

INTERPRETATION GEOMETRIQUE DES ETATS QUANTIQUES

Jean-Marie SOURIAU
Université de Provence
et
Centre de Physique Théorique, CNRS
Marseille
France

§1. ETATS STATISTIQUES CLASSIQUES

=====

L'ensemble des mouvements d'un système dynamique possède une structure de variété symplectique : ce fait est connu depuis la fin du XVIIIème siècle, même s'il a un peu été noyé par la scolastique.

En effet, dès 1788, J.L. Lagrange ("Mécanique Analytique") construisait les "crochets" et "parenthèses" qui portent son nom ; ses calculs -décrits dans le langage actuel- montrent que ce sont les composantes covariantes (resp. contravariantes) d'une 2-forme inversible σ dans des coordonnées locales quelconques de l'espace des mouvements (donc que σ est un invariant intégral absolu des équations du mouvement, au sens d'E. Cartan) ; Lagrange montrait de plus qu'il existe des coordonnées dans lesquelles ces composantes sont constantes (que la forme σ est plate). C'est cette structure (variété munie d'une 2-forme inversible et plate) que l'on appelle aujourd'hui "symplectique".

Un état statistique classique est simplement une loi de probabilité définie sur l'espace des mouvements U : il associe à tout ouvert Ω de U un nombre $p(\Omega)$ que l'on interprète comme la probabilité pour que le mouvement observé du système, dans l'état donné, appartienne à Ω . Cette interprétation exige de l'application p un certain nombre de propriétés classiques : p doit être une mesure positive de masse 1.

Les états statistiques considérés par Boltzmann correspondent au cas où p est complètement continue ; alors p se caractérise par une fonction ρ définie sur U ("fonction de distribution") ; si on rapporte ρ à l'espace des conditions initiales à l'instant t ("espace de phases"), ρ vérifie nécessairement une équation d'évolution, qui n'est autre que l'équation de Liouville ; dans le cas de la théorie cinétique des gaz, cette équation fournit, par un processus bien connu d'approxima-

tions, l'équation de Boltzmann.

Les mathématiciens se partagent sur la manière d'exposer la théorie de la mesure ; au lieu de considérer la fonction p (définie sur certaines parties de U), on peut considérer la fonctionnelle linéaire m (définie sur certaines fonctions de U) telle que

$$m(f) = p(\Omega)$$

si f est la fonction caractéristique de Ω .

m jouit alors des propriétés suivantes :

$$(1.1) \quad \left[\begin{array}{l} m \text{ est linéaire sur l'espace vectoriel } \mathcal{B}(U) \text{ des fonctions continues} \\ \text{bornées sur } U. \\ m(f) \geq 0 \text{ si } f \text{ est une fonction positive } (f(x) \geq 0, \forall x \in U) \\ m(1) = 1 \text{ si } 1 \text{ est la fonction unité } (1(x) = 1, \forall x \in U) \end{array} \right.$$

que l'on peut prendre comme axiomatique des lois de probabilités de U -donc ici des états statistiques. L'ensemble $\text{Prob}(U)$ des lois de probabilité de U ainsi défini est convexe (vérification élémentaire). On peut montrer (si U est séparée) que les points extrémaux de ce convexe (les éléments de $\text{Prob}(U)$ qui n'appartiennent à aucun segment de droit inclus dans $\text{Prob}(U)$) sont les "fonctions" de Dirac

$\delta(a)$ associées aux points $a \in U$

$$(1.2) \quad \delta(a)(f) = f(a) \quad \forall f \in \mathcal{B}(U)$$

Dans un tel état, la probabilité pour que le mouvement soit a vaut 1 : on peut donc identifier les mouvements (ou "états classiques") avec les états statistiques extrémaux.

- On appelle variable dynamique toute fonction réelle

$$(1.3) \quad g : (x \mapsto u)$$

continue sur U .

A tout état statistique m , et à toute variable dynamique, on peut associer une loi de probabilité μ de $\mathbb{R}$:

$$(1.4) \quad \mu(f) = m(f \circ g) \quad \forall f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$

μ s'interprète comme la loi de probabilité de la variable u dans l'état m

(ou plus brièvement, comme spectre de u) ; on notera que l'état statistique est caractérisé par l'ensemble des spectres des diverses variables dynamiques (si $f \in \mathcal{B}(U)$, $m(f)$ est la valeur moyenne de la variable dynamique $f(x)$ dans l'état m).

Définitions :

(1.5) [Soit K un ensemble convexe. Nous noterons $\text{Conv}(K)$ l'ensemble des bijections f de K dans K qui vérifient

$$f(sx + [1-s] y) = s f(x) + [1-s] f(y), \quad \forall s \in [0,1], \forall x, y \in K$$

$\text{Conv}(K)$ est un groupe.
Si G est un groupe, nous appellerons action convexe de G sur K tout morphisme de G dans $\text{Conv}(K)$.

Théorème (élémentaire) :

(1.6) [Soit $\text{Homeo}(U)$ le groupe des homéomorphismes de U (bijections bicontinues). Si $a \in \text{Homeo}(U)$, $m \in \text{Prob}(U)$, $f \in \mathcal{B}(U)$, nous poserons

$$\underline{a}(m)(f) = m(f \circ a).$$

Alors $a \mapsto \underline{a}$ est une action convexe effective de $\text{Homeo}(U)$ sur $\text{Prob}(U)$.

Bien entendu, on obtient par ce moyen une action convexe sur $\text{Prob}(U)$ de tout sous-groupe de $\text{Homeo}(U)$; notamment du groupe $\text{Diff}(U)$ des difféomorphismes de U , et du groupe $\text{Symp}(U)$ des symplectomorphismes de U (difféomorphismes respectant la forme de Lagrange σ).

La propriété des états statistiques classiques de fournir une action convexe de $\text{Symp}(U)$ se retrouvera au niveau des états quantiques (§ 5 ci-dessous).

§2. FONCTIONS DE TYPE POSITIF

La plupart des résultats figurant dans ce paragraphe sont bien connus, donc énoncés avec peu d'explications.

Définition :

$$(2.1) \left[\begin{array}{l} \text{Soit } G \text{ un groupe ; } F \text{ une application de } G \text{ dans } \mathbb{C}. \\ \text{On dit que } F \text{ est de type positif (synonyme : } F \gg 0, F \in \mathcal{P}(G)) \text{ si:} \\ \text{Pour tout entier } n, \text{ pour toute application} \\ j \mapsto (z_j, a_j) \\ \text{de } \{1, 2, \dots, n\} \text{ dans } \mathbb{C} \times G, \text{ on a} \\ \sum_{j,k} \bar{z}_j z_k F(a_j^{-1} x a_k) \geq 0 \quad (x : \text{loi du groupe } G). \end{array} \right.$$

Il est clair que la matrice dont les éléments sont les nombres $F(a_j^{-1} x a_k)$ est une matrice positive ; elle possède donc la symétrie hermitienne, et son déterminant est positif. En choisissant $n = 2$, on en tire :

$$(2.2) \left[\begin{array}{l} \text{Si } F \gg 0 \\ F(e) \geq 0 \quad (e = \text{élément neutre de } G) \\ F(a^{-1}) = \overline{F(a)} \quad \forall a \in G \\ |F(a)| \leq F(e) \quad \forall a \in G. \end{array} \right.$$

Les fonctions de type positif sont donc bornées, et atteignent leur norme maximum au point e .

(2.3) Appelons $\mathcal{P}_0(G)$ l'ensemble des fonctions $F \gg 0$ sur G qui vérifient

$$F(e) = 1.$$

(fonctions normées). On note que :

(2.4) [Toute fonction $\gg 0$ est le produit d'une fonction normée par un nombre ≥ 0 .

(2.5) [$\mathcal{P}(G)$ (resp. $\mathcal{P}_0(G)$) est convexe.

$$(2.6) \left[\begin{array}{l} \text{Si } b \text{ est un } \underline{\text{automorphisme}} \text{ de } G, \text{ et si on pose} \\ \\ b(F)(a) = F(b(a)) \quad \forall F \in \mathcal{T}(G), \forall a \in G \\ \\ b \mapsto \underline{b} \text{ est une } \underline{\text{action convexe}} \text{ du groupe des automorphismes sur } \mathcal{T}(G) \\ \text{(resp. sur } \mathcal{T}_0(G)). \end{array} \right.$$

Soit $F \in \mathcal{T}_0(G)$; en choisissant, dans la définition (2.1) $n = 3$, en prenant les (z_j, a_j) égaux à $(F(b)-F(a), e), (1, a), (-1, b)$, il vient :

$$|F(b)-F(a)|^2 \leq 2 - 2 \operatorname{Re}(F(a^{-1} \times b))$$

d'où résulte

$$(2.7) \quad |F(a) - F(b)| \leq \sqrt{2} |F(e) - F(a^{-1} \times b)| ;$$

Ceci montre, si G est un groupe topologique, que toute fonction $F \gg 0$, qui est continue au point e est uniformément continue sur G ; ces fonctions forment encore un convexe, qui sera noté $\mathcal{T}'(G)$ ($\mathcal{T}'_0(G)$ pour celles qui sont normées).

En choisissant toujours $n = 3$, et en développant le déterminant de la matrice d'éléments $F \underline{a}_j^{-1} \times a_k$, on constate que :

$$(2.8) \left[\begin{array}{l} \text{Si } F \in \mathcal{T}_0(G), \quad a, b \in G \\ \\ |F(axb) - F(a)F(b)| \leq \sqrt{1-|F(a)|^2} \sqrt{1-|F(b)|^2}. \end{array} \right.$$

(2.9) Il en résulte que l'image réciproque H de $\mathbb{T}$ (groupe multiplicatif des nombres complexes de module 1) par F est un sous-groupe de G , et que

$$F(axb) = F(a) \times F(b) \quad \forall a \in G, \forall b \in H$$

en particulier F induit un caractère sur H (un morphisme de H dans $\mathbb{T}$).

Théorème :

(2.10) [Si $F \gg 0$, sa conjuguée $\overline{F}$ ($a \mapsto \overline{F(a)}$) est $\gg 0$.

(2.11) [Si F, F' sont $\gg 0$, le produit $F F'$ ($a \mapsto F(a) F'(a)$) est $\gg 0$.

(2.10) est trivial ; (2.11) se montre facilement à l'aide de deux lemmes : si M

une matrice positive, Z quelconque, $Z^* M Z$ est positive ; si M et M' sont positives, $\text{Tr}(MM') \geq 0$.

Théorème (Bochner) :

$$(2.12) \quad \left[\begin{array}{l} \text{Soit } E \text{ un espace vectoriel de dimension finie ; } E^* \text{ son dual.} \\ \text{Si } m \in \text{Prob}(E) \text{ (notation (1.1)), si } p \in E^*, \text{ on pose} \\ \mathcal{F}(m)(p) = m(q \mapsto e^{ipq}) ; \\ \\ \text{abs } \mathcal{F} \text{ est une bijection de } \text{Prob}(E) \text{ sur l'ensemble } \mathcal{P}_0'(E^*) \text{ [fonctions} \\ \gg 0 \text{ normées continues du groupe additif } E^* \text{].} \end{array} \right.$$

$\mathcal{F}(m)$ est la transformée de Fourier de la loi de probabilité m ; on l'appelle aussi fonction caractéristique.

- Soit m une loi de probabilité sur une variété U ; considérons la fonctionnelle non linéaire F :

$$(2.13) \quad F(f) = m(x \mapsto e^{if(x)}) \quad \forall f \in \mathcal{C}(U)$$

$\mathcal{C}(U)$ désignant l'ensemble de toutes les fonctions réelles continues sur U .

Il est immédiat que :

$$(2.14) \quad \left[\begin{array}{l} \text{a) } F(k) = e^{ik} \text{ si } k \text{ est une fonction constante (} k(x) = k \text{ } \forall x \in U \text{) ;} \\ \text{b) } F \text{ est une fonction de type positif sur le groupe additif } \mathcal{C}(U) ; \\ \text{c) } F \text{ est continue, en ce sens que l'application} \\ \quad y \mapsto F(f_y) \\ \text{est continue si } y \mapsto f_y \text{ est une application d'une variété auxiliaire} \\ \text{ } V \text{ dans } \mathcal{C}(U) \text{, et si } f_y(x) \text{ est fonction continue du couple } (y,x). \end{array} \right.$$

En particulier, si $t \in \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}(U)$, la fonction continue

$$(2.15) \quad t \mapsto F(tf)$$

est la fonction caractéristique de la loi de probabilité μ de la variable dynamique $f(x)$ (Cf. (1.4)), et définit donc complètement celle-ci (th. de Bochner) ; ainsi F définit le spectre de toutes les variables dynamiques, donc la mesure m elle-même (§1). C'est pourquoi nous appellerons F fonctionnelle caractéristique

de la loi de probabilité m .

Théorème (Gelfand-Naimark-Segal) :

$$(2.16) \left[\begin{array}{l} \text{Soit } G \text{ un groupe ; } F \text{ une application de } G \text{ dans } \mathbb{C} ; \text{ Alors :} \\ \\ \text{a) } \left[\begin{array}{c} F \gg 0 \\ \updownarrow \\ \text{Il existe un espace préhilbertien (resp. hilbertien) } H, \text{ une repré-} \\ \text{sentation unitaire } a \mapsto \underline{a} \text{ de } G \text{ dans } H, \text{ un vecteur } \psi \in H, \\ \text{tels que} \\ \\ F(a) = \langle \psi, \underline{a}(\psi) \rangle \quad \forall a \in G. \end{array} \right] \end{array} \right]$$

L'implication $\uparrow$ est triviale ; dans le sens $\downarrow$, on considère l'espace H' des fonctions f de G nulles en dehors d'un fini, muni de la semi-norme $\|f\| = \sqrt{\sum_{a,b} \overline{f(a)} f(b) F(a^{-1}xb)}$; G agit unitairement sur H' ; H est le quotient

de H' par l'ensemble des éléments de semi-norme nulle (resp. son complété) ; ψ la classe de la fonction $a \mapsto \delta(a, e)$.

Le théorème reste vrai si on ajoute à (2.16b) la condition

$$(2.16') \left[\begin{array}{l} \text{L'espace vectoriel engendré par les } \underline{a}(\psi) \text{ (lorsque } a \text{ parcourt } G) \text{ est} \\ \text{dense dans } H ; \end{array} \right]$$

Cette condition a l'avantage de fixer les éléments H , $a \mapsto \underline{a}$ de la représentation à une équivalence unitaire près.

(2.17) Si U est une variété séparée, on sait construire un espace préhilbertien sur lequel $\text{Diff}(U)$ agit unitairement et effectivement (à savoir l'ensemble des semi-densités C^∞ à support compact) ; (2.16 $\uparrow$) permet d'en déduire une famille séparante de fonctions de type positif sur $\text{Diff}(U)$. Pour toute action C^∞ d'un groupe de Lie G sur U , on obtient une famille de fonctions à la fois $\gg 0$ et C^∞ sur G .

Théorème :

$$(2.18) \left[\begin{array}{l} \text{Soit } F \text{ une fonction de type positif normée sur un groupe de Lie } G ; \text{ sup-} \\ \text{posons } F \text{ de classe } C^2 ; \text{ soit } \mathfrak{G} \text{ l'algèbre de Lie de } G . \text{ Alors} \\ \\ \text{a) } F(\exp(Z)) = 1 + i M(Z) - \frac{1}{2} [M(Z)^2 + V(Z, Z)] + o(\|Z\|^2) \quad [Z \in \mathfrak{G}] \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{l}
 \text{M étant une forme linéaire réelle sur } \mathfrak{g}, \text{ V une forme bilinéaire symé-} \\
 \text{trique réelle ; on a de plus :} \\
 \text{b) } \quad \quad \quad V(Z, Z) \geq 0 \quad \quad \quad \forall Z \in \mathfrak{g} \\
 \text{c) } \quad \quad V(Z, Z) V(Z', Z') - V(Z, Z')^2 \geq \frac{1}{4} M([Z, Z'])^2 \quad \quad \forall Z, Z' \in \mathfrak{g}, \\
 \quad \quad [Z, Z'] \text{ étant le crochet de Lie dans } \mathfrak{g} .
 \end{array} \right.$$

Ce résultat se vérifie à l'aide de (2.2), (2.8) et de la formule de Campbell-Hausdorff.

§3. QUANTOMORPHISMES

=====

Soit Y une variété connexe séparée de dimension impaire $2n+1$ (figure 1). On appelle structure de contact la structure définie sur Y par la donnée d'une 1-forme C^∞ ϖ dont le feuilletage caractéristique se réduit à 0. On en déduit que la dérivée extérieure σ de ϖ a partout le rang $2n$; le feuilletage caractéristique de σ est donc composé de courbes.

Si ces courbes sont compactes (ce sont alors des courbes fermées), le calcul des variations montre que la circulation de ϖ sur chacune d'elles est constante; nous dirons que Y est une variété quantique si cette constante est celle de Planck (notée $2\pi\hbar$).

Il existe alors sur Y un champ de vecteurs $\xi \mapsto I(\xi)$, défini par

$$(3.2) \quad \begin{cases} I(\xi) \in \ker(\sigma) \\ \varpi(I(\xi)) = \hbar \end{cases}$$

Désignons par

$$\exp(tI)(\xi_0)$$

la solution de l'équation différentielle

$$\frac{d\xi}{dt} = I(\xi)$$

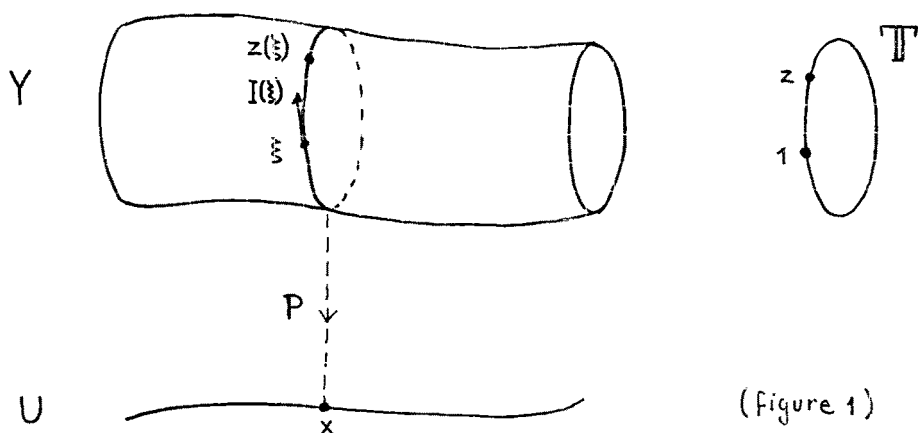
qui prend la valeur ξ_0 pour $t = 0$; cette solution est une fonction périodique de période 2π ; par suite l'application

$$(3.3) \quad e^{it} \mapsto \exp(itI)$$

définit une action différentiable libre du tore $\mathbb{T}$ (notation (2.9)) sur Y . Il existe alors une variété symplectique U , et une submersion P de Y sur U , de sorte que :

$$(3.4) \quad \left[\begin{array}{l} \text{L'image réciproque de chaque point } x \text{ de } U \text{ est une orbite de } \mathbb{T}; \\ \text{L'image réciproque de la forme symplectique de } U \text{ est la dérivée extérieu-} \\ \text{re de } \varpi. \end{array} \right.$$

Si U se trouve être l'espace des mouvements d'un système dynamique (Cf. §1), nous dirons que Y est une pré-quantification du système.



(Figure 1)

- (3.5) Il semble que la possibilité de préquantifier la variété des mouvements d'un système dynamique doive être considérée comme une loi de la nature ; ainsi l'espace U des mouvements d'une particule à spin (de masse m positive ou nulle) s'identifie à une orbite du groupe de Lorentz-Poincaré dans sa représentation co-adjointe, munie de sa structure symplectique canonique (voir (III)) ; la théorie de l'homologie montre que U n'est préquantifiable que si le spin s de la particule est un multiple entier de $\hbar/2$; c'est bien ce qu'on constate expérimentalement (exemple : le spin d'un neutrino est $\hbar/2$, celui d'un photon $\hbar$).
- (3.6) Dans le cas où il existe plusieurs préquantifications essentiellement distinctes, l'une d'entre elles est significative physiquement (dans le cas d'un système de particules indiscernables, il existe deux préquantifications, correspondant respectivement aux cas des bosons et des fermions).
- (3.7) Nous appellerons quantomorphismes les difféomorphismes de Y qui respectent la forme ω ; tout quantomorphisme respecte aussi le champ de vecteurs I (3.2), et commute donc avec l'action du tore (3.3). Il en résulte qu'il

se projette sur U selon un symplectomorphisme ; ce qui définit un morphisme

$$(3.8) \quad \text{Quant}(Y) \longrightarrow \text{Symp}(U)$$

du groupe des quantomorphisms de Y dans le groupe des symplectomorphisms de U . Le noyau de ce morphisme est le tore $\mathbb{T}$ (agissant selon (3.3)) ; $\mathbb{T}$ est le centre de $\text{Quant}(Y)$.

Un groupe à un paramètre de quantomorphisms est une action C^∞ du groupe additif $\mathbb{R}$ sur Y , par quantomorphisms ; son générateur Z est un champ de vecteur C^∞ de Y qui vérifie

$$(3.9) \quad \exp(tZ) \in \text{Quant}(Y) \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

on dira que Z est un quantomorphisme infinitésimal de Y . On constate que le nombre

$$(3.10) \quad u = \frac{1}{\hbar} \varpi(Z(\xi))$$

est fonction différentiable de x seulement, et vérifie

$$(3.11) \quad \sigma(\delta\xi, Z(\xi)) = \hbar \delta u$$

pour toute dérivation δ définie sur Y . Dans le cas particulier du vecteur $Z = \mathbb{I}$, générateur du tore, on trouve $u = 1$ (3.2).

On notera que les formules (3.10) et (3.11) définissent réciproquement le champ de vecteur Z si l'on connaît la variable dynamique u (définition (1.3)), si bien que nous pourrions noter celui-ci

$$(3.12) \quad Z_u$$

Réciproquement, si on se donne une variable dynamique différentiable u , le vecteur Z_u défini par (3.10) et (3.11) est un quantomorphisme infinitésimal à la seule condition qu'il soit complet.

Le calcul montre que :

$$(3.13) \quad [Z_u, Z_{u'}] = \hbar Z_{[u, u']}$$

où $[Z_u, Z_{u'}]$ est le crochet de Lie des champs de vecteurs $Z_u, Z_{u'}$, $[u, u']$ le crochet de Poisson des variables dynamiques u et u' .

§4. ETATS QUANTIQUES

=====

Nous allons chercher une définition convenable des états quantiques en partant de l'idée suivante : ce sont des objets géométriques dont les états statistiques classiques (§1) constituent une "approximation" valable seulement si la constante de Planck $h = 6,6262 \times 10^{-27} \text{ g cm}^2 \text{ s}^{-1}$ peut être "négligée".

Si nous négligeons $\hbar$ dans la formule (3.13), on arrive à la conclusion (fausse) que l'application

$$(4.1) \quad u \mapsto \exp(Z_u)$$

est un isomorphisme du groupe additif des variables dynamiques avec le groupe des quantomorphismes (en fait, cette application n'est pas partout définie, elle n'a aucune raison d'être injective, ni surjective, et elle ne peut pas être un isomorphisme, puisque l'un des groupes est commutatif, et pas l'autre).

Si cependant on le croyait un instant, et si F était la fonctionnelle caractéristique (2.13, 2.14) d'un état statistique classique, F serait la composée avec ce morphisme d'une fonction Φ de type positif sur $\text{Quant}(Y)$:

$$(4.2) \quad ??? \quad F(u) = \Phi(\exp(Z_u)) \quad \forall u \in \mathcal{C}(U) ;$$

l'application

$$(4.3) \quad ??? \quad t \mapsto \Phi(\exp(tZ_u))$$

serait la transformée de Fourier de la loi de probabilité de u dans l'état correspondant (Cf. (2.15)) ;

La formule (2.14a) :

$$F(k) = e^{ik} \text{ si } k \text{ est une constante}$$

montre que l'on aurait :

$$??? \quad \Phi(\exp(Z_k)) = e^{ik} ;$$

comme il se trouve que $\exp(Z_k)$ est l'action, sur Y , de l'élément $z = e^{ik}$ du tore (Cf. le §3), cette formule s'écrirait

$$(4.4) \quad ??? \quad \Phi(z) = z \quad \forall z \in \mathbb{T}$$

Mais rien ne nous empêche d'utiliser ces résultats faux comme définition axio-

matique : nous appellerons "états quantiques" les fonctions $\phi : \text{Quant}(Y) \rightarrow \mathbb{C}$ vérifiant :

$$(4.5) \quad \left[\begin{array}{l} \text{a) } \phi(z) = z \quad \forall z \in \mathbb{T}' \\ \text{b) } \phi \text{ est } \gg 0 \\ \text{c) } \phi \text{ est continue, en ce sens que } \phi \circ H \text{ est continue chaque fois} \\ \text{que } H \text{ est une application différentiable d'une variété dans } \text{Quant}(Y) \\ \text{ }^{(1)}. \end{array} \right.$$

Bien entendu, ces objets ne pourront pas être associés à un état statistique par la formule (4.2), et devront donc être étudiés directement.

Par exemple, si u engendre un groupe à un paramètre de quantomorphismes par l'application

$$t \mapsto \exp(tZ_u)$$

on constate -grâce à la définition (4.5c) choisie pour la continuité de ϕ et au théorème de Bochner (2.12)- que l'application

$$t \mapsto \phi(\exp(tZ_u))$$

est la transformée de Fourier d'une loi de probabilité μ de la droite réelle :

$$(4.6) \quad \phi(\exp(tZ_u)) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ist} d\mu(s) ;$$

par analogie avec (4.3), nous interpréterons μ comme résultat (aléatoire) de la mesure de u dans l'état quantique ϕ (nous dirons simplement spectre de u).

Il ne reste plus qu'à tester les conséquences de l'axiomatique (4.5) et de la règle d'interprétation (4.6).

(4.7) Notons d'abord que l'ensemble des états quantiques n'est pas vide : la méthode des semi-densités permet de vérifier que l'ensemble des fonctions vérifiant (4.5) est séparant sur le groupe $\text{Quant}(Y)$: si $a, b \in \text{Quant}(Y)$ et si $a \neq b$, il existe un état quantique ϕ tel que $\phi(a) \neq \phi(b)$.

⁽¹⁾ Une application H d'une variété V dans le groupe des difféomorphismes d'une variété V' sera dite différentiable si $(x, x') \mapsto H(x)(x')$ est une application C^∞ de $V \times V'$ dans V' . En raison des axiomes a) et b), ϕ vérifie l'inégalité (2.7) ; il suffit donc, pour qu'elle soit continue, qu'elle le soit en l'élément neutre.

- (4.8) Si k est une variable dynamique constante, le spectre de k dans n'importe quel état quantique Φ est concentré au point k : il résulte en effet de (4.5a) que

$$\Phi(\exp(tZ_k)) = e^{itk}$$

et il est clair que $t \mapsto e^{itk}$ est la transformée de Fourier de la mesure de Dirac $\mu = \delta(k)$. Par linéarité, on en déduit que le spectre de $u+k$ est translaté par k du spectre de u (dans n'importe quel état).

- (4.9) Par contre, si une variable dynamique u prend ses valeurs dans un ensemble fermé $E \subset \mathbb{R}$ non réduit à un point, il peut arriver que le spectre de u ne soit pas supporté par E (un contre-exemple est facile à construire à l'aide d'une semi-densité) ; cet effet tunnel montre bien la différence entre un état quantique et un état statistique.

Soient p et q deux variables dont le crochet de Poisson vaut 1 ; la formule (3.13) montre que le crochet de Lie $[Z_p, Z_q]$ vaut $\hbar I$; si λ, μ, ν sont des nombres réels, la formule (2.18a) donne, s'il existe, le développement limité au second ordre de $F(\exp Z_{\lambda p + \mu q + \nu})$; on constate que $M(Z_p)$ et $M(Z_q)$ sont respectivement les valeurs moyennes de p et q , $V(Z_p, Z_p)$ et $V(Z_q, Z_q)$ les variances de ces mêmes variables (carrés de leurs écarts quadratiques moyens $\Delta p, \Delta q$). La formule (2.18c) donne alors

$$(4.10) \quad \Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$$

c'est la relation d'incertitude de Heisenberg, sous sa forme la plus précise (voir par exemple (II)).

Considérons plus généralement un groupe "quantodynamique", c'est-à-dire un sous-groupe G de $\text{Quant}(Y)$ qui possède une structure de groupe de Lie telle que le plongement de G dans $\text{Quant}(Y)$ soit différentiable ⁽¹⁾. Tout état quantique Φ induit sur G une fonction de type positif Φ_G qui est continue. Elle est associée, par le théorème de Gelfand-Naimark-Segal (2.16, 2.16'), à une représentation unitaire de G sur un certain hilbertien :

$$(4.11) \quad a \mapsto \underline{a} ;$$

⁽¹⁾ Au sens défini en (4.5) . Il revient au même de dire que G est un groupe de Lie qui agit effectivement et différentiablement sur Y par quantomorphismes.

on vérifie facilement que la continuité de Φ_G entraîne la continuité de cette représentation (4.11).

Les résultats connus sur les représentations unitaires continues des groupes localement compacts permettent alors de faire des prédictions sur les spectres des variables dynamiques associées aux sous-groupes à un paramètre de G ("moments"). Dans de très nombreux exemples, elles sont bien vérifiées (action du groupe $O(4)$ dans le cas des mouvements képlériens ; action du groupe de Poincaré dans le cas d'une particule libre sans spin (ou de spin $n\hbar$, $n \in \mathbb{Z}$) ; du revêtement à deux feuillets du groupe de Poincaré dans le cas d'une particule de spin $\hbar/2$; etc). Les relations de commutation associées sont d'ailleurs l'un des outils fondamentaux de la mécanique quantique.

§5. LE PROBLEME DE L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

Il se trouve pourtant que ces prédictions tombent en défaut dans l'un des cas les plus simples : celui de l'oscillateur harmonique à une dimension.

Comme pour tout système conservatif, le groupe des translations temporelles est engendré par la variable dynamique $E/\hbar$, E désignant l'énergie ; en utilisant le fait que tous les mouvements sont périodiques de même période T , on établit que $\exp(T Z_{E/\hbar})$ est l'identité sur $\mathcal{Y}$; par conséquent le spectre μ de la variable $E/\hbar$ vérifie (Cf.(4.6)) :

$$(5.1) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{isT} d\mu(s) = 1$$

ce qui n'est possible (μ étant une mesure positive de masse 1) que si μ est supporté par l'ensemble des points où $e^{isT} = 1$; ce qui donne pour le spectre de l'énergie les valeurs discrètes

$$(5.2) \quad \frac{2n\pi\hbar}{T} = n h \nu \quad (n \in \mathbb{Z} ; \nu = \frac{1}{T}) ;$$

or les valeurs effectivement observées sont données par la formule

$$(5.3) \quad (n + \frac{1}{2}) \hbar \quad n \in \mathbb{N} .$$

On peut lever cette difficulté en admettant qu'une constante additive dans l'énergie est inobservable (les sauts quantiques ne permettent de mesurer que les différences de valeurs de l'énergie) ; mais cette formule empirique (5.3) fournit cependant une indication intéressante : elle conduit en effet à remplacer la formule (5.1) par la formule "opposée" :

$$(5.4) \quad ??? \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{isT} d\mu(s) = -1$$

ou encore (Cf.(4.6)) :

$$(5.5) \quad ??? \quad \Phi(\exp(T Z_{E/\hbar})) = -1 .$$

Ces formules suggèrent de modifier la définition des états quantiques en $\mathcal{Y}$ introduisant des notions homotopiques : l'application

$$(5.6) \quad t \mapsto \exp(t Z_{E/\hbar}) ,$$

lorsque t parcourt $[0, T]$, définit un lacet différentiable dans $\text{Quant}(Y)$; la relation (5.5) pourra prendre un sens si on définit Φ sur un revêtement convenable ; elle fournira une condition imposée à tous états.

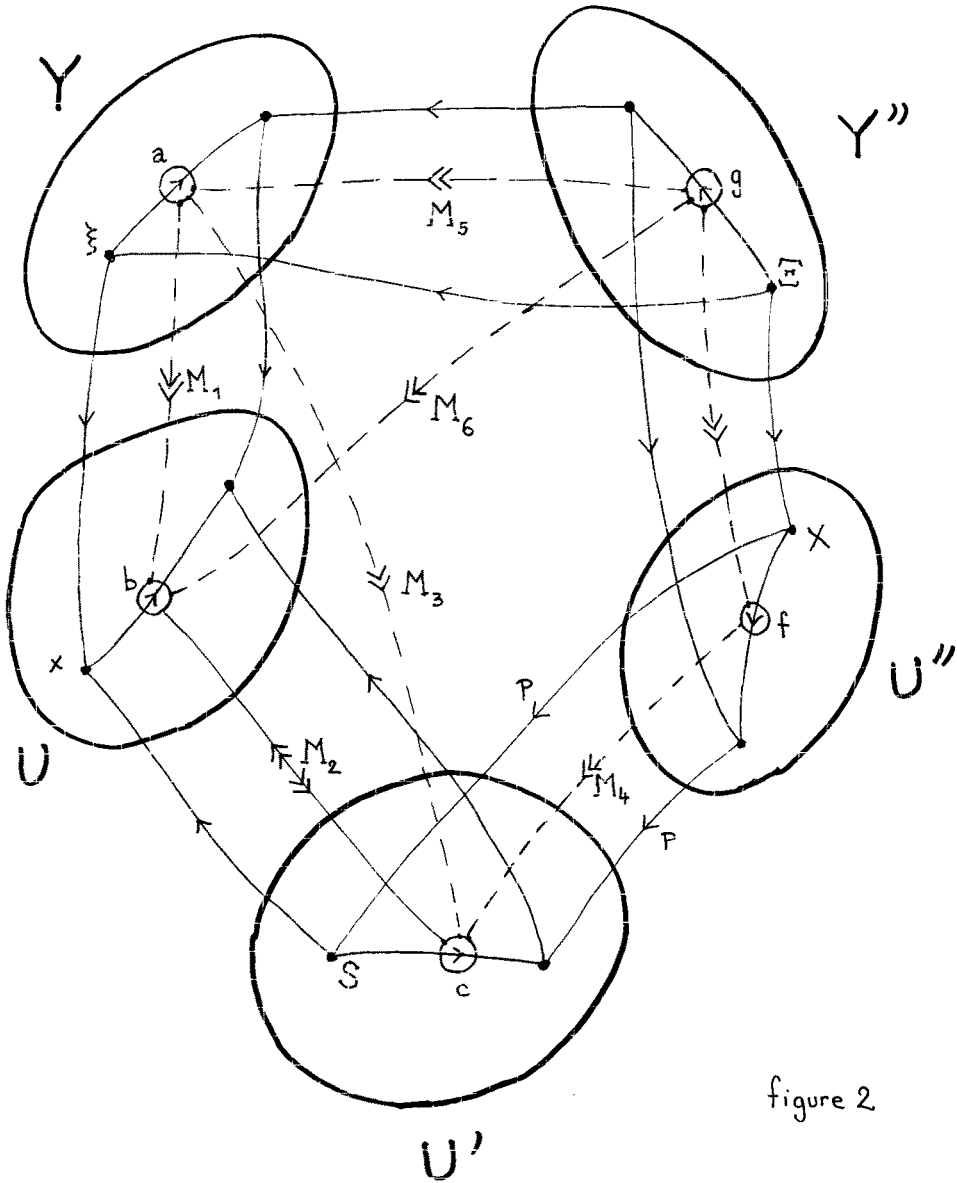


figure 2

Pour réaliser ce programme, effectuons quelques constructions.

1°) Nous avons remarqué (3.8) que la projection sur U (figure 2) d'un quantomorphisme a définit un symplectomorphisme b , et que

$$(5.7) \quad M_1 (a \mapsto b)$$

est un morphisme de groupe. Il est de plus différentiable, en ce sens que son composé avec une application différentiable dans $\text{Quant}(Y)$ (au sens (4.5)) est une application différentiable dans $\text{Symp}(U)$.

2°) Soit U' l'espace fibré des repères canoniques ⁽¹⁾ de U (figure 2). U' est un espace fibré principal de base U , dont le groupe structural est le groupe $\text{Sp}(n)$ des matrices symplectiques ⁽¹⁾ d'ordre n . On montre que $\text{Sp}(n)$ est connexe ; U' est donc connexe si Y l'est.

Tout symplectomorphisme b de U transforme un repère canonique au point x en un repère canonique au point $b(x)$; on peut donc relever b par un difféomorphisme c de U' ;

$$(5.8) \quad M_2 (b \mapsto c)$$

est un morphisme injectif différentiable de groupe ; par composition, on obtient donc un morphisme différentiable

$$(5.9) \quad M_3 (a \mapsto c) = M_2 \circ M_1$$

de $\text{Quant}(Y)$ dans $\text{Diff}(U')$.

3°) Soit U'' le revêtement universel de U' , P la projection de U'' sur U' . Les difféomorphismes f de U'' qui vérifient

⁽¹⁾ Un repère S au point x est dit canonique si la matrice des composantes du tenseur symplectique σ dans le repère S est égale à

$$J = \begin{pmatrix} & & & 1 & \dots & 1 \\ & & & & & \\ & & & & & \\ -1 & & & & & \\ & & & & & \\ & & & -1 & & \end{pmatrix} ;$$

une matrice M est symplectique si elle transforme un repère canonique en repère symplectique, c'est-à-dire si $M^{-1} = J M' J^{-1}$, M' étant la transposée de M .

$$(5.10) \quad P(X) = P(Y) \Rightarrow P(f(X)) = P(f(Y))$$

forment un groupe ; ils se projettent sur U' suivant un difféomorphisme c :

$$c \circ P = P \circ f ;$$

$$(5.11) \quad M_4(f \mapsto c)$$

est un morphisme différentiable et surjectif de ce groupe sur $\text{Diff}(U')$.

4°) Soit Y'' l'ensemble des couples $\Xi = (\xi, \chi)$ de $Y \times U''$ qui se projettent en un même point x de U (figure 2). $\xi \mapsto x$ et $\chi \mapsto x$ étant des submersions, Y'' est une variété.

Considérons l'ensemble G des couples (a, f) :

$$(5.12) \quad a \in \text{Quant}(Y), f \text{ vérifie (5.10), } M_3(a) = M_4(f).$$

A cause de l'injectivité de M_2 , G est un groupe de difféomorphismes de Y'' ;

$$(5.13) \quad M_5(a, f) \mapsto a$$

est un morphisme différentiable surjectif de G sur $\text{Quant}(Y)$, dont le noyau s'identifie à l'ensemble des $f \in \text{diff}(U'')$ vérifiant

$$(5.14) \quad P \circ f = P$$

c'est-à-dire au groupe fondamental d'homotopie de U' ;

$$(5.15) \quad M_6 = M_1 \circ M_5$$

est un morphisme différentiable de G dans $\text{Symp}(U)$, dont le noyau est l'ensemble des

$$(5.16) \quad \left\{ (z, k) / z \in \mathbb{T}, k \in \text{groupe d'homotopie de } U' \right\}.$$

Dans tous ces résultats, nous n'avons pas utilisé le fait qu'il s'agissait d'un oscillateur harmonique, mais seulement que Y était une variété connexe préquantifiant une variété symplectique U .

Dans le cas d'un oscillateur harmonique, quelle que soit d'ailleurs sa dimension,

la linéarité des équations du mouvement classique montre que U possède une structure d'espace vectoriel symplectique ; il en résulte que U' est un espace fibré au-dessus de U , et que le groupe d'homotopie de U' est isomorphe à celui des fibres, donc à celui du groupe $Sp(n)$, donc à $\mathbb{Z}$ (voir (IV)). Nous pourrions donc écrire le groupe (5.16) sous la forme

$$(5.17) \quad \left\{ (z, L^p) / z \in \mathbb{T}, p \in \mathbb{Z} \right\}$$

L désignant un générateur du groupe d'homotopie de U' ⁽¹⁾.

Nous pourrions choisir l'axiomatique suivante pour les états quantiques :

$$(5.18) \quad \left[\begin{array}{l} \text{a) } \Phi(z, L^p) = z \times [-1]^p ; \\ \text{b) } \Phi \text{ est une fonction de type positif sur le groupe } G ; \\ \text{c) } \Phi \text{ est continue }^{(2)} . \end{array} \right.$$

La compatibilité de ces axiomes peut s'établir en construisant des semi-densités sur Y'' , en utilisant le fait que le groupe (5.17) est dans le centre de G , et que la condition (5.18a) fait coïncider, sur ce groupe, Φ avec un caractère.

Soit G_0 l'ensemble des éléments de G dont l'image par M_6 est une transformation affine de U ; soit Φ_0 la fonction induite sur G_0 par un état Φ .

On vérifie que G_0 possède une structure de groupe de Lie ; évidemment les axiomes (5.18) induisent les conditions :

$$(5.19) \quad \left[\begin{array}{l} \text{a) } \Phi_0(z, L^p) = z \times [-1]^p ; \\ \text{b) } \Phi_0 \text{ est une fonction de type positif sur } G_0 ; \\ \text{c) } \Phi_0 \text{ est continue.} \end{array} \right.$$

Or il se trouve (voir (IV)) que l'ensemble des solutions Ψ à carré

⁽¹⁾ Dans le cas de l'oscillateur à 1 dimension, on peut joindre l'élément $(1, L)$ de G à l'élément neutre par un chemin différentiable tracé dans G , qui se projette sur $\text{Quant}(Y)$ par le lacet (5.6).

⁽²⁾ Définition analogue à (4.5) ; nous utilisons le fait que G est un groupe de difféomorphismes de Y'' .

sommable de l'équation de Schrödinger de l'oscillateur harmonique est un espace de représentation unitaire de G_0 , et que les fonctions Φ_0 associées à chacune d'elles par la construction de Gelfand-Naimark-Segal vérifient ces axiomes (5.19). D'où les problèmes suivants :

- Ces fonctions sont elles prolongeables au groupe G tout entier par des solutions Φ de (5.18) ? Peut-on déterminer un tel prolongement (par exemple en demandant que Φ soit un point extrême du convexe (5.19) ?
- Comment étendre cette définition des états à des systèmes dynamiques non linéaires ? Peut-on ainsi établir un lien avec les diverses équations d'onde ?

Principe de correspondance.

Soit $g \in G$; si Φ est un état quantique (5.18), posons

$$(5.20) \quad g(\Phi)(g') = \Phi(g \circ g' \circ f^{-1}) \quad \forall g' \in G ;$$

on définit ainsi une action convexe (1.5) de G sur les états (voir (2.6)).

Si $g \in \text{Ker}(M_6)$, il résulte de (5.17), (5.18a), (2.9) que $g(\Phi) = \Phi$; par conséquent la formule (5.20) définit une action convexe de $M_6(G) = \text{Symp}(U)$. Les états quantiques sont donc des objets de géométrie symplectique (au sens de Félix Klein), au même titre que les états statistiques (voir (1.6)) et que les états classiques ; ainsi se manifeste, au niveau de l'axiomatique (5.18), le principe de correspondance entre les mécaniques quantique et classique.

REFERENCES DU TEXTE

- (I) J.L. LAGRANGE,
"Mécanique Analytique".
Ré-édition A. Blanchard (1965).
- (II) L.I. SCHIFF,
"Quantum Mechanics".
Mac Graw Hill (1955).
- (III) J.M. SOURIAU,
"Structures des Systèmes Dynamiques".
Dunod (1969).
- (IV) J.M. SOURIAU,
"Construction Explicite de l'Indice de Maslov. Applications".
4th International Colloquium on Group Theoretical Methods in
Physics", Univ. of Nijmegen (1975).