

ACTA ACADEMIAE SCIENTIARUM TAURINENSIS

Colloque

**LA «MÉCANIQUE ANALYTIQUE»
DE LAGRANGE ET
SON HÉRITAGE**

I

Fondation Hugot du Collège de France

Paris, 27-29 Septembre 1988



Supplemento al numero 124 (1990) degli
Atti della Accademia delle Scienze di Torino
Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali

TORINO - 1990

Des principes géométriques pour la mécanique quantique

Jean-Marie SOURIAU

Avertissement. Comme l'on fait remarquer Landau et Lifchitz, les rapports entre la mécanique quantique et la mécanique classique sont d'un type très particulier: elles coexistent au lieu de se succéder.

Toute analyse de la structure quantique est nécessairement double; en particulier l'analyse géométrique.

On évitera toute ambiguïté en mettant dans la première partie, «classique», tout ce qui peut s'y mettre. En particulier l'étude des symétries; et aussi, on le verra, le rôle de la constante de Planck.

Alors deux structures géométriques définies «classiquement» (préquantification, groupe générateur) permettent de déterminer ce que sont les «états quantiques»: les solutions d'un certain système d'inégalités.

En ce sens donc, on réalise le programme de la quantification géométrique. Quelques exemples montrent qu'on retrouve bien ainsi les structures quantiques habituelles — dans tous leurs détails.

Mais le choix et l'existence même d'un groupe générateur possédant des états quantiques posent au physicien un problème nouveau pour chaque système concret; problème qui n'est résolu ici que dans quelques cas.

1. PRINCIPES GEOMETRIQUES DE LA MECANIQUE CLASSIQUE

1.1 Espace-temps galiléen

Referentiels d'inertie

«La Géométrie est donc fondée sur une pratique mécanique, et elle n'est autre chose qu'une branche de la Mécanique universelle qui traite et qui démontre l'art de mesurer.»

(Isaac Newton, Principia, traduction de la Marquise du Châtelet)

Pour situer un événement e dans l'espace et dans le temps, on utilise quatre coordonnées, constituant une «date» $t \in \mathbf{R}$ et une «position» $\vec{r} \in \mathbf{R}^3$; ce qui sous-entend l'usage d'un référentiel que nous noterons \mathcal{R} ; d'où l'écriture:

$$e = \mathcal{R}(t, \vec{r})$$

qui interprète le référentiel comme une bijection de l'espace numérique \mathbf{R}^4 avec l'espace-temps \mathcal{E} .

L'usage d'un tel référentiel exige un certain nombre d'opérations matérielles (chronométriques et métrologiques); préalablement, il faut avoir choisi:

- (1.1.1) un *instant origine* et une *unité de mesure pour le temps*;
 un *point origine* dans l'espace, animé d'un mouvement *non accéléré*;
 une *unité de longueur*, indépendante de la date;
 un *système d'axes cartésiens orthonormés*, de directions fixes.

On se place donc au niveau d'une physique où sont admises les notions suivantes: mesure des intervalles de temps; mouvement non accéléré d'un point; structure euclidienne de l'espace à *chaque instant*; directions spatiales fixes¹.

De tels référentiels s'appellent *référentiels d'inertie*; nous savons écrire les règles kantienne pour passer d'un référentiel d'inertie \mathcal{R} à un autre \mathcal{R}' :

$\mathcal{R}^{-1} \circ \mathcal{R}'$ est une application de \mathbf{R}^4 dans \mathbf{R}^4 qui s'exprime au moyen des objets suivants:

Une matrice A dans le groupe $SO(3)$;
 deux vecteurs de \mathbf{R}^3 , \vec{b} et \vec{c} ;
 un réel e ;
 deux réels positifs, λ , θ ²

par la substitution:

(1.1.2)

$$\begin{array}{l} t \rightarrow \theta t + e \\ \vec{r} \rightarrow \lambda A \vec{r} + \vec{b} t + \vec{c} \end{array}$$

¹ L'ensemble de ces notions «classiques» peut s'interpréter comme une approximation de la *relativité générale*, au voisinage d'une géodésique de genre temps (temps propre, transport parallèle) — en ignorant la relation que la relativité fournit entre les unités de longueur et de temps.

² Les rapports des unités de longueur et de temps.

que l'on peut écrire matriciellement:

$$(1.1.3) \quad \begin{pmatrix} \vec{r} \\ t \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \lambda A & \vec{b} & \vec{c} \\ 0 & \theta & e \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ t \\ 1 \end{pmatrix}$$

L'ensemble des référentiels d'inertie constitue évidemment un *atlas* de l'espace-temps, et lui confère donc une structure de *variété*.

(1.1.4)

L'ensemble Γ des substitutions numérique $\mathcal{R}^{-1} \circ \mathcal{R}'$ est donc un groupe de dimension 12; la notation matricielle montre qu'il possède un sous-groupe distingué fermé Γ_0 , de dimension 10, caractérisé par $\lambda = \theta = 1$.

Groupe de Galilée

Chisissons un référentiel d'inertie quelconque \mathcal{R} ; l'ensemble des applications:

$$(1.1.5) \quad g = \mathcal{R} \circ \gamma \circ \mathcal{R}^{-1} \quad (\gamma \in \Gamma_0)$$

est évidemment un *groupe de difféomorphismes* G de l'espace-temps \mathcal{E} . Parce que Γ_0 est distingué dans Γ , ce groupe G est indépendant du choix du référentiel d'inertie \mathcal{R} : il constitue le *groupe de Galilée*. C'est évidemment un groupe de Lie de dimension 10, isomorphe à Γ_0 .

Le *principe de relativité galiléenne* va mettre en jeu l'action du groupe de Galilée — selon des modalités dont nous verrons plus loin un exemple.

Groupe d'Aristote

Supposons qu'on adopte la physique d'Aristote où l'immobilité absolue a un sens (c'est le sort ultime de tout mouvement naturel); alors on peut recommencer l'analyse précédente en remplaçant les référentiels d'inertie par les référentiels «*sublunaires*» où le point origine est immobile. Ce qui implique de choisir $\vec{b} = 0$ dans les formules ci-dessus; on est ainsi conduit à la construction du *groupe d'Aristote*, dont la dimension vaut 7; c'est un sous-groupe *non distingué* du groupe de Galilée.

1.2 Espace d'évolution

Variété des conditions initiales

Considérons un *système dynamique classique* — pour fixer les idées un système de n points matériels en interaction.

Appelons *espace d'évolution* l'ensemble Y des «conditions initiales» possible du système: une condition initiale, c'est un multiplet y constitué par une date, les positions de tous les points matériels (à cette date) et leurs vitesses.

En utilisant un référentiel d'inertie \mathcal{R}_0 pour repérer dates, positions et vitesses par des variables numériques t, \vec{r}_j, \vec{v}_j , nous repérons y par

$$(1.2.1) \quad y_0 = (t, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n, \vec{v}_1, \vec{v}_2 \dots \vec{v}_n)$$

pris dans un ouvert Y_0 de \mathbf{R}^{1+6n} .

Il est clair que l'*espace d'évolution* Y possède une *structure de variété* — caractérisée par la carte globale $y_0 \mapsto y$.

Dynamique

Pour décrire l'*évolution* du système, il faut connaître la *masse* m_j de chaque point matériel et la *force* \vec{F}_j à laquelle il est soumis; pour pouvoir repérer chaque masse par un réel, il faut donc avoir choisi une *unité de masse*.

Quant aux forces \vec{F}_j la description intime du système fournit obligatoirement leur expression *en fonction de* y_0 — c'est à dire de la date t , des positions \vec{r}_k , et des vitesses \vec{v}_k de *tous* les points constituant le système. Cette «*loi de forces*», définie sur Y_0 , est supposée *différentiable* (C^∞).

Alors les équations différentielles de Newton:

$$(1.2.2) \quad m_j \frac{d\vec{v}_j}{dt} = \vec{F}_j$$

$$\frac{d\vec{r}_j}{dt} = \vec{v}_j$$

caractérisent l'évolution du système: toute *courbe intégrale* de ces équations constitue un *mouvement possible* du système.

Puisque le temps est «mis en scène» dans l'espace d'évolution, on peut interpréter ces équations comme un *feuilletage* de dimension 1 sur Y_0 — les courbes intégrales constituant les feuilles; feuilletage de classe C^∞ qui constitue la «dynamique» du système.

Utilisons les notations de Lagrange; un *vecteur tangent* à Y s'écrira:

$$(1.2.3) \quad \delta y = (\delta t, \delta \vec{r}_1, \delta \vec{r}_2 \dots \delta \vec{r}_n, \delta \vec{v}_1 \dots \delta \vec{v}_n)$$

il sera **tangent au feuilletage** s'il vérifie les conditions:

$$(1.2.4) \quad m_j \delta \vec{v}_j - \vec{F}_j \delta t = 0$$

$$\delta \vec{r}_j - \vec{v}_j \delta t = 0$$

obtenues en «chassant les dénominateurs» dans les équation de Newton.

Variance de l'espace d'évolution

Dans un changement de référentiel d'inertie, nous connaissons par les formules (1.1.2) les substitutions à effectuer sur le date et les positions:

$$(1.2.5) \quad \begin{array}{l} t \rightarrow \theta t + e \\ \vec{r}_j \rightarrow \lambda A \vec{r}_j + \vec{b} t + \vec{c} \end{array}$$

la *variance des vitesses* et des *forces* s'obtient par voie géométrique: pour que l'enchaînement des points de Y sur les courbes intégrales *ne dépende pas du choix du référentiel ni de l'unité de masse*, il faut et il suffit que les équations (1.2.4) caractérisent un feuilletage de la variété Y qui soit indépendant de ce référentiel; ce qui produit les formules suivantes³:

³ On peut produire par la même procédure géométrique l'expression des forces dans des référentiels accélérés ou tournants (*force centrifuge* et *force complémentaire de Coriolis*).

(1.2.6)

$$\begin{aligned} \vec{v}_j &\rightarrow \frac{\lambda}{\theta} A \vec{v}_j + \frac{1}{\theta} \vec{b} \\ m_j &\rightarrow \mu m_j \\ \vec{F}_j &\rightarrow \frac{\mu\lambda}{\theta^2} A \vec{F}_j \end{aligned}$$

L'analyse dimensionnelle classique s'obtient ainsi par voie géométrique.

1.3 Espace des mouvements et espace des phases

Espace des mouvements

Considérons maintenant l'ensemble X des *mouvements* possibles du système (c'est à dire des feuilles du feuilletage dynamique de la variété Y). X possède une structure de *variété quotient*, en notant:

$$(1.3.1) \quad P: y \mapsto x$$

la correspondance entre une condition initiale y et le mouvement x qu'elle engendre, cette structure de X est la seule pour laquelle l'application P soit une *submersion*⁴; la dimension de X est égale à $6n$.

C'est cette variété X que nous appellerons *espace des mouvements*. Une fonction différentiable sur X , c'est une fonction différentiable sur Y qui est constante sur les courbes intégrales: ce qu'on appelle une «constante du mouvement».

Espace des phases

Les épigones de Lagrange ont pris l'habitude de travailler sur un autre objet, appelé «*espace des phases*».

⁴ Autrement dit: une application d'un espace numérique \mathbf{R}^n dans X sera différentiable si elle est localement releuable par une application différentiable dans Y . Cette structure de variété existe ici parce que le feuilletage admet des sections locales, les hypersurfaces $t = \text{Cte}$. Mais la variété X n'est pas nécessairement séparée; ainsi, dans le cas du potentiel coulombien, un second quotient (discret) est nécessaire pour construire la «variété de Newton» (procédure de *régularisation*).

L'espace des phases ne peut se définir qu'en *physique d'Aristote*; c'est le quotient de l'espace d'évolution par le feuilletage suivant:

$$\delta \vec{v}_j = 0$$

$$\delta \vec{r}_j = 0$$

définition qui exige la recours à un référentiel *sublunaire*.

En physique galiléenne, il existe *une infinité d'espaces des phases* (associés à tous les choix d'une immobilité «absolue») — alors qu'il existe *un seul espace des mouvements*.

Mais le dogmatisme aristotélicien n'a pas disparu, et on continue à parler pieusement de «l'espace des phases» d'un système — comme si l'un d'entre eux était meilleur que les autres.

1.4 Forme de Lagrange

Principe de d'Alembert

Reprenons les formules (1.2.4) qui caractérisent les vecteurs δy tangents au feuilletage dynamique:

$$(1.4.1) \quad m_j \delta \vec{v}_j - \vec{F}_j \delta t = 0$$

$$\delta \vec{r}_j - \vec{v}_j \delta t = 0$$

Le *principe de d'Alembert* caractérise les mouvements du système par la nullité du «travail virtuel des forces, compte tenu des forces d'inertie».

Le mot «travail» implique ici l'usage du produit scalaire de l'espace euclidien \mathbf{R}^3 , que nous noterons $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Quant au mot «virtuel», il indique le recours à un nouveau vecteur tangent à Y , $\delta' y$. Le principe s'écrit alors:

$$(1.4.2) \quad \sum_j \langle m_j \delta \vec{v}_j - \vec{F}_j \delta t, \delta' \vec{r}_j \rangle = 0$$

c'est une simple trivialité de remarquer que le vecteur δy est tangent au feuilletage dynamique si cette expression est nulle quel que soit $\delta' y$ — en supposant déjà que δy est pris dans le sous-espace E_{3n+1} défini par le second système des équations (1.4.1):

$$\delta \vec{r}_j - \vec{v}_j \delta t = 0.$$

2-forme de Lagrange

Le premier membre de cette équation (1.4.2) est une forme bilinéaire en δy et $\delta' y$ définie sur Y ; malheureusement elle dépend du référentiel utilisé. Un remède consiste à compléter par un terme «virtuel» en $\delta' t$:

$$(1.4.3) \quad \sum_j \langle m_j \delta \vec{v}_j - \vec{F}_j \delta t, \delta' \vec{r}_j - \vec{v}_j \delta' t \rangle$$

et à *antisymétriser* — ce qui produit une 2-forme σ , que nous appelons *forme de Lagrange*:

$$(1.4.4)$$

$$\sigma(\delta y, \delta' y) =$$

$$\sum_{j=1}^n \langle m_j \delta \vec{v}_j - \vec{F}_j \delta t, \delta' \vec{r}_j - \vec{v}_j \delta' t \rangle - \langle m_j \delta' \vec{v}_j - \vec{F}_j \delta' t, \delta \vec{r}_j - \vec{v}_j \delta t \rangle$$

Il est évident que la forme σ «produit» la dynamique par la condition:

$$(1.4.5) \quad \sigma(\delta y, \delta' y) = 0 \quad \text{pour tout } \delta' y$$

en abrégé:

$$(1.4.6) \quad \delta y \in \ker(\sigma)$$

le feuilletage dynamique coïncide avec le *noyau* de la forme de Lagrange⁵.

Variance de la forme de Lagrange

La 2-forme de l'espace d'évolution Y définie par cette formule est *in-dépendante du référentiel d'inertie choisi*; à un facteur près, toutefois, dépendant du choix des unités de masse, longueur et temps M, L, T .

⁵ Le principe de d'Alembert apparaît comme une forme «tronquée» de ce principe: on se limite à $\delta' t = 0$. $\delta' \vec{v}_j = 0$.

On peut faire disparaître ce facteur en se limitant aux changements d'unités qui respectent la condition suivante:

$$(1.4.7) \quad \frac{M'}{M} \left(\frac{L'}{L} \right)^2 \left(\frac{T'}{T} \right)^{-1} = 1$$

que l'on réalise en liant le choix de l'unité de masse à celui des unités de longueur et de temps par la règle métrologique suivante:

$$(1.4.8) \quad \overset{|}{ML^2 T^{-1}} = \text{Cte};$$

cette grandeur, dont la dimension est celle d'une *action*, étant choisie arbitrairement. Dans les substitutions (1.2.5,6), les constantes μ , λ , θ sont alors liées par la relation:

$$(1.4.9) \quad \mu \lambda^2 \theta^{-1} = 1.$$

1.5 Structure symplectique

Fermeture de la forme de Lagrange

A quelle condition la forme σ est-elle *fermée*? le calcul de la dérivée extérieure $d\sigma$ montre qu'il existe — localement — un «potentiel» u dont dérivent les forces⁶; c'est-à-dire une fonction différentiable:

$$(1.5.1) \quad u(t, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n)$$

(indépendante donc des vitesses) telle que.

$$(1.5.2) \quad \vec{F}_j = \frac{\partial u}{\partial \vec{r}_j} \quad ^7.$$

⁶ Ceci parce que nous avons simplifié l'exposé en choisissant l'expression (1.4.4) de la forme de Lagrange; il existe une écriture plus complète qui concilie la fermeture de σ et l'existence de forces de type Laplace-Coriolis, dépendant de la vitesse.

⁷ Avec l'abus de notation usuel consistant à identifier les vecteurs et les formes de \mathbf{R}^3 grâce au produit scalaire.

C'est «proprement le cas de la nature», selon l'expression même de Lagrange. Il s'agit donc d'un *nouveau principe* de la mécanique, que nous appellerons «principe de Maxwell»⁸.

Descente sur l'espace des mouvements

Cette condition est suffisante pour que σ «descende» sur une 2-forme σ_X de X ⁹; σ_X est aussi fermée, et son rang est égal à la dimension de X : c'est ce qu'on appelle une *forme symplectique*¹⁰.

(1.5.3)

«Nous désignerons, en général, les constantes arbitraires ... par a, b, c, f, g, etc., dont le nombre doit être double de celui des variables»

(Joseph-Louis Lagrange, *Mécanique Analytique*, deuxième édition)

Les composantes covariantes σ_{jk} et contravariantes σ^{jk} de σ_X dans des coordonnées quelconques de l'espace des mouvements sont connues depuis 1811: Lagrange les a introduites dans la 2ème édition de la *Mécanique Analytique* pour traiter le calcul des perturbations par la méthode de *variation des constantes*, avec les notations $[a, b]$, (a, b) ; on les appelle «crochets» et «parenthèses» de Lagrange.

La structure symplectique de la mécanique est donc un ingrédient parfaitement classique. Pourquoi donc n'a-t-elle été réellement reconnue et exploitée que cent cinquante ans plus tard? sans doute parce que le dogme de l'espace des phases a empêché de comprendre Lagrange — qui travaillait sur l'espace des mouvements.

⁸ Attention! Il ne s'agit pas ici d'un principe de «conservation»: la fonction $u(t, \vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n)$ n'est une constante du mouvement que si elle ne dépend que de $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_n$.

⁹ σ_X est caractérisée par la propriété:

$$\sigma = S^* \sigma_X,$$

S désignant la submersion $Y \rightarrow X$. Cette propriété déjà exprimée implicitement par Lagrange a été retrouvée un siècle plus tard par Elie Cartan («invariant intégral absolu de la dynamique»).

¹⁰ Les formes symplectiques n'existent que sur des variétés de dimension *paire* (ici $6n$).

1.6 Relativité galiléenne de la mécanique

«dans les matières philosophiques, il faut faire abstraction des sens; car il se peut faire qu'il n'y ait aucun corps véritablement en repos, auquel on puisse rapporter les lieux et les mouvements.»

(Isaac Newton, *ibidem*)

Groupe de Galilée et systèmes libres

Un mouvement x d'un système dynamique a été défini comme une courbe tracée dans l'espace d'évolution Y ; mais on peut aussi le caractériser comme un système de n courbes tracées dans l'espace-temps \mathcal{E} — les *lignes d'univers* des n points constituant le système¹¹.

Puisque tout élément g du groupe de Galilée G est un difféomorphisme de \mathcal{E} , nous pouvons déterminer son action sur un mouvement x — produisant un autre système de n courbes $g(x)$.

Le principe de relativité galiléenne implique que l'objet ainsi construit est *encore un mouvement du système* — quels que soient $x \in X$ et $g \in G$.

Bien entendu il ne peut s'appliquer qu'aux systèmes *libres* — ceux où les forces appliquées ne dépendent pas de la présence d'objets extérieurs¹².

En utilisant un référentiel d'inertie quelconque \mathcal{R}_0 , on peut traduire ce principe par des conditions sur les lois de forces¹³: il suffit d'appliquer la caractérisation (1.5.5) du groupe de Galilée G et les formules (1.2.5,6) de changement de référentiel.

Ce calcul montre en particulier que G agit sur X par *difféomorphismes*; et, si le principe de Maxwell est respecté, par *symplectomorphismes*; c'est-à-dire que:

$$(1.6.1) \quad g_X^* \sigma_X = \sigma_X \quad \text{pour tout } g \in G$$

g_X désignant le difféomorphisme image de g par l'action, et σ_X la forme symplectique de X .

¹¹ Parce que la donnée de ces courbes détermine toutes les conditions initiales du mouvement.

¹² Le langage traditionnel parle de «forces intérieures».

¹³ Puisque il s'agit d'un système qui par hypothèse est isolé, cette condition apparaît comme un axiome concernant les *forces d'interaction*.

Conséquences

(1.6.2)

Parmi les conséquences mathématiques de cette action symplectique, figurent les lois de conservation classique: *énergie, impulsion, moment angulaire*; le *mouvement rectiligne uniforme du barycentre*; l'*égalité de l'action et de la réaction*, qui n'est donc pas un principe autonome; l'interprétation de la *masse* totale comme une *classe de cohomologie*; la décomposition de la variété des mouvements en un *produit cartésien de deux variétés symplectiques* sur lesquels le groupe de Galilée G agit séparément (voir ci-dessous 1.10.4); d'où de nouvelles grandeurs conservées: *moment cinétique propre, énergie propre*; etc.

1.7 Symétries symplectiques

Actions symplectiques

Examinons de plus près la géométrie des actions de groupe par symplectomorphismes.

(1.7.1)

Soit (X, σ) une variété symplectique; G un groupe de Lie; nous supposons X et G connexes.

Si G est muni d'une *action différentiable* sur X :

$$g \mapsto g_X$$

l'*action infinitésimale* associe à tout élément Z de l'algèbre de Lie \mathcal{L} de G un champ de vecteurs sur X , soit Z_X ;

l'action est dite *symplectique* si:

$$(1.7.2) \quad g_X^* \sigma = \sigma \quad \text{pour tout } g \in G$$

cette relation est équivalente à:

$$(1.7.3) \quad \text{la 1-forme } i(Z_X)\sigma \text{ est fermée pour tout } Z \in \mathcal{L}.$$

Actions hamiltoniennes

On appellera *action hamiltonienne* toute action symplectique telle que, pour tout $Z \in \mathcal{L}$, la forme $i(Z_X)\sigma$ soit *exacte*¹⁴; c'est-à-dire s'il existe une fonction H , appelée *hamiltonien* de Z , telle que:

$$(1.7.4) \quad i(Z_X)\sigma = -dH$$

H est définie par cette formule à une constante additive près.

L'ensemble \mathcal{H} des hamiltoniens est une *algèbre de Lie*, lorsqu'on le munit du *crochet de Poisson*¹⁵.

Cas du groupe de Galilée

Dans le cas d'un système *libre*, nous avons déduit du principe de relativité l'existence d'une action *symplectique* du groupe de Galilée sur l'espace des mouvements. Est-elle hamiltonienne?

La structure du groupe de Galilée permet de montrer qu'il suffit pour cela que la forme $i(Z_X)\sigma$ soit exacte dans le seul cas où Z est un générateur des translations temporelles.

Le hamiltonien correspondant est *l'énergie*; le cas d'une *action non hamiltonienne* correspondrait à une «énergie multiforme» — permettant des ressources gratuites illimitées... Nous savons bien que ce n'est pas possible; d'où un *nouveau principe* de la mécanique classique: l'action du groupe de Galilée est toujours hamiltonienne.

1.8 Nouvelle formulation des principes de la mécanique classique

Ce sont ces propriétés qui conduisent à «réinitialiser» les principes de la mécanique classique: nous admettrons seulement que les mouvements d'un système libre constituent une *variété symplectique* X , munie d'une *action hamiltonienne du groupe de Galilée*.

Toutes les conséquences mathématiques établies dans le cas des systèmes classiques de points soumis à des forces restent valables; les ha-

¹⁴ Pour qu'une action symplectique soit hamiltonienne, il suffit que X soit simplement connexe ou que l'algèbre de Lie \mathcal{L} soit égale à son algèbre dérivée.

¹⁵ Le crochet de Poisson de deux fonctions u, v sur une variété symplectique est donné en coordonnées locales par la formule $[u, v] = \sigma^{jk} \partial_j u \partial_k v$, les σ^{jk} désignant les «parenthèses de Lagrange» (voir 1.5.3).

miltoniens s'articulent pour constituer les objets que nous savions interpréter dans le cas des système «classique» (énergie, impulsion, moment angulaire, barycentre, masse, décomposition barycentrique, etc.).

Systèmes élémentaires

(1.8.1)

Une classe particulièrement intéressante est celle des systèmes où l'action du groupe de Galilée G sur l'espace des mouvements X est *transitive*.

Ces objets peuvent se classer; on obtient ainsi des modèles convenables pour les *particules élémentaires*; non seulement les «points matériels», mais aussi les *particules à spin* comme les électrons, dont on décrit ainsi le *moment cinétique propre* ¹⁶.

Passage à la mécanique relativiste

(1.8.2)

Le passage à la *mécanique relativiste* (relativité restreinte) est simple à ce niveau: il suffit de remplacer le groupe de Galilée par le *groupe de Poincaré* (groupe des isométries de l'espace-temps \mathcal{L} muni de la structure de Minkowski; la dimension de ce groupe est égale à 10, comme dans le cas galiléen).

L'espace des mouvements est toujours une variété symplectique, munie donc d'une action symplectique de groupe de Poincaré ¹⁷. Mais il n'existe pas, dans ce cas, de procédure standard pour produire un espace d'évolution Y ; ceci parce que la non-conservation de la simultanéité par le groupe empêche de définir une condition initiale par le choix d'une date.

Les espaces symplectiques homogènes du groupe de Poincaré fournissent des modèles convenables non seulement pour les électrons, mais

¹⁶ On peut généraliser la mécanique des systèmes classiques en rassemblant des *points matériels* et des *particules à spin*. Le principe de Galilée permet de décrire de nouveaux types d'interaction — comme le *ferro-magnétisme*.

¹⁷ L'algèbre de Lie étant égale à l'algèbre dérivée, l'action est automatiquement hamiltonienne. Une procédure géométrique d'approximation conduit à la relation $E = mc^2$ entre l'énergie relativiste E et la masse galiléenne m .

aussi pour les photons, les neutrinos, etc. Mais ces objets nouveaux *ne possèdent pas d'espace d'évolution* au sens classique; la *position* d'un photon à une date t peut se définir dans chaque référentiel d'inertie¹⁸ — mais l'ensemble de ces positions dans l'espace de Minkowski \mathcal{E} dépend du référentiel et décrit ainsi un *3-plan isotrope*.

1.9 Préquantification

Variétés quantiques

(1.9.1) On appelle *variété quantique* une variété séparée connexe \mathfrak{E} munie d'une 1-forme ω telle que:

$\ker(d\omega)$ est de dimension 1 et définit un feuilletage en cercles de \mathfrak{E} ;

ω induit sur ces cercles une 1-forme non nulle;

la circulation $\int \omega$ sur ces cercles est égale à 2π .

Dans ces conditions:

Le quotient de \mathfrak{E} par le feuilletage est une *variété* X ;

X est munie d'une *forme symplectique* σ , caractérisée par la formule:

$$P^* \sigma = d\omega$$

P désignant la projection canonique de \mathfrak{E} sur X ;

l'intégrale $\int \sigma$ sur toute 2-sphère plongée dans X est un *multiple entier* de 2π .

Quantomorphisms

(1.9.2)

On appellera *quantomorphisms* d'une variété quantique \mathfrak{E} les diffeomorphismes q de \mathfrak{E} qui préservent le forme ω :

$$q^* \omega = \omega;$$

ils constituent un groupe *Quant* (\mathfrak{E}).

¹⁸ Par ses symétries dans le groupe d'Aristote attaché au référentiel — qui est un sous-groupe de Poincaré.

Tout quantomorphisme q conserve les cercles, et se projette sur un *symplectomorphisme* s de la base X :

$$P \circ q = s \circ P$$

On dira que q est un *relèvement* de s , et que s est *relevable*.

(1.9.3)

Les relèvements de l'identité de X constituent un groupe de quantomorphisms de Ξ , isomorphe au *tore* $\mathbf{T} = U(1)$; l'isomorphisme est canoniquement défini par la formule:

$$e^{it} \mapsto \exp(itR)$$

R étant le *vecteur de Reeb*, défini par les équations:

$$i(R)\omega = 1, \quad i(R)d\omega = 0.$$

Cette action du tore est une fibration principale de Ξ , dont les orbites sont les cercles. Ce groupe est le *centre* du groupe des quantomorphisms.

Préquantification d'une variété symplectique

Une variété symplectique connexe (X, σ) est dite *préquantifiable* si elle est isomorphe à la base d'une variété quantique (Ξ, ω) ; il est évidemment nécessaire que l'intégrable $\int \sigma$ sur les sphères soit toujours multiple de 2π ; on démontre que cette condition est suffisante. Plus précisément:

(1.9.4) Une *préquantification* de (X, σ) sera la donnée d'une variété quantique (Ξ, ω) et d'une *submersion* P de Ξ sur X , telles que:

$$\begin{aligned} &\text{Pour tout } x \in X, P^{-1}(x) \text{ est un cercle de } \Xi; \\ &P^* \sigma = d\omega; \end{aligned}$$

(1.9.5) Deux préquantifications (Ξ, ω, P) , (Ξ', ω', P') sont dites *équivalentes* s'il existe un difféomorphisme q de Ξ sur Ξ' , tel que:

$$q^* \omega' = \omega \quad \text{et} \quad P' \circ q = P;$$

si X est préquantifiable, on peut mettre en bijection les classes d'équivalence des préquantifications avec les caractères du groupe d'homotopie $\Pi_1(X)$.

Préquantification d'un système

(1.9.6)

L'expérience montre que les *espaces des mouvements* des systèmes dynamiques que l'on rencontre dans la nature sont des *variétés symplectiques préquantifiables*.

Bien entendu ceci n'a un sens indépendant du choix du référentiel que si on relie les unités de masse, longueur et temps par la relation (1.4.8), avec un choix bien déterminé de la constante; à savoir:

$$(1.9.7) \quad ML^2 T^{-1} = \hbar = 1.05459... \times 10^{-34} \text{ kilogramme metre}^2 \text{ seconde}^{-1}$$

\hbar désigne, selon l'usage, le quotient par 2π de la *constante de Planck*¹⁹.

(1.9.8)

L'existence d'une préquantification pour l'espace des mouvements d'un système dynamique pourra donc figurer parmi les *principes* de la Mécanique classique (ou relativiste).

Comme nous allons le voir, dans le cas d'une particule à spin galiléenne, ce principe équivaut au fait que le moment cinétique propre soit un multiple entier de $\frac{\hbar}{2}$; c'est ce que montre l'expérience — qui permet ainsi de *mesurer* la constante de Planck.

1.10 Actions hamiltoniennes sur une variété préquantifiable

(1.10.1)

Soit (X, σ) une variété symplectique connexe possédant une préquantification (\mathcal{E}, ω, P) ; S un groupe de Lie connexe muni d'une action hamiltonienne sur X .

¹⁹ Des unités de mesure vérifiant cette condition s'appellent «unités quantiques».

Alors il existe deux groupes de Lie, G et H , qui sont caractérisés par le diagramme commutatif de suites exactes suivant:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & 0 & & 0 & \\
 & & & \downarrow & & \downarrow & \\
 & & 0 & \longrightarrow & \mathbf{T} & \longrightarrow & \mathbf{T} & \longrightarrow & 0 \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \\
 0 & \longrightarrow & H & \longrightarrow & G & \longrightarrow & \text{Quant}(\Xi) & & \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \\
 0 & \longrightarrow & H & \longrightarrow & S & \longrightarrow & \text{Symp}l(X) & & \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & & & \\
 & & 0 & & 0 & & & &
 \end{array}$$

nous dirons que G est l'*extension quantique* de S .

G peut se construire comme *produit croisé* de S et de $\text{Quant}(\Xi)$ au dessus de $\text{Symp}l(X)$; c'est une extension centrale de S par le tore \mathbf{T} , muni d'une action différentiable sur Ξ par quantomorphismes; H est le noyau de l'action de S sur X ; le diagramme l'identifie canoniquement au noyau de l'action de G sur Ξ .

Soit \mathcal{G} l'algèbre de Lie de G .

Pour tout $Z \in \mathcal{G}$, notons Z_{Ξ} le vecteur de Ξ associé à Z par l'action infinitésimale de G ; la fonction $i(Z_{\Xi})\omega$ descend sur X via la projection P , ce qui s'écrit:

$$(1.10.2) \quad i(Z_{\Xi})\omega = P^* H_Z$$

L'application linéaire $Z \mapsto H_Z$ ainsi définie est un *morphisme surjectif* de l'algèbre de Lie \mathcal{G} sur l'algèbre de Lie \mathcal{H} de tous les hamiltoniens du groupe S (munis du crochet de Poisson 1.7.4).

Réduction

(1.10.3)

Soit H^0 la composante neutre de H ; H^0 est distingué dans H et dans S . Le diagramme commutatif de suites exactes suivant:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & 0 & & 0 & & 0 \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 0 & \longrightarrow & H^0 & \longrightarrow & H^0 & \longrightarrow & 0 \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 0 & \longrightarrow & H & \longrightarrow & S & \longrightarrow & \text{Symp}(X) \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 0 & \longrightarrow & H/H^0 & \longrightarrow & S/H^0 & \longrightarrow & \text{Symp}(X) \\
 & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 & & 0 & & 0 & & 0
 \end{array}$$

indique que le *groupe réduit* $S^* = S/H^0$ agit symplectiquement sur X ; cette action est *hamiltonienne*; les hamiltoniens de S et de S^* coïncident; le noyau de l'action réduite, isomorphe à H/H^0 , est *discret*; l'*extension quantique* G^* de S^* a donc aussi un noyau discret.

Exemple

(1.10.4)

S est le groupe de Galilée, X l'espace des mouvements d'un système libre classique ou d'une particule élémentaire, supposé préquantifiable.

Alors l'extension quantique de S est un groupe de Lie de dimension 11, appelé *groupe de Bargmann*; c'est une extension *non triviale* de S par \mathbf{T} ; l'obstruction à la trivialité est une classe de cohomologie, qui mesure la *masse* totale du système.

Si cette masse m 'est pas nulle, X est le produit cartésien symplectique de deux variétés préquantifiables:

- l'espace des *mouvements du barycentre*;
- l'espace des *mouvements propres*.

Le groupe de Galilée possède une action hamiltonienne sur chacune de ces variétés; l'action sur l'espace des mouvements propres est *réductible*.

Dans le cas d'une *particule à spin*, l'espace des mouvements propres est la sphère S^2 , munie de la forme symplectique

$$\sigma = s \text{ surf},$$

surf désignant l'élément d'aire de la sphère standard orientée; s est le *spin* (moment cinétique propre); l'existence d'une préquantification impose que s soit *la moitié d'un entier* p , que l'on peut choisir *positif*²⁰.

Le groupe de Galilée se réduit au groupe des rotations $SO(3)$; l'extension quantique G de $SO(3)$ peut se construire comme quotient du groupe unitaire $U(2)$ par le sous-groupe Z_p des racines p -ièmes de l'unité.

La projection $G \rightarrow SO(3)$ associe à la classe d'une matrice unitaire u la matrice de rotation dont les composantes r_{jk} sont données par:

$$u \sigma_j u^{-1} = \sum_{jk} r_{jk} \sigma_k$$

où interviennent les trois *matrices de Pauli* σ_j .

Groupes générateurs

(1.10.5)

Conservons les hypothèses précédentes (1.10.1): X est une variété symplectique préquantifiable; S est un groupe de Lie muni d'une action hamiltonienne sur X .

Nous dirons que S est *générateur* de X si:

- l'action de S est *transitive*;
- le noyau H de cette action est *discret*²¹;
- les hamiltoniens *séparent les points* de X .

(1.10.6)

Sous ces hypothèses, on peut montrer que le centre de G est le produit direct des groupes T et H ; que l'application $Z \mapsto H_Z$ définie en

²⁰ Avec des unités de mesure arbitraires, le spin vaut $p\hbar/2$.

²¹ On peut toujours réaliser cette condition par la procédure de réduction (1.10.3).

(1.10.2) est injective, et constitue donc un *isomorphisme* de l'algèbre de Lie de G avec l'algèbre de Lie-Poisson \mathcal{H} des hamiltoniens de S .

En particulier la fonction hamiltonienne 1 est égale à $H_R - R$ désignant le «vecteur de Reeb», générateur du tore²².

Exemple

(1.10.7) Soit G un groupe de Lie connexe; on suppose que la composante neutre du centre de G est isomorphe au tore \mathbf{T} . Soit α une 1-forme invariante sur G . On désigne par A le stabilisateur de α dans la représentation coadjointe²³.

On suppose que:

— la circulation de α sur \mathbf{T} est égale à 2π

— il existe un morphisme χ de A dans \mathbf{T} tel que:

$$\alpha_A = \chi^* \alpha_{\mathbf{T}}$$

α_A et $\alpha_{\mathbf{T}}$ désignant les formes induite par α sur A et \mathbf{T} .

Alors:

(1.10.8) (1) La variété $X = G/A$ est munie d'une *forme symplectique* σ caractérisée par:

$$[g \mapsto gA]^* \sigma = d\alpha$$

(2) Soit B le noyau de χ .

Alors la variété $\Xi = G/B$ est munie d'une *forme quantique* ω caractérisée par:

$$[g \mapsto gB]^* \omega = \alpha.$$

(3) L'application:

$$P: gB \mapsto gA$$

fait de Ξ une *préquantification* de X .

(4) Le groupe $S = G/\mathbf{T}$, muni de l'action:

$$g\mathbf{T} \mapsto [g'A \mapsto gg'A]$$

est *générateur* de X ; G est l'*extension quantique* associée.

²² Le vecteur R_{Ξ} associé à l'action sur Ξ est bien le vecteur de Reeb de la variété quantique Ξ .

²³ Définitions: α est dite *invariante* (à gauche) si $L_g^* \alpha = \alpha$ pour toute translations à gauche L_g . La *représentation coadjointe* de G sur l'espace vectoriel des 1-formes invariantes est définie par $Ad^*(g)(\alpha) = Ad(g^{-1})^* \alpha$, Ad désignant l'action adjointe de G sur G : $Ad(g)(g') = gg'g^{-1}$.

L'intérêt de cette construction, c'est qu'elle est *universelle*. En effet:

- (1.10.9) Soient (X, σ) est une variété symplectique connexe; (\mathbb{Z}, ω, P) une préquantification de X ; S un groupe générateur. Choisissons $\xi \in \mathbb{Z}$; sur l'extension quantique G de S , posons:

$$\alpha = [g \mapsto g(\xi)]^* \omega$$

α est une 1-forme invariante; sur le stabilisateur coadjoint A de α , il existe un caractère χ défini par:

$$[\chi(a)]_{\mathbb{Z}}(\xi) = a_{\mathbb{Z}}(\xi)^{24}$$

alors les hypothèses (1.10.7) sont réalisées; la construction (1.10.8) reproduit $X, \sigma, \mathbb{Z}, \omega, P, S$ à partir de α et χ .

2. ET MAINTENANT, LA MECANIQUE QUANTIQUE

Avertissement

Nous allons proposer un algorithme de «quantification» pour un système dynamique dont l'espace des mouvements X possède une *préquantification* \mathbb{Z} et un *groupe générateur* S .

La mécanique classique suffit à définir la structure symplectique de X ; le choix de \mathbb{Z} et de S sera donc «*le supplément de structure*» nécessaire et suffisant pour quantifier.

Mais les systèmes dynamiques concrets ne possèdent pas tous de groupe générateur S évident. Comment faire?

Peut-être en renonçant à exiger que S soit un *groupe de Lie*; la construction (1.10.5,6) s'applique encore aux «*groupes difféologiques*» et produit des groupes générateurs *pour toutes les variétés symplectiques connexes*.

Mais nous nous contentons ici du cas de groupes de Lie.

Une réinterprétation des états de la *mécanique statistique*²⁵ suggère l'axiomatique des **états quantiques**, fonctions définies sur l'extension quantique de S et solutions d'un simple jeu d'inégalités.

²⁴ Au premier membre apparaît la fibration de \mathbb{Z} par le tore (1.9.3); au second membre l'action de G sur \mathbb{Z} .

²⁵ Mécanique statistique considérée comme un *stade intermédiaire* entre les mécaniques classique et quantique.

Cette axiomatique suffit à faire surgir les objets courants de la mécanique quantique (interprétation probabiliste, relations d'incertitude; espaces de Hilbert, opérateurs, représentations unitaires; états mélangés; etc.) dans un cadre mathématique rigoureux — parfois plus large que le cadre habituel. Quelques exemples illustrent cette théorie.

2.1 Mécanique statistique et probabilités

Equation de Liouville

(2.1.1)

Traditionnellement, les «états» de la *mécanique statistique classique* sont caractérisés par une *fonction de répartition*, définie sur l'*espace des phases*, solution positive de l'*équation d'évolution de Liouville*, et dont l'intégrale (pour la mesure de Liouville) est égale à 1. L'expérience montre que de tels «*états statistiques*» (en particulier les états de Gibbs) sont parfois une meilleure description de la réalité physique que les seuls «mouvements» de la mécanique classique.

Mécanique statistique sur l'espace des mouvements

(2.1.2)

L'équation de Liouville est ici un simple expédient pour compenser le caractère non covariant de l'espace des phases; il existe une formulation covariante strictement équivalente: un «*état statistique*» est une *loi de probabilité μ complètement continue sur l'espace des mouvements X* . On se passe d'ailleurs avec profit de la restriction «complètement continue» — qui ne sert en fait qu'à écrire sans états d'âme l'équation de Liouville; dans ce cas on pourra identifier chaque *mouvement classique* x avec la loi de probabilité $\delta(x)$ concentrée au point x .

Lois de probabilité et groupes

Mais quelle est donc la définition d'une loi de probabilité μ sur un ensemble X ? Une des définitions standard, c'est de faire de μ une *fonctionnelle* — associant à certaines fonctions f définies sur X un nombre noté

$$(2.1.3) \quad \int_X f(x) d\mu(x)$$

ou simplement $\mu(f)$, et qu'on appelle *valeur moyenne* de f .

Dans le cas d'un espace X topologique localement compact, une loi de probabilité μ (au sens standard du terme) permet en particulier de calculer les valeurs moyennes des fonctions continues sur X à valeurs dans le *tore* \mathbf{T} , ensemble des nombres complexes de module 1.

On note que ces fonctions constituent un groupe multiplicatif Γ , et on peut montrer que les valeurs de la fonctionnelle μ restreinte à Γ suffit à caractériser la loi de probabilité.

Il est facile d'autre part d'établir les propriétés suivantes de cette fonctionnelle restreinte:

(2.1.4)

$\mu(e) = 1$ (e : élément neutre de Γ)
$0 \leq \sum_{jk} \overline{C_j} C_k \mu(\gamma_j^{-1} \gamma_k)$
$\left \sum_j C_j \mu(\gamma_j) \right \leq \sup_{x \in X} \left \sum_j C_j \gamma_j(x) \right $

vables quels que soient les C_j dans \mathbf{C} , les γ_j dans Γ .

Reformulation du calcul des probabilités

(2.1.5)

Nous allons prendre ces propriétés comme *axiomes* — non seulement de la mécanique statistique classique — mais plus généralement du *calcul des probabilités*: un ensemble X sera *probabilisé* par le choix arbitraire d'un groupe Γ d'applications $X \rightarrow \mathbf{T}$; une *loi de probabilité* sera une fonction complexe μ sur Γ vérifiant les axiomes ci-dessus (2.1.4).

(2.1.6)

- Les propriétés essentielles des probabilités sont sauvegardées:
- μ est prolongeable, d'une seule façon, par une *fonctionnelle linéaire positive de masse 1* sur l'ensemble A des «fonctions d'essai», limites uniformes des combinaisons linéaire complexes d'éléments de Γ ;
 - en chaque point x , la *loi de probabilité concentrée* en x est la fonctionnelle:

$$\gamma \mapsto \gamma(x)$$

- l'ensemble des lois de probabilités est *convexe*;

- la définition (immédiate) du produit tensoriel des groupes Γ, Γ' de deux espaces probabilisés X, X' probabilise le produit cartésien $X \times X'$; ce qui définit par dualité le produit tensoriel de deux lois de probabilités — c'est-à-dire les «*probabilités composées*».

Etc²⁶.

Séparation

(2.1.7)

La probabilisation Γ d'un ensemble X sera dite *séparée* si les éléments de Γ séparent les points de X ; autrement dit si la fonction:

$$x \mapsto [\gamma \mapsto \gamma(x)]$$

est une injection de X dans le groupe des caractères de Γ .

(2.1.8)

Dans le cas contraire, l'ensemble de ces caractères est un quotient de X — où descendent le groupe Γ et les Γ -lois de probabilités; cette probabilisation du quotient est séparée.

Exemple

(2.1.9)

Probabilisons l'espace numérique \mathbf{R}^n avec le groupe Γ ds fonctions «harmoniques»:

$$x \mapsto e^{i(\omega, x)} \quad (\omega \in \mathbf{R}^n)$$

qui est isomorphe au groupe additif des ω . Il est clair que Γ sépare les points.

²⁶ A est la C^* -algèbre engendrée par Γ ; elle est évidemment commutative. Son *spectre de Gelfand* \mathcal{S} est un espace topologique compact; il existe une application canonique de X sur une partie dense de \mathcal{S} . Chaque Γ -(loi de probabilité) peut s'interpréter comme une loi de probabilité classique sur le compact \mathcal{S} .

(2.1.10)

Les lois de probabilité classique (dérivées de la topologie de \mathbf{R}^n) définissent bien des Γ -lois de probabilité, puisque les fonctions harmoniques sont continues; elles sont d'ailleurs *caractérisées* par ce Γ -lois: c'est le théorème de Bochner²⁷.

(2.1.11)

Mais il existe d'autres Γ -lois, par exemple la fonction caractéristique d'un sous-groupe fermé: elles s'interprète dans l'espace des x comme *loi de probabilité équipartie sur le réseau dual*; le cas le plus simple étant la fonction caractéristique du sous-groupe $\{0\}$, qui décrit une probabilité *équipartie dans \mathbf{R}^n* . Les objets de ce type sont évidemment interdits par le calcul classique des probabilités; mais ils vont nous être utiles.

2.2 Etats et représentations quantiques

Etats statistiques et hamiltoniens

(2.2.1)

Soit X l'espace des mouvements d'un système; comme nous l'avons indiqué dans l'avertissement, nous supposons que X est une variété symplectique préquantifiée, possédant un groupe générateur S — *ce qui permet d'utiliser toutes les constructions et les notations (1.10)*. En particulier l'extension quantique G va jouer un rôle essentiel.

On peut montrer que toute loi de probabilité classique de X est déterminée par les valeurs moyennes des fonctions $\text{exp } i \circ H$:

$$(2.2.2) \quad \gamma: x \mapsto e^{iH(x)}$$

H parcourant l'espace \mathcal{H} des fonctions hamiltoniennes; elles constituent un groupe Γ .

²⁷ On reconnaît dans ces fonctions sur Γ les «fonctions caractéristiques» au sens de Poincaré-Lévy:

$$\omega \mapsto \int e^{f(\omega, x)} d\mu(x).$$

Par conséquent *tout état statistique classique* du système est caractérisé par une fonctionnelle μ sur Γ , vérifiant les inégalités (2.1.4).

Un pseudo-morphisme

Nous savons (1.10.5) qu'il existe un isomorphisme de l'algèbre de Lie \mathcal{G} du groupe G avec \mathcal{H} :

$$z \mapsto H_Z.$$

Le vecteur de Reeb R appartient au centre de \mathcal{G} , et vérifie $\exp(2\pi R) = e$; il en résulte que $\exp(Z)$ ne dépend de la fonction H_Z que par l'intermédiaire de sa classe additive modulo 2π ; c'est-à-dire qu'il existe une application $I: \Gamma \rightarrow G$, caractérisée par la formule:

$$(2.2.3) \quad \boxed{I(\exp i \circ H_Z) = \exp(Z)}$$

Au voisinage de l'élément neutre, I est un difféomorphisme de Γ sur G (ces deux groupes de Lie ont même dimension); I n'est pas un morphisme de groupe (Γ est commutatif, mais pas G); mais I induit un morphisme sur tout sous-groupe de Γ obtenu en choisissant les Z dans une sous-algèbre de \mathcal{G} — sous-groupe que nous dirons «isotrope».

L'image par I d'une sous-groupe isotrope est un sous-groupe commutatif connexe de G .

Axiomes des états quantiques

Nous allons définir un nouveau type d'objet mathématique: les *états quantiques*. Les états statistiques μ sont des fonctions complexes définies sur le groupe commutatif Γ , vérifiant les inégalités (2.1.4); définissons un état quantique m comme une fonction complexe sur le groupe non commutatif G ²⁸ vérifiant le système d'inégalités:

²⁸ Hypothèses et notations ci-dessus.

(2.2.4)	(a)	$m(e) = 1$ (e : élément neutre)
	(b)	$0 \leq \sum_{jk} \overline{C_j} C_k m(g_j^{-1} g_k)$ quels que soient les C_j dans \mathbf{C} et les g_i dans G , en nombre fini arbitraire
	(c)	$\left \sum_j C_j m(\exp(Z_j)) \right \leq \sup_{x \in X} \left \sum_j C_j e^{iH_j(x)} \right $ quels que soient les C_j dans \mathbf{C} et les $Z_j \in \mathcal{G}$, commutant deux à deux ²⁹

Lois de probabilité associées à un état quantique

Le dernier axiome (c) peut aussi s'écrire, en utilisant l'application I :

$$(2.2.5) \quad \left| \sum_j C_j [m \circ I](\gamma_j) \right| \leq \sup_{x \in X} \left| \sum_j C_j \gamma_j(x) \right|$$

dès que les γ_j appartiennent à un même sous-groupe isotrope de Γ

il en résulte immédiatement que $m \circ I$ vérifie les axiomes des probabilités (2.1.4) non pas sur le groupe Γ — mais *sur tous ses sous-groupes isotropes*. D'où des lois de probabilité au sens généralisé qui vont servir à «interpréter» m .

(2.2.6)

Soit par exemple H un hamiltonien quelconque — correspondant à un élément Z de l'algèbre de Lie \mathcal{G} , le groupe engendré, de dimension 1, est évidemment isotrope; la loi de probabilité associée est portée par la variété X — mais on sait qu'elle descend sur le quotient séparé associé, qui est simplement l'ensemble $K = H(X)$ des valeurs de H ; cette portion de droite K est probabilisée par les fonctions «harmoniques» (2.1.9); la loi de probabilité associée s'appellera *spectre du hamiltonien H dans l'état m* .

²⁹ Les H_j sont les fonctions hamiltoniennes correspondant aux Z_j .

(2.2.7)

Si K est borné, les fonctions d'essai sont toutes les fonctions continues sur la fermeture \bar{K} de K (théorème de Stone); la loi de probabilité est donc une mesure de probabilité classique μ supportée par \bar{K} et calculable par:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\mu(\omega) = m(\exp(tZ)) \quad \forall t \in \mathbf{R}$$

ceci quel que soit l'état quantique m .

(2.2.8)

On obtient encore un spectre classique μ chaque fois que l'état m est continu (comme fonction définie sur G) — et ceci quel que soit le hamiltonien H .

Nous verrons plus loin (2.3.8) un exemple de spectre généralisé (état discontinu, hamiltonien non borné).

Quelques propriétés mathématiques des états quantiques

On peut établir les propositions suivantes:

- (2.2.9) (a) L'ensemble M des états quantiques de G est une partie convexe et faiblement fermée de l'espace $B(G)$ des fonctions bornées sur G ³⁰.
- (b) Si M n'est pas vide, M possède des points extrémaux — et est égal au plus petit convexe faiblement fermé contenant ces points.
- (c) Il existe une *action convexe* du groupe générateur S sur M , définie par:

$$s(m)(g') = m(g^{-1}g'g)$$

g désignant un relevé de s dans G .

(a) montre que toute limite uniforme — ou faible — d'états quantiques est encore en état quantique.

³⁰ $B(G)$ est le dual d'un espace de Banach — à savoir l'espace $L^1(G)$ si on munit G de la topologie discrète; ce qui définit sa topologie faible.

(c) montre que les états quantiques sont des *objets classiques* — au sens de Felix Klein: ils appartiennent à la même S -géométrie que les mouvements classiques.

(2.2.10) Soit m un état. Alors:

- (a) Il existe un *espace de Hilbert* \mathbf{H} , une *représentation unitaire* ϱ de G sur \mathbf{H} , un vecteur unitaire Ω dans \mathbf{H} , cyclique pour la représentation, tels que,

$$m(g) = \langle \Omega, \varrho(g)\Omega \rangle \quad \text{pour tout } g \in G$$

- (b) Cette formule définit \mathbf{H} , ϱ et Ω à une équivalence unitaire près.
- (c) Quel que soit le vecteur unitaire $\Psi \in \mathbf{H}$ («*vecteur d'état*»), la fonction m' :

$$m'(g) = \langle \Psi, \varrho(g)\Psi \rangle$$

est un état quantique.

Les représentations unitaires de G ainsi construites seront dites *représentations quantiques*.

- (d) Pour que la représentation quantique associée à un état quantique m soit *irréductible*, il faut et il suffit que m soit *extrémal* dans le convexe M des états quantiques.
- (e) Soit ϱ une représentation quantique, D un «*opérateur densité*», c'est-à-dire un opérateur à trace, positif, de trace 1. Alors la formule

$$m(g) = \text{Trace}(D\varrho(g))$$

définit un état quantique m («*état mélangé*»).

Si E est un «*opérateur de Gibbs*», c'est-à-dire un opérateur self-adjoint tel qu'il existe $\beta_0 \in \mathbf{R}$ vérifiant

$$\text{Trace}(e^{-\beta_0 E}) < \infty$$

alors pour tout $\beta \geq \beta_0$, l'opérateur

$$D_\beta = \frac{e^{-\beta E}}{\text{Trace}(e^{-\beta E})}$$

est un opérateur densité, et définit donc un état quantique

m_β ; la limite de m_β ³¹ lorsque β tend vers $+\infty$ est l'état quantique m_∞ associé à l'opérateur densité $\frac{\Pi}{r}$, Π désignant le projecteur propre associé à la plus petite valeur propre de E , et r son rang (l'existence de ces objets est obligatoire pour les opérateurs de Gibbs).

- (f) Pour que la représentation quantique associée à un état quantique m soit *continue*³², il faut et il suffit que la fonction m soit *continue au point e* ; alors à tout hamiltonien H est associé un *opérateur self-adjoint \hat{H}* de l'espace de Hilbert caractérisé par:

$$\varrho(\exp(tZ)) = e^{it\hat{H}} \quad \text{pour tout } t \in \mathbf{R}.$$

Si le groupe G est *compact*, ces opérateurs sont bornés, et vérifient les *relations de commutation de Dirac*.

Combiné avec (2.2.9b), le résultat (d) montre que l'existence d'un seul état quantique de G suffit pour qu'il existe une représentation quantique irréductible sur un espace de Hilbert \mathbf{H} . Alors la correspondance

vecteur d'état \mapsto état

produit une *injection* du projectif hilbertien $PC(\mathbf{H})$ dans l'ensemble des ponts extrémaux du convexe M ³³; il existe «*beaucoup*» d'états quantiques.

Les *états mélangés* définis en (e) ont évidemment les propriétés qu'on rencontre en *statistique quantique* et en *chimie quantique* — en particulier les états de Gibbs et de Hartree-Fock.

Le résultat (f) permet évidemment de faire le lien avec l'une des formulations habituelles de la mécanique quantique; notamment en utilisant la décomposition spectrale des opérateurs self-adjoints. Or notera que l'application I (voir 2.2.3) permet de donner à la définition du «*quantifié*» \hat{H} d'un hamiltonien H l'écriture suggestive:

$$[\varrho \circ I](e^{itH}) = e^{it\hat{H}}.$$

³¹ Au moins pour la topologie faible.

³² Au sens de la topologie forte du groupe unitaire de H .

³³ Ceci résulte de (2.2.10b), et du fait que les vecteurs unitaires sont tous cycliques dans le cas d'une représentation irréductible.

Mais les exemples d'états quantiques *discontinus* (ci-dessous 2.3.8) indiquent que l'utilisation des «opérateurs hamiltoniens» n'est valable dans certain cas.

2.3 Exemples

Nous allons examiner rapidement quelques exemples typiques de systèmes dynamiques quantifiés par la méthode précédente; avec, dans chaque cas, au moins un exemple d'état quantique — qui suffit à établir l'existence d'une représentation quantique irréductible.

Spin

(2.3.1)

Nous avons vu plus haut (1.10.4) que l'espace X des «mouvements propres» d'une particule à spin galiléenne est une sphère S^2 , munie de la forme symplectique

$$\sigma = s \text{ surf}$$

que la préquantification n'est possible que si $p = 2s$ est un entier — qu'on peut choisir positif; elle est unique (à une équivalence près)³⁴. Le groupe de Galilée et la règle de réduction (1.10.3) définissent un groupe générateur S de X : le groupe $SO(3)$ des rotations. Les hamiltoniens associés sont les traces sur la sphère des fonctions affines de \mathbf{R}^3 .

(2.3.2)

Théorème - *Dans tout état quantique* de ce système (2.3.1), le spectre du hamiltonien $s x_k$ («composante n° k du spin») est *discret*, et contenu dans l'ensemble à $p + 1$ éléments:

$$[-s, -s + 1, \dots, s - 1, s]$$

(2.3.3)

L'extension quantique G peut être construite comme quotient du groupe $U(2)$ par le sous-groupe discret \mathbf{Z}_p des racines p -ièmes de l'unité.

³⁴ La variété quantique est une sphère S^3 si $s = \frac{1}{2}$, un espace lenticulaire si $s \geq 1$.

(2.3.4)

Un état quantique m existe effectivement, à savoir:

$$m(u \mathbf{Z}_p) = [u_{11}]^p \quad {}^{35};$$

Dans ces état, le spectre de $s x_3$ est concentré sur la valeur $+s$ («spin up»). Le spectre de chacune des deux autres composantes $s x_1$ et $s x_2$ est réparti sur les $p+1$ valeurs permises suivant la loi de Bernoulli symétrique³⁶.

Ce n'est donc que pour les grandes valeurs du spin que cet état «ressemblera» à un état statistique «polarisé verticalement», par suite du caractère «pointu» de la loi de Bernoulli («loi des grands nombres»).

(2.3.5)

L'action du groupe compact $S = \text{SO}(3)$ sur le convexe M des états quantiques (2.2.9c), la convexité et la compacité de M , montrent que la formule:

$$m'(g) = \text{moyenne}_{s \in S} s(m)(g) \quad {}^{37}$$

définit un nouvel état quantique m' , manifestement invariant par rotation.

Dans cet état, la projection du spin sur une direction quelconque a une spectre *équiparti* sur les $p+1$ valeurs permises. C'est l'état «naturel» de spin qu'on observe dans l'expérience de Stern et Gerlach à partir d'une source non polarisée.

³⁵ $u = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}$ est une matrice unitaire; \mathbf{Z}_p est le sous-groupe des matrices $\begin{pmatrix} z & 0 \\ 0 & z \end{pmatrix}$, $z^p = 1$.

³⁶ Les probabilités constituent le développement du binôme de $\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right]^p$.

³⁷ Le calcul de $m'(u \mathbf{Z}_p)$ donne pour $s = \frac{1}{2}$:

$$\frac{1}{2} \text{Trace}(u);$$

pour $s = 1$:

$$\frac{1}{6} [\text{Trace}(u^2) + \text{Trace}(u)] .$$

Particule libre relativiste

(2.3.6)

Un mouvement classique de la particule est défini par sa ligne d'univers, qui est une droite du genre temps.

Ces droites constituent une variété X de dimension 6, sur laquelle agit transitivement le groupe de Poincaré S . A un facteur m près (la *masse* de la particule), il existe une seule structure symplectique sur X qui soit invariante par l'action de S — qui devient générateur; la préquantification est unique.

Dans un référentiel d'inertie donné, un élément s du groupe de Poincaré S pourra s'écrire

$$s = (L, e, f, g, h)$$

L désignant une matrice de Lorentz et e, f, g, h quatre réels; s agit sur les coordonnées d'espace-temps t, x, y, z selon la formule:

$$\begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto L \begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ f \\ g \\ h \end{pmatrix}$$

qui définit la loi de groupe de S .

Le sous-groupe d'Aristote correspond au cas où la matrice L «ne mélange pas l'espace et le temps»; elle s'écrit alors:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix} \quad (R: \text{matrice de rotation})$$

On peut prendre comme base de l'espace \mathcal{H} des hamiltoniens les 11 fonctions suivantes:

- (1) — l'énergie E et les trois composantes de l'impulsion \vec{p} ; ces grandeurs sont reliées par la relation:

$$E^2 - \vec{p}^2 c^2 = m^2 c^4, \quad E > 0;$$

- les trois composantes du vecteur $E \vec{r}$, \vec{r} désignant la position de la particule à la date 0;
- les trois composantes du moment cinétique par rapport au point origine:

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p};$$

- enfin la fonction constante 1.

(2.3.7)

L'extension quantique G est triviale: c'est le produit direct $S \times \mathbf{T}$. Un élément de G s'écrira donc:

$$g = (s, u) \quad (s \in S, u \in \mathbf{T}).$$

(2.3.8) Il existe un état quantique m_0 , défini par:³⁸

$$m_0(g) = \begin{cases} u \exp(ime) & \text{si } s \text{ est dans le groupe d'Aristote} \\ 0 & \text{dans le autres cas} \end{cases}$$

il est visiblement invariant par l'action du groupe d'Aristote, c'est-à-dire par les translations temporelles («état stationnaire») et par les déplacements euclidiens («état homogène et isotrope»). Par ailleurs il n'est pas continu.

On calcule facilement les spectres des hamiltoniens dans cet état — avec les résultats suivants:

- Les spectres de l'énergie E et des trois composantes de \vec{p} sont simultanément concentrés — sur les valeurs mc^2 , 0, 0, 0.³⁹

³⁸ m est la masse, e la translation temporelle qui figure dans (2.3.6).

³⁹ Ces quatre hamiltoniens engendrent un sous-groupe isotrope de Γ (notations 2.2.2, 2.2.3) — associé au groupe abélien des translations d'espace-temps. Leur image décrit une variété de dimension 3 — l'hyperboloïde de masse K d'équation (2.3.7):

$$E^2 - \vec{p}^2 c^2 = m^2 c^4, \quad E > 0;$$

par conséquent tout état quantique définit une loi de probabilité sur K . Ici, cette loi est concentrée en un point.

- Les spectres de E_x , E_y , E_z sont *équipartis sur la droite réelle*;⁴⁰
- Les trois composantes du moment cinétique \vec{p} ont chacune un spectre *équiparti sur le réseau des multiples entiers de \hbar* .

Ces équipartitions sur \mathbf{R} ou $\mathbf{Z}\hbar$ sont bien entendu décrits par le modèle probabiliste ci-dessus (voir 2.1.5).

(2.3.9)

La description d'un état doué de ces symétries (stationnaire, homogène et isotrope) au moyen d'une solution de l'équation de Klein-Gordon

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Delta \Psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0$$

consisterait à choisir:

$$\Psi(x, y, z, t) = e^{\frac{imc^2}{\hbar} t}$$

mais, même en la normalisant, cette fonction refuse d'entrer dans l'espace de Hilbert officiel.

L'axiomatique des états quantiques, par contre, donne une légitimité mathématique à l'état m_0 : il existe bien un espace de Hilbert et un représentation quantique associés.

Systèmes linéaires

(2.3.10)

Considérons un système dynamique *linéaire*, c'est-à-dire dont la variété des mouvements X est un espace vectoriel; la forme symplectique est invariante par translation.

⁴⁰ Par contre ces trois hamiltoniens ne commutent pas, n'appartiennent pas à un même sous-groupe isotrope (*effet relativiste!*); il n'existe pas de loi de probabilité pour la position de la particule dans l'espace à un instant donné. De même — et c'est plus connu — pour le moment cinétique l .

Dans ces conditions la préquantification est unique; le groupe des translations S est générateur; les hamiltoniens sont les fonctions affines sur X — que l'on peut écrire en utilisant la forme symplectique σ sous la forme:

$$H(x) = \sigma(a, x) + b \quad (a \in X, b \in \mathbf{R}).$$

Théorème:

(2.3.11) Soit m un état quantique.

— Si m possède un développement à l'ordre 2 au voisinage de l'élément neutre de G , le spectre de tout hamiltonien est une loi de probabilité classique, possédant un *écart-type fini* Δ .

— Alors, quels que soient les hamiltoniens H et H' :

$$H(x) = \sigma(a, x) + b, \quad H'(x) = \sigma(a', x) + b'$$

les écart-type Δ, Δ' de leurs spectres vérifient l'inégalité:

$$\Delta \Delta' \geq \hbar |\sigma(a, a')|$$

on reconnaît, sous forme précise, les *relations d'incertitude de Heisenberg*.

(2.3.12)

L'extension quantique G est triviale — ce qui permet de poser:

$$g = (x, z) \quad x \in X, z \in \mathbf{T}$$

le calcul donne la loi de groupe⁴¹:

$$(x, z) (x', z') = (x + x', z z' e^{-i\sigma(x, x')/2})$$

(2.3.13)

On obtient effectivement un état quantique par la procédure suivante: l'espace vectoriel X (dont la dimension est paire) peut se munir d'une structure hermitienne complexe \langle, \rangle dont la forme symplectique soit la partie imaginaire:

$$\sigma(x, y) = \text{Im}(\langle x, y \rangle)$$

alors la fonction m :

$$m(x, z) = z e^{-\langle x, x \rangle / 2}$$

est un état quantique de G .

⁴¹ G est le groupe de Heisenberg-Weyl.

Dans cet état m , le spectre d'un hamiltonien $H = \sigma(a, x) + b$ est la mesure gaussienne de centre b et d'écart-type $\Delta = \|a\|$.⁴²

Un calcul simple montre que l'inégalité d'incertitude de Heisenberg peut se réaliser *strictement* — par un choix convenable de a et a' ; m est donc ce qu'on appelle un *état cohérent*.

(2.3.14)

La représentation quantique associée à m ne dépend pas du choix de la structure hermitienne; elle est irréductible; c'est la «*représentation de Schrödinger des relations de commutation*».

Mais il existe aussi des états discontinus, qui n'appartiennent donc pas à la représentation de Schrödinger.

Jean-Marie SOURIAU - Centre de Physique Théorique, CNRS Luminy, Case 907, 13288 Marseille Cedex 9 - France.

⁴² $\|a\|$ désigne la norme hermitienne: $\|a\|^2 = \langle a, a \rangle$.