, on esquisse quelques pistes concernant notamment l'extension de la mécanique quantique.

## 2 Problème ondulatoire classique servant de référence

On introduit dans cette section différentes descriptions d'un problème ondulatoire classique qui va servir de base à la proposition de reformulation de la mécanique quantique.

On considère la question de la propagation en champ libre d'ondes scalaires planes, non dissipatives, « tridimensionnelles », ondes que l'on note  $\psi(\vec{r}, t)$  où  $t$  désigne le temps et  $\vec{r}$  correspond au vecteur position avec comme origine choisie le « point-source » pour ces ondes. Si on se place en champ libre, les ondes  $\psi(\vec{r}, t)$  sont supposées satisfaire l'équation de propagation d'ordre 2 usuelle suivante :

$$\Delta\psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2\psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (1)$$

pour tous les couples  $(\vec{r}, t)$  physiquement pertinents en champ libre et où  $c_0$  correspond à la célérité des ondes considérées.

On considère aussi les transformées de Fourier temporelles, directe  $\text{TF}_\omega$  et inverse  $\text{TF}_\omega^{-1}$ , faisant le lien entre le signal temporel  $s(t)$  et sa transformée de Fourier temporelle  $S_\omega(\omega)$  où  $\omega$  correspond à la pulsation (temporelle) :

$$\begin{aligned} - \text{TF}_\omega : S_\omega(\omega) &= \int_{\mathbb{R}} s(t).e^{-j\omega t} dt; \\ - \text{TF}_\omega^{-1} : s(t) &= \int_{\mathbb{R}} S_\omega(\omega).e^{j\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}. \end{aligned}$$

En appliquant la transformée de Fourier directe  $\text{TF}_\omega$  à l'équation spatio-temporelle de propagation des ondes (1), on obtient une équation spatio-fréquentielle, l'équation de Helmholtz :

$$\Delta \Psi_\omega(\vec{r}^\rceil, \omega) + \left(\frac{\omega}{c_0}\right)^2 \Psi_\omega(\vec{r}^\rceil, \omega) = 0, \quad \forall \omega \in \mathbb{R}, \forall \vec{r}^\rceil \text{ pertinent}, \quad (2)$$

satisfaite par la transformée de Fourier temporelle  $\Psi_\omega(\vec{r}^\rceil, \omega)$  de l'onde  $\psi(\vec{r}^\rceil, t)$ .

Comme on a aussi besoin d'une description de référence complètement fréquentielle, on introduit aussi les transformées de Fourier spatiales, directes  $\text{TF}_{\vec{k}}$  et inverse  $\text{TF}_{\vec{k}}^{-1}$ , construites en suivant le même principe que pour la  $\text{TF}_\omega$  et la  $\text{TF}_\omega^{-1}$  mais en procédant à une extension en dimension 3 et en considérant le vecteur d'onde  $\vec{k}$  comme variable fréquentielle spatiale. Les définitions de ces deux transformées, permettant de faire le lien entre le signal spatial  $s(\vec{r}^\rceil)$  et sa transformée de Fourier spatiale  $S_{\vec{k}}(\vec{k}^\rceil)$ , sont alors les suivantes :

$$\begin{aligned} - \text{TF}_{\vec{k}} : S_{\vec{k}}(\vec{k}^\rceil) &= \int_{\mathbb{R}^3} s(\vec{r}^\rceil).e^{-j\vec{k}^\rceil \cdot \vec{r}^\rceil} d^3r; \\ - \text{TF}_{\vec{k}}^{-1} : s(\vec{r}^\rceil) &= \int_{\mathbb{R}^3} S_{\vec{k}}(\vec{k}^\rceil).e^{j\vec{k}^\rceil \cdot \vec{r}^\rceil} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \end{aligned}$$

A partir des transformées de Fourier temporelles et spatiales, directes et inverses, précédemment introduites, on peut construire deux nouvelles transformées de Fourier, directe et inverse, spatio-temporelles qui permettront d'aboutir à la description complètement fréquentielle du problème de propagation (1). On notera respectivement  $\text{TF}_{\vec{k}, \omega}$  la quadri-transformée de Fourier spatio-temporelle directe et  $\text{TF}_{\vec{k}, \omega}^{-1}$  son inverse. Leurs définitions respectives, permettant de faire le lien entre un signal spatio-temporel  $s(\vec{r}^\rceil, t)$  et sa transformée de Fourier quadri-fréquentielle  $S_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}^\rceil, \omega)$ , sont alors les suivantes :

$$\begin{aligned} \text{TF}_{\vec{k}, \omega} : S_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}^\rceil, \omega) &= \int_{\mathbb{R}^4} s(\vec{r}^\rceil, t).e^{-j(\vec{k}^\rceil \cdot \vec{r}^\rceil + \omega t)} d^3r. dt \\ \text{TF}_{\vec{k}, \omega}^{-1} : s(\vec{r}^\rceil, t) &= \int_{\mathbb{R}^4} S_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}^\rceil, \omega).e^{j(\vec{k}^\rceil \cdot \vec{r}^\rceil + \omega t)} \frac{d^3k. d\omega}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (3)$$

Le choix a été fait de retenir la même convention de phase pour toutes les transformées de Fourier directes, comme inverses, car ces transformées peuvent s'appliquer à des phénomènes quelconques et pas seulement à des phénomènes ondulatoires : adopter une convention de signe différente pour les exponentielles complexes spatiales et temporelles revient à anticiper une nature ondulatoire pour les phénomènes étudiés. L'apparition des puissances de  $2\pi$ , avec une puissance correspondant à la dimension de l'espace des signaux ou phénomènes considérées, découle directement de la définition de la transformée de Fourier directe temporelle, avec des occurrences de  $2\pi f$  en lieu et place de celles de  $\omega$ , comme un produit

scalaire du signal temporel étudié  $s(t)$  avec les vecteurs de base  $\{e^{j2\pi ft}\}_{f \in \mathbb{R}}$ , et, de la définition de transformée de Fourier inverse comme la re-synthèse du signal  $s(t)$  : le changement de variables  $\omega = 2\pi f$  conduit alors à l'apparition d'un  $\frac{d\omega}{2\pi}$  se substituant au  $df$  dans la définition de la transformée de Fourier temporelle inverse.

Sous réserve que toutes les conditions d'existence soient réunies, ce qui paraît vraisemblable pour des phénomènes physiques susceptibles d'être observés, on peut donc appliquer la quadri-transformée de Fourier spatio-temporelle directe à l'équation de propagation des ondes (1). On obtient alors le problème purement fréquentiel (de dimension 4) associé :

$$(\omega^2 - c_0^2 \cdot (\vec{k})^2) \cdot \Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega) = 0, \quad \forall (\vec{k}, \omega) \in \mathbb{R}^4, \quad (4)$$

qui fait intervenir la transformée de Fourier spatio-temporelle  $\Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega)$  associée à l'onde  $\psi(\vec{r}, t)$ .

Si on écarte la solution triviale correspondant à l'absence d'ondes, correspondant à la condition  $\Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega) = 0, \forall (\vec{k}, \omega) \in \mathbb{R}^4$ , on aboutit alors à la condition reliant les valeurs du vecteur d'onde  $\vec{k}$  à celles de la pulsation  $\omega$ , associée au problème ondulatoire considéré, condition que l'on nomme habituellement relation de dispersion :

$$\omega^2 - c_0^2 \cdot (\vec{k})^2 = 0, \quad \forall (\vec{k}, \omega) \in \mathbb{R}^4. \quad (5)$$

On dispose à ce stade de toutes les équations qui vont servir à construire, par analogie, la reformulation proposée pour la mécanique quantique : l'équation de propagation des ondes (1), l'équation de Helmholtz (2), la définition de la transformée de Fourier spatio-temporelle inverse (3), l'équation purement fréquentielle du problème ondulatoire (4) ainsi que la relation de dispersion (5).

Dans la section suivante, en considérant un cas simple, on montre que l'on peut proposer une reformulation de la mécanique quantique, permettant d'aboutir à l'équation quantique associée au problème étudié, en suivant le processus inverse de celui adopté pour introduire les différentes descriptions du problème de référence, c'est-à-dire en considérant, comme point de départ et relation de dispersion, l'équation de conservation de l'énergie pour le problème étudié.

### 3 Principe de la reformulation

Dans la suite, on appellera processus inverse le processus consistant à :

1. partir de l'équation de conservation de l'énergie prise comme analogue de la relation de dispersion (5);
2. construire la description purement fréquentielle analogue à (4);
3. définir la transformée de Fourier inverse analogue à la transformée de Fourier spatio-temporelle inverse (3);
4. appliquer cette transformée de Fourier inverse à l'analogue de (4);
5. déduire l'équation quantique associée au système mécanique considéré.

Pour illustrer de manière simple le principe de reformulation proposé, on considère le cas d'un système constitué d'une unique particule non relativiste (c'est-à-dire une particule pour laquelle on a  $v/c_0 < 0.1$ ), de masse  $m$ , de position  $\vec{r}$  et de quantité de mouvement  $\vec{p}$  soumise à un champ scalaire  $V(\vec{r}, t)$ .

Pour construire cette reformulation de la mécanique quantique, on considère les principes suivants [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7] :

- l'équation de conservation de l'énergie qui indique que l'énergie totale  $E$  est égale à l'hamiltonien classique du système défini, dans le cas étudié, par  $H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$ ;
- la relation de Planck-Einstein, proposée au départ pour relier les aspects corpusculaires et ondulatoires de la lumière, mais étendue par de Broglie au cas des particules libres massiques pour relier l'énergie mécanique totale  $E$  de la particule et la fréquence  $\nu$  ou la pulsation  $\omega$  de l'onde quantique associée :  $E = h.\nu = \hbar.\omega$  ;  $\hbar = h/2\pi$  étant la constante de Planck réduite ;
- la relation de de Broglie qui, complète la description du lien entre les aspects corpusculaires et ondulatoires pour les particules en associant, à toute particule de quantité de mouvement  $\vec{p}$ , une onde quantique de vecteur d'onde  $\vec{k}$  avec  $\vec{p}$  et  $\vec{k}$  liés par la relation :  $\vec{p} = \hbar.\vec{k}$ .

Grâce aux relations de Planck-Einstein et de de Broglie, on dispose d'un jeu complet de relations permettant de relier le couple de variables ondulatoires  $(\vec{k}, \omega)$  au couple de variables corpusculaires  $(\vec{p}, E)$  :

$$(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar} (\vec{p}, E). \quad (6)$$

Dans le cas quantique, l'équation de conservation de l'énergie joue le rôle de la relation de dispersion (5), dans le cas du problème référence. Il faut donc construire l'analogue quantique de l'équation purement fréquentielle (4) qui correspond à la multiplication de la relation de dispersion (5) par la transformée de Fourier spatio-temporelle  $\Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega)$ .

Si on procède par analogie, il faut donc multiplier l'équation de conservation de l'énergie par l'équivalent pertinent de  $\Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega)$ . Or, puisque le jeu de relations (6) permet de passer du couple de variables fréquentielles  $(\vec{k}, \omega)$  au couple de variables  $(\vec{p}, E)$ , il est alors logique d'adopter  $\Psi(\vec{p}, E)$  comme analogue à  $\Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega)$ . On a choisi d'adopter la notation  $\Psi(\vec{p}, E)$  et pas  $\Psi_{\vec{p}, E}(\vec{p}, E)$  parce qu'il n'y aura, pour chaque système mécanique étudié, qu'un seul équivalent quantique à la TFF  $\Psi_{\vec{k}, \omega}$  et que les variables « fréquentielles » analogues au couple classique ondulatoire  $(\vec{k}, \omega)$  varieront en nombre en fonction du nombre de particules composant le système mécanique considéré.

L'équation purement fréquentielle de référence (4) s'interprète comme la description duale, dans l'espace fréquentiel  $(\vec{k}, \omega)$ , du problème de propagation des ondes en champ libre associé à (1). Or, cette description duale indique que, contrairement au cas de phénomènes spatio-temporels quelconques, dans le cas des phénomènes spatio-temporels ondulatoires en champ libre, les variables fréquentielles  $\vec{k}$  et  $\omega$  ne sont pas indépendantes et que, par suite, les 4 intégrations figurant dans la définition de la quadri-transformée de Fourier spatio-temporelle inverse (3) ne doivent pas être effectuées dans tout l'espace  $(\vec{k}, \omega)$  mais pour sa restriction aux seuls couples  $(\vec{k}, \omega)$  satisfaisant la relation de dispersion (5). Cela

signifie que seules les valeurs de  $\Psi_{\vec{k},\omega}(\vec{k},\omega)$ , associées aux couples  $(\vec{k},\omega)$  satisfaisant la relation de dispersion (5), ont une contribution non nulle dans la re-synthèse de l'onde  $\psi(\vec{r},t)$ . On peut donc considérer que  $\Psi_{\vec{k},\omega}(\vec{k},\omega)$  correspond à l'amplitude de probabilité que le signal  $\exp(j(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t))$  contribue à  $s(\vec{r},t)$  en chaque point  $(\vec{r},t)$  de l'espace-temps puisque l'on utilise des transformées de Fourier spatio-temporelles globales prenant en compte toutes les pulsations  $\omega$  ( $\omega \in \mathbb{R}$ ) et tous les nombres d'onde  $\vec{k}$  ( $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ ).

En optant pour cette interprétation de  $\Psi_{\vec{k},\omega}(\vec{k},\omega)$ , on peut alors considérer, par analogie, que  $\Psi(\vec{p},E)$  correspond à l'amplitude de probabilité que le couple  $(\vec{p},E)$  corresponde à un point de fonctionnement partiel du système mécanique étudié. Ce point de fonctionnement est partiel car, contrairement à la relation de dispersion (5), l'équation de conservation de l'énergie comporte un terme qui ne dépend pas des variables  $\vec{p}$  et  $E$  mais de  $\vec{r}$  et  $t$  : le terme d'énergie potentielle faisant intervenir, pour le problème simple considéré, un potentiel scalaire dépendant de la position de la particule  $\vec{r}$  et, au besoin, du temps  $t$ . En fait, au lieu de considérer le problème associé à l'équation de conservation de l'énergie du système, qui est valide pour chaque point  $(\vec{r},\vec{p},E,t)$  de la trajectoire de la particule, on considère un nouveau problème qui correspond à l'extension du problème initial à la recherche de tous les points  $(\vec{r},\vec{p},E,t)$  susceptibles de satisfaire la même condition sans pour autant correspondre à une trajectoire potentielle. De plus, la seule donnée de l'équation de conservation de l'énergie n'est pas suffisante pour trouver la trajectoire effectivement suivie par la particule considérée puisqu'il manque l'information sur les conditions initiales ainsi que sur les conditions limites potentielles. Dans ce cas, l'équation de conservation de l'énergie n'est valide que pour les trajectoires effectivement possibles et, par suite,  $\Psi(\vec{p},E)$  correspond alors à l'amplitude de probabilité qu'un couple  $(\vec{p},E)$  puisse effectivement constituer une solution valide du problème étendu pour le point  $(\vec{r},t)$  choisi.

Dans la reformulation, on considère alors l'analogie suivant pour la description purement fréquentielle (4) :

$$E \cdot \Psi(\vec{p},E) = H(\vec{p},\vec{r},t) \cdot \Psi(\vec{p},E) = \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r},t) \right) \cdot \Psi(\vec{p},E), \quad (7)$$

nommé dans la suite problème étendu, le premier problème, associé à l'équation de conservation de l'énergie  $E = H(\vec{p},\vec{r},t)$ , n'étant valide que le long de la trajectoire suivie par la particule étudiée.

Dans le problème ondulatoire classique de référence,  $\Psi_{\vec{k},\omega}(\vec{k},\omega)$  correspond à la TF $_{\vec{k},\omega}$  de l'onde  $\psi(\vec{r},t)$ . Or, on a substitué le couple  $(\vec{p},E)$  au couple  $(\vec{k},\omega)$  en utilisant le jeu de relations (6). En suivant le même principe, on choisit d'associer le couple  $(\vec{r},t)$  au couple  $(\vec{p},E)$  et donc  $\psi(\vec{r},t)$  à  $\Psi(\vec{p},E)$  grâce à la définition de transformée de Fourier quantique inverse (TFQI) suivante :

$$\text{TFQI} : \psi(\vec{r},t) = \int_{\mathbb{R}^4} \Psi(\vec{p},E) \cdot \exp\left(\frac{j}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right) \frac{d^3p \cdot dE}{h^4}. \quad (8)$$

Par rapport à la TF $_{\vec{k},\omega}^{-1}$ , la définition de la phase des exponentielles complexes change avec l'apparition d'un signe négatif car on s'est appuyés sur la définition de l'action  $S$  qui s'écrit :

$$S = \int L dt = \int \left( \vec{p} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} - H \right) dt = \int \vec{p} \cdot d\vec{r} - \int E dt,$$

lorsque l'hamiltonien  $H$  ne dépend pas explicitement du temps et parce que  $E = H$  ;  $L$  correspondant au lagrangien du système étudié. On peut noter que la convention de phase choisie correspond aussi au



choix traditionnel pour traiter les problèmes de propagation d'ondes ou bien encore justifier ce choix car il va permettre de retrouver l'équation quantique de Schrödinger. Dans le cas de la  $\text{TF}_{\vec{k}, \omega}^{-1}$  définie par (3) on introduisait une définition adaptée à des phénomènes spatio-temporels quelconques, tandis que, dans le cas quantique, on cherche à chaque fois l'équation d'onde quantique associée au système considéré.

Dans les faits, on va passer de l'équation non linéaire (7) qui dépend de  $\vec{r}'$ ,  $t$ ,  $E$  et  $\vec{p}'$  à une équation ne faisant plus intervenir que des quantités dépendant de  $\vec{r}'$  et de  $t$ , en utilisant certaines des propriétés de la TFQI. Ainsi, en supposant que pour le cas étudié il n'y aura jamais de problème d'existence de  $\psi(\vec{r}', t)$  la TFQI de  $\Psi(\vec{p}', E)$ , on peut définir les couples (signal, TFQI) suivants :

- $\Psi(\vec{p}', E) \xrightarrow{\text{TFQI}} \psi(\vec{r}', t);$
- $V(\vec{r}', t) \cdot \Psi(\vec{p}', E) \xrightarrow{\text{TFQI}} V(\vec{r}', t) \cdot \psi(\vec{r}', t);$
- $E \cdot \Psi(\vec{p}', E) \xrightarrow{\text{TFQI}} j\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}', t)}{\partial t};$
- $\Psi(\vec{p}', E) \cdot \vec{p}' \xrightarrow{\text{TFQI}} -j\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}', t);$
- $\Psi(\vec{p}', E) \cdot \vec{p}'^2 \xrightarrow{\text{TFQI}} -\hbar^2 \Delta \psi(\vec{r}', t);$

ce qui constitue une justification mathématique du principe de correspondance. Et, on constate que l'on retrouve une bonne partie des opérateurs quantiques usuels à partir des propriétés de la TFQI par rapport aux dérivations partielles et multiplications par rapport à des fonctions ne dépendant pas des variables  $\vec{p}'$  et  $E$ . D'ailleurs, c'est encore en considérant le bon couple (signal, TFQI), au besoin en partant d'un des couples proposés, que l'on pourrait définir d'autres opérateurs quantiques.

Par contre, la flèche ne va pas dans les deux sens puisque la TFQ de  $V(\vec{r}', t) \cdot \psi(\vec{r}', t)$  n'est égale à  $V(\vec{r}', t) \cdot \Psi(\vec{p}', E)$  que lorsque le potentiel  $V(\vec{r}', t)$  est constant et uniforme (ou nul partout) :  $V(\vec{r}', t)$  constant pour toutes les positions  $\vec{r}'$  et tous les temps  $t$ . Et, quand ce n'est pas le cas, la TFQ de  $V(\vec{r}', t) \cdot \psi(\vec{r}', t)$  est alors égale à  $\text{TFQ}[V(\vec{r}', t)] * \Psi(\vec{p}', E)$ , c'est-à-dire au produit de convolution de  $\text{TFQ}[V(\vec{r}', t)]$  par  $\Psi(\vec{p}', E)$ . En fait, cela signifie que, si on peut effectivement appliquer la TFQI à l'équation (7), l'application de la TFQ à l'équation quantique que l'on aura obtenue ne redonnera pas l'équation (7), sauf dans le cas très particulier où le potentiel  $V(\vec{r}', t)$  est constant et uniforme. On ne pourra donc pas, en général, envisager d'utiliser l'expression de la fonction d'onde, trouvée en résolvant l'équation quantique, pour revenir par TFQ à l'équation (7). Ainsi, sauf pour des cas très particuliers, comme un système composé de particules libres par exemple, on pourra calculer l'amplitude de probabilité  $\Psi(\vec{p}', E)$  associée par TFQ à la fonction d'onde quantique  $\psi(\vec{r}', t)$  mais cela ne nous permettra de résoudre ni l'équation (7), ni l'équation de conservation de l'énergie.

De plus, on ne peut pas non plus obtenir d'équation analogue à l'équation de propagation des ondes (1). En effet, puisqu'on utilise une définition de la TFQI faisant le lien entre le couple  $(\vec{p}', E)$  et le couple  $(\vec{r}', t)$  et que le terme d'énergie potentiel  $V(\vec{r}', t)$  dépend de  $\vec{r}'$  et éventuellement de  $t$ , on ne procède qu'à une transformée de Fourier inverse partielle puisque n'affectant qu'une partie des variables intervenant dans l'équation « fréquentielle » (7). Pour aboutir à une équation analogue à (1), il faudrait appliquer une transformée de Fourier quantique inverse transformant le jeu de variables « fréquentielles »  $(\vec{p}', E, \vec{r}', t)$  en un jeu de variables « spatio-temporelles » duales, donc procéder aussi à la transformation du terme d'énergie potentielle.

Ceci étant, en utilisant les couples (signal, TFQI) précédents, l'application de la TFQI à l'équation (7) donne directement l'équation quantique :

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t), \quad (9)$$

qui correspond à l'équation de Schrödinger usuelle pour le cas d'une particule non relativiste de masse  $m$  soumise à un champ scalaire  $V(\vec{r}, t)$ .

L'équation quantique obtenue par ce principe, ici l'équation de Schrödinger (9), correspond alors à un problème d'équation aux dérivées partielles potentiellement plus simple à résoudre que celui associé à l'équation (7) ou à l'équation de conservation de l'énergie. En effet, le terme d'énergie cinétique faisant intervenir le carré de la quantité de mouvement  $\vec{p}$  est transformé en un opérateur quantique linéaire, un laplacien scalaire, et, l'équation quantique (7) ne dépend plus que du jeu de variables  $(\vec{r}, t)$ .

On peut ensuite introduire l'opérateur quantique hamiltonien  $\hat{H}$ , défini dans le cas du système mécanique considéré, par :

$$\hat{H}(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta.$$

Si on suppose, en plus, que la particule mécanique suit une trajectoire associée à une énergie mécanique totale  $E$  constante comme, par exemple, dans le cas d'un électron orbitant autour du noyau d'un atome, le terme d'énergie potentielle ne dépend plus que de  $\vec{r}$ . Dans ce cas, on peut simplifier la définition de la TFQI en ne considérant comme variables duales que la quantité de mouvement  $\vec{p}$  et la position quantique  $\vec{r}$  :

$$\text{TFQI} : \psi(\vec{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi(\vec{p}) \cdot \exp\left(\frac{j}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \frac{d^3 p}{h^3}.$$

Le problème étendu se réduit alors à l'équation :

$$E \cdot \Psi(\vec{p}) = H(\vec{p}, \vec{r}) \cdot \Psi(\vec{p}) = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right) \cdot \Psi(\vec{p}),$$

et l'équation quantique associée devient :

$$E \cdot \psi(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = \left[V(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right] \cdot \psi(\vec{r}),$$

qui correspond à l'équation de Schrödinger indépendante du temps associée au problème mécanique considéré.

On retrouve alors le principe usuel selon lequel, pour des phénomènes correspondant à une énergie mécanique totale constante, on peut chercher les niveaux d'énergie mécanique totale  $E$  possibles comme solutions de l'équation aux valeurs propres de l'opérateur quantique hamiltonien :

$$E \cdot \psi(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}).$$

Cette dérivation de l'équation de Schrödinger indépendante du temps est une alternative, très rapide, à la dérivation classique effectuée en supposant que la fonction d'onde est une fonction à variable séparable avec une dépendance temporelle en  $\exp(jEt/\hbar)$ . En considérant la première TFQI, faisant intervenir aussi  $E$  et ayant servi à dériver l'équation de Schrödinger dépendante du temps, il faudrait introduire la contrainte additionnelle associée à la constante de l'énergie, c'est-à-dire remplacer  $\Psi(\vec{p}, E)$  par  $\Psi(\vec{p}, E) \cdot 2\pi \cdot \delta(E - E_0)$  où  $E_0$  correspondrait à la valeur constante de l'énergie. En utilisant les propriétés de l'impulsion de Dirac, on supprimerait l'intégration sur l'énergie tout en faisant apparaître une dépendance en  $\exp(j\frac{E_0 t}{\hbar})$  dans l'expression de la fonction d'onde, puis, on retrouverait l'équation de Schrödinger indépendante du temps en éliminant ce terme temporel dans les deux membres de l'équation.

On constate que la description quantique par l'équation de Schrödinger indépendante du temps permet de trouver les valeurs constantes possibles pour l'énergie des états quantiques dits stationnaires. Mais, comme cela a déjà été noté, on ne peut pas, partant de l'équation quantique, revenir à la version indépendante du temps de l'équation (7) en utilisant la TFQ, à cause de la présence du terme associé à l'énergie potentielle, le terme  $V(\vec{r}') \cdot \psi(\vec{r}')$ . Ainsi, pour déterminer les trajectoires possibles pour la particule constituant le système mécanique étudié, il faudrait envisager de repartir plutôt du problème initial, c'est-à-dire de l'équation de conservation de l'énergie, et, utiliser les méthodes classiques, telles que, par exemple la résolution des équations de Euler-Lagrange ou des équations de Hamilton-Jacobi associées.

Il semble donc que la description quantique présente surtout un intérêt pour la détermination des valeurs de l'énergie  $E$  comme valeurs propres de l'opérateur hamiltonien  $\hat{H}(\vec{r}')$ . Cette méthode présente l'avantage de mettre en œuvre un problème purement spatial puisque le terme non linéaire associé à  $\vec{p}^2$  dans l'énergie cinétique est transformé en un laplacien scalaire appliqué à la fonction d'onde. Et, on peut proposer que le très bon accord entre les valeurs d'énergie mesurées expérimentalement et celles déterminées en utilisant les équations quantiques dans le cas des atomes peut constituer un élément de justification *a posteriori* de la construction artificielle de l'équation (7) et du choix de définition de la TFQI (8) associée.

Pour le système mécanique étudié, l'amplitude de probabilité ne fait intervenir qu'une seule quantité de mouvement, celle de la particule étudiée, ce qui conduit à une transformée de Fourier quantique à 4 dimensions, soit autant de dimensions que l'espace-temps. Mais, ce n'est qu'une coïncidence puisque, comme on le verra dans la suite, si le système comporte plus d'une particule, l'amplitude de probabilité sera fonction de l'énergie mécanique totale et de toutes les quantités de mouvement des particules constituant le système. Ainsi, si le système comporte  $N$  particules, la transformée de Fourier quantique comportera  $3N + 1$  dimensions.

Dans section suivante, on illustre comment appliquer ce principe de reformulation pour retrouver quelques unes des équations quantiques classiques relativistes ou non, avec ou sans prise en compte du champ électromagnétique : équations de Schrödinger, de Klein-Gordon ou de Dirac.

## 4 Déclinaison de la reformulation pour les cas quantiques usuels relativistes ou non relativistes

On se place dans le cadre de la proposition de reformulation exposée dans la section précédente. Pour chacun des cas quantiques classiques illustrés, on donne l'expression de l'hamiltonien classique  $H$ , celle de la TFQI pertinente et l'équation quantique dépendant du temps associée.

Et, pour chaque cas étudié, on suit le même processus de dérivation de l'équation quantique. A partir des quantités de mouvement (ou impulsions dans les cas relativistes) composant le terme d'énergie cinétique totale de l'hamiltonien classique, on définit d'abord la déclinaison pertinente de la TFQI. Puis, on construit l'équation du nouveau problème, correspondant à la version adaptée de l'équation (7), en multipliant chacun des termes de l'équation de conservation de l'énergie classique par l'amplitude de probabilité  $\Psi(\{\vec{p}_l\}, E)$  :

$$E \cdot \Psi(\{\vec{p}_l\}, E) = H(\{\vec{p}_l\}, \{\vec{r}_l\}, t) \cdot \Psi(\{\vec{p}_l\}, E),$$

où  $\{\vec{p}_l\}$  et  $\{\vec{r}_l\}$  désignent respectivement les quantités de mouvement (ou impulsions) et des positions duales pour les particules constituant le système. Enfin, on applique la TFQI à l'équation du nouveau problème, ce qui conduit à l'équation quantique recherchée.

Attention, afin de se placer dans le cadre des notations courantes en mécanique quantique, on utilise les notations  $\{\vec{r}_l\}$  et  $t$  pour les variables duales de  $\{\vec{p}_l\}$  et  $E$  pour définir la TFQI, mais, ces variables duales ne coïncident pas avec le temps  $t$  et les positions  $\{\vec{r}_l\}$  des particules du système étudié, point qui sera discuté en détails dans la prochaine section.

On peut maintenant passer en revue quelques-uns des cas non relativistes puis relativistes usuels en mécanique quantique.

### 4.1 Particule chargée non relativiste

On considère le cas d'une particule non relativiste de masse  $m$ , de charge  $q$ , de quantité de mouvement  $\vec{p}$  et de position  $\vec{r}$  soumise à un champ électromagnétique défini par le potentiel vecteur  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  et le potentiel scalaire  $\Phi(\vec{r}, t)$ .

L'hamiltonien classique pour ce système est donné par [1, 2, 3, 6, 7] :

$$H(\vec{p}, \vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + q\Phi(\vec{r}, t).$$

La TFQI pertinente est alors définie par :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^4} \Psi(\vec{p}, E) \cdot \exp\left(\frac{j}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right) \frac{d^3p \cdot dE}{h^4}.$$

Enfin, l'équation quantique associée, qui correspond à l'équation de Schrödinger usuelle, s'écrit :

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[ \frac{1}{2m} (j\hbar \vec{\nabla} + q\vec{A}(\vec{r}, t))^2 + q\Phi(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t),$$

où  $\vec{\nabla}$  correspond au gradient spatial calculé pour les coordonnées de la position quantique  $\vec{r}$ .

## 4.2 Atome polyélectronique libre

On s'intéresse au cas d'un atome comportant un noyau de charge  $Ze$ , de masse  $M$ , de position  $\vec{r}_0$  et de quantité de mouvement  $\vec{p}_0$ . Autour de ce noyau, on suppose que  $Z$  électrons gravitent et que ces électrons sont de masse  $m$ , de charge  $-e$ , de quantités de mouvement  $\vec{p}_i$  et de positions  $\vec{r}_i$ .

L'expression de l'hamiltonien classique est donnée par [2, 3, 5, 6, 7] :

$$H(\vec{p}_0, \{\vec{p}_i\}, \vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}) = \frac{\vec{p}_0^2}{2M} + \sum_{i=1}^Z \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{0i}} + \sum_{i=1}^Z \sum_{m>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{im}},$$

où  $r_{0i} = \|\vec{r}_0 - \vec{r}_i\|$  et  $r_{im} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_m\|$ .

La TFQI pertinente est définie par :

$$\psi(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) = \int_{\mathbb{R}^{3Z+4}} \Psi(\vec{p}_0, \{\vec{p}_i\}, E) \cdot \exp \left[ \frac{j}{\hbar} \left( \vec{p}_0 \cdot \vec{r}_0 + \sum_{i=1}^Z \vec{p}_i \cdot \vec{r}_i - Et \right) \right] \frac{d^3 p_0 \prod_{i=1}^Z d^3 p_i \cdot dE}{h^{3Z+4}}.$$

Si on pose  $V(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}) = -\sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{0i}} + \sum_{i=1}^Z \sum_{m>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{im}}$ , l'équation quantique correspondante, qui correspond à l'équation de Schrödinger usuelle attendue, s'écrit, après les substitutions nécessaires :

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_0 - \sum_{i=1}^Z \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}) \right] \psi(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t),$$

où  $\Delta_i$  correspond au laplacien scalaire calculé pour les coordonnées de la position quantique  $\vec{r}_i$ ,  $\Delta_0$  au laplacien scalaire pour la position quantique du noyau  $\vec{r}_0$ .

## 4.3 Atome polyélectronique dans un champ électromagnétique

On s'intéresse encore au cas d'un atome comportant un noyau de charge  $Ze$ , de masse  $M$ , de position  $\vec{r}_0$  et de quantité de mouvement  $\vec{p}_0$ . Autour de ce noyau, on suppose que  $Z$  électrons gravitent et que ces électrons sont de masse  $m$ , de charge  $-e$ , de quantités de mouvement  $\vec{p}_i$  et de positions  $\vec{r}_i$ .

Mais, maintenant, on suppose en plus que le système est soumis à un champ électromagnétique défini par le potentiel vecteur  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  et le potentiel scalaire  $\Phi(\vec{r}, t)$ . L'expression de l'hamiltonien classique est alors donnée par [2] :

$$H(\vec{p}_0, \{\vec{p}_i\}, \vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) = \frac{1}{2M} \left( \vec{p}_0 - e\vec{A}(\vec{r}_0, t) \right)^2 + \sum_{i=1}^Z \frac{1}{2m} \left( \vec{p}_i + e\vec{A}(\vec{r}_i, t) \right)^2 + V(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t)$$

où

$$V(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) = -\sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{0i}} + \sum_{i=1}^Z \sum_{m>i}^Z \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{im}} + e \cdot \Phi(\vec{r}_0, t) - \sum_{i=1}^Z e \cdot \Phi(\vec{r}_i, t)$$

La TFQI pertinente reste définie par :

$$\psi(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) = \int_{\mathbb{R}^{3Z+4}} \Psi(\vec{p}_0, \{\vec{p}_i\}, E) \cdot \exp \left[ \frac{j}{\hbar} (\vec{p}_0 \cdot \vec{r}_0 + \sum_{i=1}^Z \vec{p}_i \cdot \vec{r}_i - Et) \right] \frac{d^3 p_0 \prod_{i=1}^Z d^3 p_i \cdot dE}{h^{3Z+4}}.$$

L'équation quantique correspondante, qui correspond à l'équation de Schrödinger usuelle, s'écrit, après les substitutions nécessaires :

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) = \left[ \frac{1}{2M} \left( j\hbar \vec{\nabla}_0 + e\vec{A}(\vec{r}_0, t) \right)^2 + \sum_{i=1}^Z \frac{1}{2m} \left( -j\hbar \vec{\nabla}_i + e\vec{A}(\vec{r}_i, t) \right)^2 + V(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t) \right] \psi(\vec{r}_0, \{\vec{r}_i\}, t),$$

où  $\vec{\nabla}_0$  et  $\vec{\nabla}_i$  correspondent respectivement aux gradients spatiaux calculés pour les coordonnées des positions quantiques  $\vec{r}_0$  et  $\vec{r}_i$ .

#### 4.4 Particule relativiste libre et de spin nul

On s'intéresse au cas d'une particule relativiste libre, de spin nul, de masse propre  $m$ , non chargée, d'impulsion  $\vec{p}$  et de position  $\vec{r}$ . On note  $c_0$  la célérité de la lumière.

L'hamiltonien classique relativiste est défini par [1, 3, 7] :

$$H^2(\vec{p}) = m^2 c_0^4 + c_0^2 p^2 = E^2.$$

Pour ce cas, la TFQI pertinente est alors définie par :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^4} \Psi(\vec{p}, E) \cdot \exp \left( \frac{j}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \right) \frac{d^3 p \cdot dE}{h^4}.$$

L'équation quantique correspondante, qui correspond à l'équation de Klein-Gordon libre usuelle, s'écrit alors :

$$\hbar^2 c_0^2 \left( \Delta - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \psi(\vec{r}, t) = m^2 c_0^4 \psi(\vec{r}, t),$$

où le laplacien scalaire  $\Delta$  est calculé pour les coordonnées de la position quantique  $\vec{r}$ .

#### 4.5 Particule relativiste chargée et de spin nul

On considère le cas d'une particule relativiste, de spin nul, de masse propre  $m$ , de charge  $q$ , d'impulsion  $\vec{p}$  et de position  $\vec{r}$ . On note toujours  $c_0$  la célérité de la lumière.

Mais, maintenant, on suppose que le système est soumis à un champ électromagnétique défini par le potentiel vecteur  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  et le potentiel scalaire  $\Phi(\vec{r}, t)$ . L'hamiltonien classique relativiste est alors défini par [1, 3, 7] :

$$\left( H(\vec{p}, \vec{r}) - q \cdot \Phi(\vec{r}, t) \right)^2 = m^2 c_0^4 + c_0^2 \left( \vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 = \left( E - q \cdot \Phi(\vec{r}, t) \right)^2.$$

Dans ce cas, la TFQI pertinente reste définie par :

$$\psi(\vec{r}^\rightarrow, t) = \int_{\mathbb{R}^4} \Psi(\vec{p}^\rightarrow, E) \cdot \exp\left(\frac{j}{\hbar}(\vec{p}^\rightarrow \cdot \vec{r}^\rightarrow - Et)\right) \frac{d^3p \cdot dE}{h^4}.$$

L'équation quantique correspondante, qui correspond à l'équation de Klein-Gordon usuelle, s'écrit alors :

$$\left(j\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q \cdot \Phi\right)^2 \psi(\vec{r}^\rightarrow, t) - c_0^2 \left(j\hbar \vec{\nabla} + q\vec{A}\right)^2 \psi(\vec{r}^\rightarrow, t) = m^2 c_0^4 \cdot \psi(\vec{r}^\rightarrow, t)$$

où le gradient scalaire  $\vec{\nabla}$  est calculé à partir des dérivées partielles spatiales par rapport aux coordonnées de la position quantique  $\vec{r}^\rightarrow$ .

#### 4.6 Particule relativiste libre et de spin non nul

On s'intéresse au cas d'une particule relativiste, de spin non nul, de masse propre  $m$ , non chargée, d'impulsion  $\vec{p}^\rightarrow$  et de position  $\vec{r}^\rightarrow$ . On note toujours  $c_0$  la célérité de la lumière.

Dans ce cas, l'hamiltonien n'est plus un scalaire mais une matrice 4x4, que nous notons  $[H]_4$ . L'expression de  $[H]_4$ , proposée par Dirac [1, 3, 9, 10], s'écrit :

$$[H]_4 = c_0 \sum_{k=1}^3 [\alpha_k]_4 p_k + m c_0^2 [\beta]_4$$

avec les conventions suivantes :

- $p_k$  correspond à la k-ième coordonnée de  $\vec{p}^\rightarrow$  ;
- $[\alpha_k]_4 = \begin{pmatrix} [0]_2 & [\sigma_k]_2 \\ [\sigma_k]_2 & [0]_2 \end{pmatrix}$  ;
- $[\beta]_4 = \begin{pmatrix} [1]_2 & [0]_2 \\ [0]_2 & -[1]_2 \end{pmatrix}$  ;
- $[1]_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $[0]_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$  ;
- $[\sigma_1]_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $[\sigma_2]_2 = \begin{pmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{pmatrix}$  et  $[\sigma_3]_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ .

On considère alors la TFQI définie par :

$$\vec{\Psi}(\vec{r}^\rightarrow, t)_4 = \int_{\mathbb{R}^4} \vec{\Psi}(\vec{p}^\rightarrow, E)_4 \cdot \exp\left(\frac{j}{\hbar}(\vec{p}^\rightarrow \cdot \vec{r}^\rightarrow - Et)\right) \frac{d^3p \cdot dE}{h^4}.$$

L'équation quantique associée, qui correspond à l'équation de Dirac, s'écrit alors :

$$j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\Psi}(\vec{r}^\rightarrow, t)_4 = \left[ -j\hbar c_0 \sum_{k=1}^3 [\alpha_k]_4 \frac{\partial}{\partial x_k} + m c_0^2 [\beta]_4 \right] \vec{\Psi}(\vec{r}^\rightarrow, t)_4$$

où, les coordonnées  $x_k$  intervenant dans les dérivées partielles spatiales correspondent aux coordonnées de  $\vec{r}^\rightarrow$  et  $\vec{\Psi}(\vec{r}^\rightarrow, t)_4$  un vecteur constitué de 4 fonctions d'ondes scalaires :  $\psi_1(\vec{r}^\rightarrow, t)$ ,  $\psi_2(\vec{r}^\rightarrow, t)$ ,  $\psi_3(\vec{r}^\rightarrow, t)$ ,  $\psi_4(\vec{r}^\rightarrow, t)$ .

#### 4.7 Particule relativiste chargée et de spin non nul

On considère le cas d'une particule relativiste, de spin non nul, de masse propre  $m$ , de charge  $q$ , d'impulsion  $\vec{p}$  et de position  $\vec{r}$ . On note toujours  $c_0$  la célérité de la lumière.

Mais, on considère maintenant que le système est soumis à un champ électromagnétique défini par le potentiel vecteur  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  et le potentiel scalaire  $\Phi(\vec{r}, t)$ . L'hamiltonien associé à ce système est encore une matrice 4x4 et il s'écrit [1, 3, 9, 10] :

$$[H]_4 = c_0 \sum_{k=1}^3 [\alpha_k]_4 (p_k - qA_k) + mc_0^2 [\beta]_4 + q\Phi [1]_4,$$

avec les mêmes définitions pour les matrices  $[\alpha_k]_4$  et  $[\beta]_4$  que pour le cas précédent, et où  $[1]_4$  désigne la matrice unitaire 4x4.

La définition de la TFQI associée ne change pas non plus :

$$\vec{\Psi}(\vec{r}, t)_4 = \int_{\mathbb{R}^4} \vec{\Psi}(\vec{p}, E)_4 \cdot \exp\left(\frac{j}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right) \frac{d^3p \cdot dE}{h^4}.$$

En conservant les conventions introduites pour le cas précédent, l'équation quantique correspondante, qui correspond à l'équation de Dirac usuelle, s'écrit :

$$\left[ j\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q \cdot \Phi \right] \vec{\Psi}(\vec{r}, t)_4 = \left[ -c_0 \sum_{k=1}^3 [\alpha_k]_4 \left( j\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} + qA_k \right) + mc_0^2 [\beta]_4 \right] \vec{\Psi}(\vec{r}, t)_4$$

où  $\vec{\Psi}(\vec{r}, t)_4$  est encore un vecteur fonction d'onde à 4 coordonnées.

Dans la section suivante, on discute des résultats et des implications de ce principe de dérivation des équations quantiques si le principe de reformulation proposé s'avérait effectivement valide.

## 5 Discussion

Les principes de reformulation de la mécanique quantique proposés semblent permettre la dérivation de toutes les équations quantiques usuelles, relativistes ou non, en partant de l'extension de l'équation de conservation de l'énergie associée au problème mécanique considéré. Cela signifie qu'il n'est pas pertinent de postuler les différentes équations quantiques et que l'hypothèse selon laquelle la mécanique classique constituerait une limite de la mécanique quantique dans le cas des grands nombres devrait être revue. Dans le cadre de la reformulation proposée, la description quantique correspond en fait à une description duale d'une version étendue du problème classique initial, ce qui signifie qu'elle n'a qu'un lien potentiellement ténu avec le problème classique initial défini par l'équation de conservation de l'énergie.



Dans chacun des cas, on transforme l'équation de conservation de l'énergie en un problème étendu en multipliant chacun de ses membres par une amplitude de probabilité  $\Psi(\{\vec{p}_i\}, E)$ . Dans la suite, on appelle équation étendue l'équation associée au problème étendu. Cette amplitude de probabilité correspond à la probabilité que le point  $(\{\vec{p}_i\}, E)$  constitue une solution de l'équation étendue à l'instant  $t$  pour des positions  $\{\vec{r}_i\}$  choisies arbitrairement dans l'espace. Ces définitions de  $\Psi(\{\vec{p}_i\}, E)$  et du problème étendu dérivent directement de la recherche des analogues pour  $\Psi_{\vec{k}, \omega}(\vec{k}, \omega)$  et la description purement fréquentielle dans le cas du problème de référence de propagation d'ondes planes (scalaires non dissipatives) en champ libre. Ensuite, on construit la version de la transformée de Fourier quantique inverse (TFQI) adaptée faisant intervenir les variables quantiques duales  $(\{\vec{r}_i\}, t)$  associées aux variables  $(\{\vec{p}_i\}, E)$ . Enfin, par application de la TFQI à l'équation étendue, on aboutit à l'équation quantique associée au problème mécanique considéré.

Le choix des notations  $(\{\vec{r}_i\}, t)$  pour les variables quantiques duales est nécessaire pour retrouver les expressions usuelles des équations en mécanique quantique, mais, il convient de ne pas oublier qu'il s'agit de positions quantiques  $\{\vec{r}_i\}$  et d'un temps quantique  $t$  qui ne coïncident pas avec les positions dans l'espace-temps ordinaire des particules constituant le système mécanique étudié et le temps  $t$  physique réel. En effet, ces positions quantiques  $\{\vec{r}_i\}$  et ce temps quantique  $t$  correspondent aux variables duales associées aux quantités de mouvement (impulsions)  $\{\vec{p}_i\}$  et à l'énergie  $E$  pour construire la transformée de Fourier quantique inverse (TFQI), ce qui signifie que la description quantique obtenue ne se déploie pas dans l'espace-temps ordinaire mais dans un espace-temps virtuel quantique. Ainsi, dans la suite, on doit donc distinguer systématiquement l'espace-temps ordinaire associé au système mécanique considéré et l'espace-temps quantique associé à la description quantique. Dans chacun des cas, on suppose que l'expression du terme d'énergie potentielle reste inchangée même si la signification des  $\{\vec{r}_i\}$  et de  $t$  change quand on passe de l'espace-temps ordinaire à l'espace-temps quantique. Aussi, pour que cette dichotomie entre deux espaces-temps soit plus évidente, il semble plus pertinent d'utiliser des notations différentes de  $(\{\vec{r}_i\}, t)$  pour les variables duales quantiques, ce qui, dans la suite, nous conduit à adopter les notations  $(\{\vec{R}_i\}, T)$  pour que l'on sache, sans ambiguïté, si on se place dans l'espace-temps ordinaire (où on utilise  $(\{\vec{r}_i\}, t)$ ) ou dans l'espace-temps quantique virtuel (où on utilise  $(\{\vec{R}_i\}, T)$ ).

L'équation de conservation de l'énergie est valide pour les positions occupées par les particules constituant le système mécanique à l'instant  $t$  tandis que, dans le cas de l'équation étendue, on cherche les valeurs des quantités de mouvement  $\{\vec{p}_i\}$  et de l'énergie  $E$  satisfaisant cette équation à l'instant  $t$  dès lors que l'on choisit, de manière arbitraire, les  $\{\vec{r}_i\}$  comme positions pour les particules. En fait, avec le problème étendu, on teste l'éligibilité de chaque configuration, comportant autant de points que de particules, dans tout l'espace, à chaque instant. Et, comme on étudie au besoin séparément les configurations instant par instant, on n'étudie pas alors les corrélations entre les configurations trouvées pour deux instants successifs. Au final, on dispose donc de collections de configurations valides pour chaque instant parmi lesquelles il faudrait réaliser un tri pour déterminer les configurations qui semblent corrélées, pour deux instants successifs, et, ainsi, pourraient peut-être correspondre à une trajectoire possible. Ainsi, en fait, dès lors que l'on considère la description associée au problème étendu, on peut proposer que la notion de trajectoire ne fait plus sens. De plus, comme il faudrait disposer en plus des conditions initiales et, vraisemblablement, des conditions aux limites, même le problème associé à la seule équation de conservation de l'énergie ne permet pas la détermination des trajectoires des particules constituant le système mais plutôt d'un ensemble de trajectoires possibles.

Puisque la description quantique intervient dans l'espace-temps quantique, elle n'est alors pas en mesure de fournir des indications sur les trajectoires, positions, quantités de mouvement (ou impulsions) des particules dans l'espace-temps ordinaire. En effet, les variables duales  $\{\vec{R}_i\}$  et  $T$  correspondent à des positions et un temps quantiques associés aux quantités de mouvement (ou impulsions)  $\{\vec{p}_i\}$  et à l'énergie  $E$  du problème étendu, donc sans forcément de rapport avec les positions et l'énergie associées au problème initial. Et, comme la transformée de Fourier quantique inverse relie les points  $(\{\vec{p}_i\}, E)$  et  $(\{\vec{R}_i\}, T)$ , dès que les termes composant l'énergie potentielle du système dépendent des positions  $\{\vec{r}_i\}$  et éventuellement du temps  $t$ , on ne peut pas utiliser la transformée de Fourier quantique pour déterminer les solutions du problème étendu à partir de la connaissance de la fonction d'onde  $\psi(\{\vec{R}_i\}, T)$ . Cela tient au fait que la transformation de Fourier quantique ne concerne que l'énergie mécanique totale et les termes composant l'énergie cinétique totale, soit seulement une partie des variables intervenant dans l'équation de conservation de l'énergie. L'équation quantique obtenue correspond donc à une espèce d'équation de Helmholtz mais sans retour possible à l'équation étendue. Cela suggère qu'il pourrait être pertinent de chercher à étendre la description quantique en proposant une approche permettant de transformer (quantifier) tous les termes intervenant dans l'équation de conservation de l'énergie. Mais, si ce nouveau processus avait lui aussi comme point de départ un problème étendu associé à l'équation de conservation de l'énergie, la description quantique obtenue ne renseignerait pas sur les trajectoires des particules effectivement suivies mais sur des jeux de positions, d'énergie et de quantités de mouvement éventuellement possibles pour le système mécanique à un instant  $t$  donné. Il faudrait *a priori* trouver comment faire le tri entre tous ces jeux de positions pour trouver ceux potentiellement visités par le système mécanique lors de ses évolutions au cours du temps.

Ceci étant, la reformulation proposée permet de proposer des réponses à des questions ou problèmes posés par les formulations ou interprétations actuellement disponibles dans la littérature.

Tout d'abord, si l'amplitude de probabilité  $\Psi(\{\vec{p}_i\}, E)$  est à valeurs réelles, comme la fonction d'onde  $\psi(\{\vec{R}_i\}, T)$  est obtenue par application de la TFGI pertinente pour le système étudié, la fonction d'onde est alors à valeurs potentiellement complexes. En suivant l'idée proposée par Born [8], on peut donc probablement considérer que le carré du module de la fonction d'onde correspond à la densité de probabilité, qu'à l'instant  $T$ , le jeu de positions  $\{\vec{R}_i\}$  constitue une solution possible pour l'équation quantique dans l'espace-temps quantique. Mais, comme cela déjà été mis en évidence, la détermination complète de la fonction d'onde ne permet pas le retour au problème étendu par TFQ et encore moins au problème initial.

Par suite, comme la description quantique ne correspond pas au problème de recherche de la trajectoire des particules composant le système, il semble plus naturel de considérer que les particules ont, notamment, une trajectoire ainsi qu'une position, une vitesse, une quantité de mouvement bien définies à chaque instant dans l'espace-temps ordinaire. Et, l'utilisation des méthodes classiques (résolution des équations de Euler-Lagrange ou de Hamilton-Jacobi, par exemple) semble la procédure adaptée pour déterminer toutes ces quantités à chaque instant.

Pour autant, la description quantique se révèle intéressante pour déterminer les niveaux d'énergie  $E$  comme valeurs propres de l'opérateur hamiltonien quantique associé au système étudié lorsque l'on suppose des trajectoires pour les particules constituant le système pour lesquelles l'énergie  $E$  est constante. Comme les équations quantiques dérivées avec la reformulation proposée sont les mêmes que celles que l'on peut trouver dans la littérature, les résultats des calculs menés dans la littérature restent valides, et,

le bon accord trouvé entre les prédictions des énergies rayonnées par les atomes, notamment, semble une forme de justification *a posteriori* de la démarche aboutissant à la dérivation des équations quantiques. Et, ce bon accord avec les mesures constitue aussi une des raisons d'étudier les descriptions quantiques des systèmes mécaniques.

La description quantique peut conduire à trouver que plusieurs jeux de positions (quantiques)  $\{\vec{R}_i\}$  co-existent à chaque instant (quantique)  $T$ , mais, comme ces informations concernent l'espace-temps quantique, elles n'induisent pas que les particules pourraient occuper plusieurs positions à chaque instant dans l'espace-temps ordinaire. Ainsi, si on peut envisager un principe de superposition dans l'espace-temps quantique car les équations quantiques le permettent, ce n'est pas possible dans l'espace-temps ordinaire puisque le problème initial fait notamment intervenir des termes non linéaires associés aux carrés des quantités de mouvement (ou d'impulsion). Par suite, à chaque instant, chacune des particules constituant le système étudié occupe donc une et une seule position dans l'espace-temps ordinaire et il n'y a donc plus lieu de considérer des paradoxes du type de celui du chat de Schrödinger. Et, puisque les superpositions éventuelles ne concernent que la description quantique associée au problème étendu, la description par la fonction d'onde correspond à une description probabiliste sans rapport direct avec les évolutions au cours du temps des particules dans l'espace-temps ordinaire. En fait, il semble que l'on peut proposer que la seule donnée de l'équation de conservation de l'énergie du système définit complètement le problème quantique dans l'espace-temps quantique.

Il n'y a pas non plus de problème de mesure. En effet, comme la mesure de propriété d'une particule, voire de plusieurs propriétés de particules constituant le système étudié, a lieu dans l'espace-temps ordinaire, mais qu'elle ne change pas l'équation initiale de conservation de l'énergie, elle n'a aucune influence sur la description quantique probabiliste qui reste inchangée. Il n'y a donc pas lieu d'envisager des mécanismes de réduction instantanée du paquet d'ondes (ou de la fonction d'onde) associée à une destruction des superpositions synchronisée avec la mesure pour adopter finalement un état quantique unique. On peut donc proposer que, comme les propriétés effectives des particules ne relèvent pas de la description quantique, chacune de ces propriétés a une valeur parfaitement définie à chaque instant et que considérer des évolutions continues de ces propriétés pourrait constituer une première approche pertinente, du moins en-dehors, par exemple, des intervalles de temps pendant lesquels se produisent des phénomènes tels que l'absorption ou l'émission de photons pour les électrons.

Puisque, dans le cas d'une particule unique, la description  $\psi(\vec{p}, E)$  correspond à une amplitude de probabilité que le point  $(\vec{p}, E)$  corresponde à un point de fonctionnement possible pour le problème étendu, la description quantique par la fonction d'onde  $\psi(\vec{R}, T)$  est naturellement probabiliste. De plus, puisque le passage de la description par  $(\vec{p}, E)$ , dans l'espace-temps ordinaire, à la description par  $(\vec{R}, T)$ , dans l'espace-temps quantique, se fait par une transformée de Fourier, le principe d'incertitude propre à la construction de la transformée de Fourier peut être considéré. On peut donc retrouver les inégalités classiques d'Heisenberg, mais seulement si la fonction d'onde  $\psi(\vec{R}, T)$  est une fonction à variables séparables : séparable par rapport à  $T$  et par rapport à chacune des coordonnées si on veut pouvoir considérer à nouveau les quatre inégalités d'Heisenberg, dans le cas où le système ne comporte qu'une particule. Par contre, si le système comporte  $N$  particules susceptibles d'interagir, on peut envisager l'obtention de trois inégalités d'Heisenberg par particule dès lors que la fonction d'onde, supposée à variables séparables, peut s'écrire comme le produit de  $3N$  fonctions associées à chacune des trois coordonnées des  $N$  vecteurs positions quantiques multiplié par une dernière fonction du temps quantique  $T$ .

Si on considère un système ne comportant qu'une seule particule, les inégalités d'Heisenberg concernent les couples  $(\vec{p}, E)$  et  $(\vec{R}, T)$  associés respectivement au problème étendu et au problème quantique. Donc ces couples ne coïncident pas avec la quantité de mouvement, l'énergie mécanique totale et la position effectives de la particule à l'instant  $t$ , et, par suite, les inégalités de Heisenberg ne concernent pas les propriétés du système mécanique initial. On ne peut donc pas proposer, sur la base de ces inégalités, que la position  $\vec{r}$  et la quantité de mouvement  $\vec{p}$  ne puissent être définies ou connues simultanément avec une très grande précision. Au contraire, puisque c'est la description corpusculaire qui semble pertinente, on peut proposer que la position et la quantité de mouvement existent simultanément pour les particules constituant le système mécanique étudié. Et, le problème de la mesure simultanée de la position et de la quantité de mouvement d'une particule pourrait alors se réduire à la question de la perturbation des phénomènes par une mesure d'une des grandeurs intéressantes soit, en fait, à déterminer si une première mesure est de nature à interdire la mesure de l'autre grandeur avec une précision satisfaisante. La quatrième inégalité classique d'Heisenberg, concerne l'énergie mécanique totale  $E$  et le temps  $T$  mais, là encore, ce n'est pas le temps  $t$  du système mécanique considéré qui est concerné. On ne peut donc pas utiliser cette inégalité de Heisenberg pour justifier de l'existence de fluctuations du vide ou pour essayer de déterminer l'ordre de grandeur de ces fluctuations. En fait, à ce stade, on peut se demander si ces fluctuations sont effectivement d'origine quantique et s'il ne faudrait peut-être pas chercher une autre explication à l'existence de ces fluctuations.

Puisque les propriétés effectives des particules constituant le système (position, vitesse, quantité de mouvement, trajectoire, ...) relèvent de la description dans l'espace-temps ordinaire et non dans l'espace-temps quantique, ces propriétés ne font pas partie de la description quantique. On peut donc proposer que les propriétés physiques effectives des particules ne sont pas des variables cachées mais des variables externes et même potentiellement non pertinentes puisqu'associées à un autre problème. La description quantique pourrait donc être considérée comme complète, au besoin, pour le problème étendu même si l'impossibilité de revenir de la description quantique au problème étendu constitue un écueil conséquent qui semble nécessiter aussi une quantification (transformation) des termes d'énergie potentielle.

S'agissant de la question de la localité de la description quantique, on peut proposer que, dans le cadre de la reformulation proposée, cette description est non locale pour au moins deux raisons. D'abord, cette description quantique correspond au problème étendu ce qui implique qu'il pourrait peut-être exister plusieurs configurations  $(\{\vec{p}_i\}, E)$  possibles pour une configuration donnée de positions  $\{\vec{r}_i\}$  pour les particules à l'instant  $t$ . Ensuite et surtout, pour chaque configuration  $(\{\vec{p}_i\}, E)$  on a une valeur bien déterminée donc parfaitement « localisée » pour chaque quantité de mouvement  $\vec{p}_i$  et l'énergie  $E$ . Or, on bascule vers la description quantique en utilisant une transformée de Fourier quantique (inverse), et, par construction, une transformée de Fourier transforme un phénomène très localisé en un phénomène très délocalisé. On retrouve une illustration de ce principe avec le problème de référence de la propagation d'ondes en champ libre, puisqu'à chaque point  $(\vec{k}, \omega)$  valide, on associe un signal  $\exp(j(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t))$  complètement délocalisé : en fait, en exploitant la relation de dispersion, on vérifie que ce signal correspond à une onde monochromatique donc parfaitement délocalisée. On peut donc proposer qu'il existe une forme de dualité onde-corpuscule entre la description, plutôt ondulatoire, par la fonction d'onde et celle, plutôt corpusculaire, correspondant au problème étendu. Mais, au moins dans le cadre d'une première approche, la description des phénomènes associée au problème initial, constitué de l'équation de conservation de l'énergie supposée valide uniquement pour les trajectoires des particules, semble plutôt corpusculaire. La question de la pertinence de l'adoption d'une description non plus corpusculaire mais par des champs spatio-temporels, afin de trouver une reformulation de la théorie quantique des champs *a priori* nécessaire, pourrait conduire à rediscuter cette proposition.

La description quantique semble correspondre principalement à une reformulation mathématique permettant une détermination éventuellement moins difficile des énergies pour des trajectoires stationnaires possibles pour le système mécanique étudié. En effet, les termes quadratiques, donc non linéaires, associés à l'énergie cinétique de chacune des particules, présents dans l'équation de conservation de l'énergie, sont remplacés par des opérateurs quantiques linéaires dans l'équation quantique associée : des laplaciens scalaires quantiques appliqués à la fonction d'onde par rapport aux coordonnées, dans l'espace quantique, de chacun des vecteurs positions quantiques  $\vec{R}_i$ .

Dans le cas des atomes, on peut trouver les orbitales quantiques associées aux solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Mais, le tracé des modules des orbitales ne renseigne pas sur les lieux où on pourrait trouver les électrons puisque les orbitales correspondent à une description dans l'espace-temps quantique. Pour un même niveau d'énergie associé à un nombre quantique principal  $n \geq 2$  et un nombre quantique azimutal  $l \geq 1$ , on trouve des sous-couches énergétiques comportant  $2l + 1$  orbitales dont les tracés très différents sont reliés aux différentes valeurs du nombre quantique magnétique  $m_l$  (nombres entiers allant de  $-l$  à  $l$ ). Ces tracés d'orbitales différentes pour un même couple  $(n, l)$  dans l'espace-temps quantique pourraient constituer une illustration éclairante de l'existence, par analogie, de sous-groupes d'orbites dans l'espace-temps, ce qui pourrait correspondre à un intérêt supplémentaire de l'étude des descriptions quantiques et plus particulièrement des orbitales.

Puisque la description quantique se déploie dans un espace-temps quantique virtuel, dans l'espace-temps ordinaire, il semble naturel de considérer que les électrons évoluent sur des orbites précises autour du noyau dans l'atome et donc de proposer de reconsidérer le modèle planétaire proposé par Bohr : un noyau central où les neutrons et les protons sont fortement concentrés et des orbites sur lesquelles évoluent à très grande vitesse les électrons avec des orbites d'autant plus lointaines du noyau que les électrons ont un niveau d'énergie important. Par contre, la description quantique comme le problème initial ne sont pas en mesure de décrire ce qui se passe lors des sauts d'une orbite stationnaire à une autre quand l'électron gagne de l'énergie en absorbant un photon ou en perd en émettant un photon. Ainsi, la description classique basée sur le concept de particules ponctuelles, dotées de propriétés physiques, pourrait correspondre à une description pertinente pour étudier une partie des phénomènes à l'échelle atomique, au minimum les phénomènes stationnaires tels que les orbites.

## 6 Conclusion et perspectives

Si avec le principe de reformulation proposée il semble qu'on puisse dériver les équations quantiques, il reste encore un certain nombre de problèmes à étudier pour voir si cette reformulation permet de faire émerger une explication satisfaisante. On peut pointer le problème des fentes d'Young pour lequel une hypothèse ondulatoire semble séduisante puisqu'elle permet la description de phénomènes d'interférences. On peut aussi penser, notamment, au problème de l'effet tunnel qui est facilement traité en effectuant une résolution de l'équation de Schrödinger. Mais, comme ce genre de problème est, en fait, résolu dans l'espace-temps quantique, il semble au minimum intéressant de chercher une explication alternative dans l'espace-temps ordinaire. En effet, il faut systématiquement conserver à l'esprit le fait que les positions quantiques pour lesquelles la fonction d'onde présente des fortes amplitudes ne correspondent pas forcément *a priori* à des points de fonctionnement du système puisque la description quantique se déploie dans un espace-temps virtuel quantique qui ne coïncide pas avec l'espace-temps ordinaire. Les phénomènes d'intrication et les inégalités de Bell semblent aussi constituer une question à reprendre puisque les grandeurs physiques telles que la position, la vitesse ou la quantité de mouvement

(impulsion) sont des variables extérieures à la description quantique plutôt que des variables cachées, et, que la description quantique peut être considérée comme complète et non locale.

Si le principe de reformulation proposé se révélait effectivement pertinent, la question de son extension à l'électrodynamique quantique ou à la théorie quantique des champs, par exemple, pourrait alors être étudiée. Il faudrait notamment déterminer si ces extensions reposent elles aussi sur la construction préalable d'un problème étendu et si l'opération de quantification (toujours une transformée de Fourier quantique inverse ?) permet le retour de la description quantique à la description dans l'espace-temps ordinaire. Si la fabrication d'un problème étendu s'avérait encore nécessaire, ces extensions pourraient alors ne pas constituer une description pertinente des systèmes étudiés. De plus, comme on ne peut pas utiliser les inégalités d'Heisenberg pour décrire les fluctuations quantiques, la question de l'énergie minimale de systèmes tels que l'oscillateur harmonique quantique devrait être reconsidérée. Enfin, il faudrait réévaluer la pertinence de l'utilisation de ce genre de systèmes pour étendre la mécanique quantique, par exemple avec des opérateurs de création et d'annihilation de particules qui n'agiraient plus dans l'espace-temps virtuel quantique mais dans l'espace-temps ordinaire.

On peut noter qu'avec la reformulation proposée, la description quantique n'a au mieux qu'un très lointain rapport avec les phénomènes se produisant dans l'espace-temps ordinaire à l'échelle microscopique. En fait, puisque la description quantique n'opère pas à l'échelle microscopique dans l'espace-temps ordinaire, on peut envisager qu'il pourrait n'exister en pratique aucun conflit entre la théorie de la relativité générale et la mécanique quantique. Mais, comme la description par la mécanique quantique ne prend pas en compte des phénomènes tels que la disparition, la création, la fission ou la fusion de particules et qu'elle ne renseigne que sur des aspects très partiels des phénomènes mécaniques (valeurs des niveaux d'énergie dans les atomes, par exemple), il convient d'attendre de voir ce que pourrait donner la déclinaison et l'extension du principe de reformulation proposé, afin de prendre en compte ces phénomènes, avant de conclure qu'il n'est peut-être pas nécessaire de chercher à concilier la théorie de la relativité générale et les descriptions quantiques.

Au final, si la reformulation proposée dans cet article s'avérait valide, on constate qu'elle permettrait de proposer des éléments de réponses à une bonne partie des questions ou problèmes actuellement posés par la formulation actuelle de la mécanique quantique, ses nombreuses interprétations ou les formulations alternatives existantes. Cette reformulation semble même de nature à réduire fortement voire peut-être même à exclure tout besoin d'interprétation. Par contre, elle souligne peut-être encore davantage le besoin de chercher à construire une description quantique complète qui porte aussi sur les termes composant l'énergie potentielle totale du système et celui d'étudier la question de la pertinence de la recherche d'une équation quantique analogue à une équation d'onde si cela impose de commencer par réaliser une extension du problème classique initial : l'équation de conservation de l'énergie.

## 7 Remerciements

Je remercie Mohammed Eллиq et Gérard Pelé pour les échanges que nous avons pu avoir lors du travail d'élaboration des prémices de la reformulation de la mécanique quantique exposée dans cet article.

## Références

- [1] P. A. M. Dirac, *The principles of Quantum Mechanics*, Snowball Publishing, 2023.

- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics - Volume I*, Hermann, 1998.
- [3] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publications, New-York, 1999.
- [4] J.-L. Basdevant and J. Dalibard, *Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, 2005.
- [5] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson Education International, Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, 2005.
- [6] M. Le Bellac, *Quantum Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [7] R. W. Robinett, *Quantum Mechanics*, Oxford University Press, 2007.
- [8] M. Born, Sur la mécanique quantique des collisions, *Zeitschrift für Physik*, Vol. 37, p. 863-867, 1926.
- [9] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society of London A*, Vol. 117, p. 610-624, 1928.
- [10] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society of London A*, Vol. 118, p. 351-361, 1928.