

Notes du cours de M2

Analyse microlocale

(par C. Cheverry)

Séances sur la mécanique quantique

Chapitre 1 sur

Le théorème de **Stone-Von Neumann***(motivations physiques, énoncé et idées de preuve)*

CONTENTS

0. Introduction	1
0.1. Contexte	1
0.2. Objectif	1
0.3. Motivations	2
0.4. Rappels historiques	2
1. Principes de base de la révolution quantique	3
1.1. Le rayonnement du corps noir	3
1.2. L'effet photoélectrique	3
1.3. Le modèle de Bohr	4
1.4. Confrontation du modèle de Bohr avec les observations	7
2. La mécanique matricielle	9
2.1. L'interprétation de Copenhague	9
2.2. Traduction mathématique	12
3. La mécanique ondulatoire	16
4. Le théorème de Stone Von-Neumann	19
5. Références	20

0. INTRODUCTION

On précise ici le contexte de la discussion, notre objectif et nos motivations. On dresse aussi un rapide panorama historique.

0.1. Contexte. En mécanique quantique, les observables physiques (c'est à dire les quantités mesurables) sont représentées par des opérateurs linéaires sur un espace de Hilbert noté \mathcal{H} (décrivant les états du système). C'est le cas en particulier des opérateurs de *position* Q et d'*impulsion* P . Pour des raisons expérimentales (dont on rappellera l'historique), ces opérateurs sont contraints par les relations de commutation canonique suivantes:

$$(RCC) \quad [Q, P] = QP - PQ = i\hbar Id \quad \text{où } \hbar \sim 10^{-34} \text{ est la constante de Planck réduite.}$$

0.2. Objectif. Mieux comprendre les fondements mathématiques de la mécanique quantique en classifiant l'ensemble des triplets (\mathcal{H}, Q, P) donnant accès à (RCC).

0.3. Motivations. Le rayonnement électromagnétique dont la lumière (qui occupe une très petite partie du spectre électromagnétique, à savoir les longueurs d'onde situées entre 400 à 800 nm) a toujours fasciné les physiciens et de nombreux mathématiciens. Il a permis l'essor de la vie sur Terre (via la photosynthèse); il est à l'origine de la quasi-totalité des sources d'énergie; et il donne lieu à d'innombrables applications: le feu, source de chaleur durant la préhistoire, en est un premier exemple tandis que la santé et les communications en sont des illustrations plus récentes. Sur le plan scientifique, il s'agit de l'un des phénomènes les plus complexes et les plus mystérieux à saisir. Il a été à l'origine de nombreuses révolutions scientifiques, et le sera sans doute encore. S'il est communément admis que la lumière a les propriétés d'une onde (à grandes échelles) son comportement microscopique implique aussi des aspects corpusculaires (notion de photon). En préambule, il est important d'avoir et de garder en mémoire quelques repères historiques sur les différentes conceptions de la lumière.

0.4. Rappels historiques. Une plongée rapide dans l'histoire de la lumière s'impose.

0.4.1. *Période antérieure à 1900.* C'est la période dite *classique*. Elle fait principalement ressortir les dates suivantes:

- le *Traité d'optique* d'Euclide (300 av. J.-C.);
- le *Book of Optics* de Ibn Al-Haytham (965). Jusqu'au Moyen Âge, on pensait que c'était l'oeil qui émettait la lumière et éclairait les objets. Il faudra attendre les alentours de l'an 1000 pour que le scientifique arabe Ibn Al-Haytham mette à mal cette théorie et démontre, expériences à l'appui, que l'oeil est un instrument d'optique et non pas un générateur de lumière;
- le *Traité du monde et de la lumière* de R. Descartes (1596), prise de position pour l'héliocentrisme (contre le géocentrisme);
- le *Treatise on Light* de C. Huyghens (1629), *théorie ondulatoire*;
- l'*Opticks* d'I. Newton (1642), *théorie corpusculaire* (grain de lumière);
- Retour de la théorie ondulatoire avec T. Young (1773, *polarisation* de la lumière), A. Fresnel (1788, découverte des infrarouges et des ultraviolets), J.-C. Maxwell (1831, les équations de Maxwell décrivant la propagation des champs électriques et magnétiques), H. Lorentz (1853, *éther luminifère*), H. Poincaré (1854, travaux sur la vitesse de la lumière), A. Einstein (1879, relativité).

L'interaction de la matière (plasma) et des ondes électromagnétiques est décrite à grandes échelles (... , tokamaks, magnétosphères, systèmes planétaires, galaxies, ...) par un système hyperbolique quasi-linéaire qui regroupe l'équation de A. A. Vlasov (1908-1975) et les équations de J. C. Maxwell (1831-1879). Mathématiquement, sa description implique de l'analyse des edps, des opérateurs pseudo-différentiels (autre axe du cours) ainsi que de l'analyse non linéaire.

0.4.2. *Période postérieure à 1900.* C'est la *révolution quantique*. Elle repose sur deux principes:

- L'équivalence entre *masse et énergie*:
 - $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ pour une particule d'impulsion p et de masse propre m , ce qui devient $E = mc^2$ pour une particule qui est au repos ($p = 0$) dans le référentiel galiléen;
 - Pour un photon (de masse nulle et de vitesse c dans tout référentiel galiléen - jamais au repos), on pose $E = pc$ (*relation de de Broglie*) et $E = h\nu$ (*relation de Planck-Einstein* où $h \sim 6 \times 10^{-34}$ est la constante de Planck et ν est la fréquence du rayonnement).
- La *dualité* entre les deux comportements:
 - corpusculaires: description via les *quanta* (ou encore *photons* d'énergie $E = h\nu$). Les équations de propagation sont celles de Heisenberg (écrites en 1925);
 - ondulatoires: description via les probabilités de présence des particules. Les équations de propagation sont celles de Schrödinger (écrites en 1926).

La synthèse entre ces deux modes de représentation (d'une part corpusculaire chez Heisenberg et d'autre part ondulatoire chez Schrödinger) est réalisée par le **théorème de Stone-Von Neumann** (1931) dont on présente l'énoncé et les idées dans ces notes.

1. PRINCIPES DE BASE DE LA RÉVOLUTION QUANTIQUE

Nous donnons ici quelques points de repères (voir le chapitre 1 de ce **texte**) sur les découvertes expérimentales et les idées (physiques) qui ont conduit à l'énoncé du **théorème de Stone-Von Neumann**. Dans cette première partie, ce résultat sera fourni sans démonstration. Le but est de motiver l'approche de Von Neumann, de l'ancrer dans son contexte historique, et de mieux la situer à l'interface avec la physique. Le lecteur intéressé par les développements mathématiques prolongeant ce sujet trouvera dans [7,8,9] quelques pistes de réflexion ainsi que des références.

1.1. Le rayonnement du corps noir. Travaux de M. Planck (né en 1858).

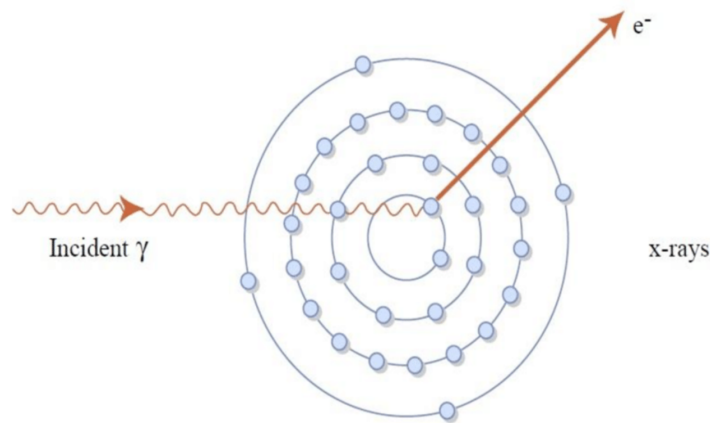
La **loi de Planck** décrit la répartition de l'énergie électromagnétique (qui est proportionnelle à la densité de photons) rayonnée par un corps noir mis à l'équilibre thermodynamique (c'est à dire ayant une température donnée) en fonction de la longueur d'onde (qui est inversement proportionnelle à l'énergie d'un photon). La **catastrophe ultraviolette** est l'expression utilisée par le physicien autrichien P. Ehrenfest pour qualifier les résultats des premières expériences qui (pour les hautes fréquences) étaient en contradiction avec la physique classique (reposant sur les lois de Wien et de Rayleigh-Jeans).

TABLEAU 1. Le rayonnement du corps noir

corps noir	température (K ou C°)	rayonnement (hz)	intensité (Cd)
trou noir	~ 0	~ 0	~ 0
barre de fer	10°	infrarouge (gris)	1
barre de fer	100°	rouge puis jaune	2
barre de fer	1000°	blanc	4
soleil	5000°	ultraviolet	catastrophe !

La **loi de Planck** permet de remédier à la **catastrophe ultraviolette** évoquée ci-dessus. Elle donne pour les hautes fréquences des prévisions plus fiables que les approches précédentes. Pour arriver à la déduire de principes fondamentaux, M. Planck adopte le point de vue selon lequel la matière chauffée peut se décrire comme un ensemble d'oscillateurs vibrants dont les échanges d'énergie sont "composés d'un nombre bien défini de parties égales". Ce quantum d'action $\Delta E = h\nu$ mesure en quelque sorte le caractère granulaire d'un échange énergétique. À l'époque, la formule n'est considérée que comme un artifice de calcul mathématique (la lumière était toujours vue comme une onde).

1.2. L'effet photoélectrique. Travaux d'A. Einstein (1879-1955) qui ont été récompensés par un prix nobel en 1921.



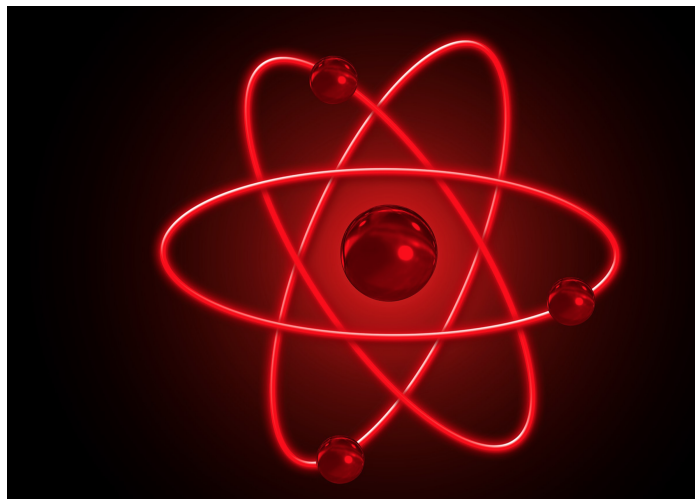
On éclaire une plaque métallique par des ondes électromagnétiques ayant une amplitude et une fréquence ν donnée. On constate que des électrons provenant des atomes du métal peuvent être émis mais que ce phénomène ne se produit que si la fréquence incidente est suffisamment élevée, lorsque celle-ci dépasse une fréquence limite appelée fréquence de seuil. Cet effet n'est pas du tout impacté par l'amplitude (qui mesure le nombre de photons impliqués) de l'onde lumineuse, qu'elle soit grande ou pas.

L'explication est la suivante. La lumière peut être modélisée comme étant formée d'un ensemble de particules élémentaires appelées photons, possédant chacune une quantité discrète d'énergie $E = h\nu$. Chaque photon interagit avec un atome. L'électron peut quitter la surface du métal lorsque le photon incident a une énergie E suffisamment élevée, dépassant le **travail de sortie** W (qui maintient l'électron près de son atome). L'amplitude quant à elle ne joue aucun rôle dans ce mécanisme (qui ne dépend pas du nombre de photons impliqués).

Si le faisceau de lumière est composé de photons ayant une fréquence inférieure à la fréquence de seuil, contrairement à ce que pouvaient prévoir certaines théories contemporaines aux travaux de Planck, l'arrachage d'électrons ne se produit pas. L'augmentation de l'amplitude de l'onde incidente implique bien une augmentation de l'énergie reçue. Mais cette accumulation est gérée différemment. L'énergie des photons de basse fréquence est d'abord absorbée par l'atome puis ré-émise sous la forme de photons (pouvant éventuellement posséder de nouvelles fréquences).

L'effet photoélectrique a fourni la première preuve expérimentale du fait que le rayonnement électromagnétique est intrinsèquement constitué de corpuscules d'énergie $h\nu$. Il a permis la naissance du **photon** de fréquence ν !

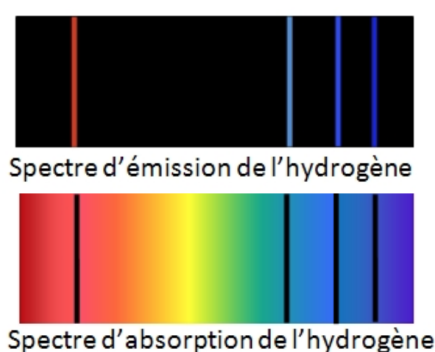
1.3. Le **modèle de Bohr**. Travaux de **N. Bohr** (né en 1885).



N. Bohr (et ses collègues) se sont interrogés sur la structure atomique de l'atome d'hydrogène (isotope ^1H : un proton et un électron). Sa théorie devenue qui est aujourd'hui devenue obsolète était établie sur un **modèle planétaire** (mis au point auparavant par Rutherford) du mouvement des électrons autour du noyau (comme la lune autour de la terre, la force électromagnétique remplaçant la force de gravitation).

Cependant, d'après les lois de Maxwell, un électron soumis à une accélération devrait émettre en continu de l'énergie sous forme de champ électromagnétique. Il devrait décrire une spirale concentrique (et non un cercle) pour finir par s'écraser sur le noyau (en une nanoseconde). Ces deux aspects (chute et émission de radiations selon un continuum de fréquences) sont en contradiction avec les observations.

On constate en effet que les différentes **raies spectrales** de l'atome d'hydrogène sont réparties de manière discrète:



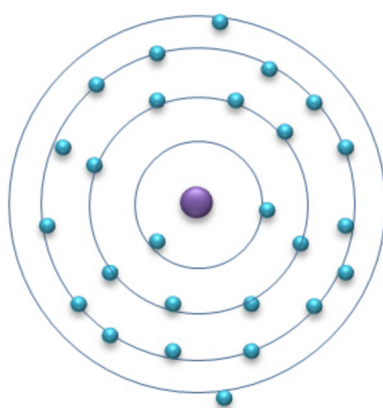
Précisément, les postulats de Bohr pour en tenir compte consistent à stipuler que:

- seules certaines orbites (dites stationnaires) sont occupées;
- l'électron ne rayonne ou n'absorbe de l'énergie que lors du passage d'une orbite à une autre.

Il s'ensuit que:

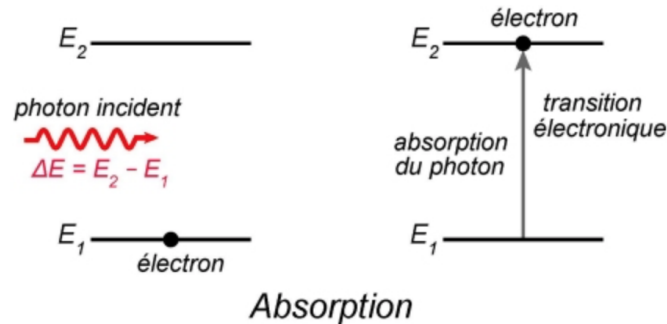
- les énergies des électrons sont quantifiées: $E_n = (-13,6\text{eV})/n^2$ avec $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$;
- les rayons des orbites sont quantifiés: r_n avec $n \in \{1, 2, 3, \dots\}$.

Différentes positions possibles de l'électron autour de son noyau



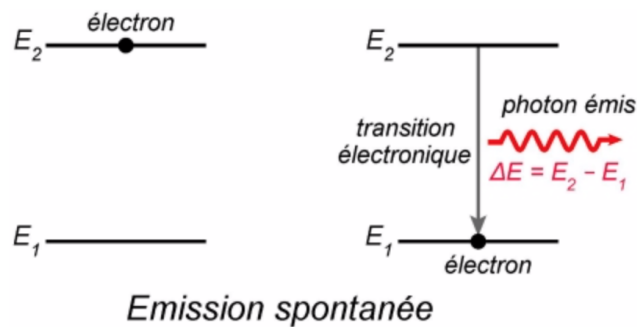
Les électrons qui tournent autour du noyau sont dits dans un **état lié** ("bound state" en anglais). Leur énergie est alors négative. L'état lié de plus basse énergie (E_1) est appelé *état fondamental*. C'est le seul à être stable. Les autres états (dits excités) sont instables. Ils peuvent transiter d'un niveau d'énergie à un autre selon les mécanismes suivants (qui permettent entre autres choses d'expliquer la couleur des objets) :

- *Absorption*. Un électron peut effectuer une transition de l'état E_n vers l'état E_m avec $m > n$ lorsqu'un photon de fréquence $\nu_{nm} \geq (E_m - E_n)/h$ frappe l'atome (avec un apport d'énergie $\Delta E = E_m - E_n$). Le cas des énergies E_1 et E_2 est décrit sur le dessin ci-dessous:



Si l'énergie $h\nu$ du photon est suffisante ($h\nu > -E_n$), l'électron situé sur la n^{iem} couche peut quitter l'atome (avec une énergie cinétique qui absorbe une part du surplus d'énergie $h\nu + E_n$). L'électron se retrouve alors dans un état non lié, et l'atome restant est ionisé.

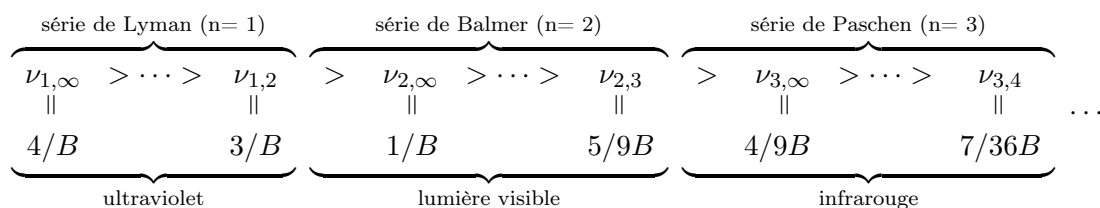
- *Émission* (spontanée). Quand un électron est dans un état excité, il peut effectuer une transition de l'état E_m vers l'état de plus basse énergie E_n avec $m > n$. Un photon est alors émis, emportant l'excédent d'énergie $\Delta E = E_m - E_n$. Le cas des énergies E_1 et E_2 est décrit sur le dessin ci-dessous:

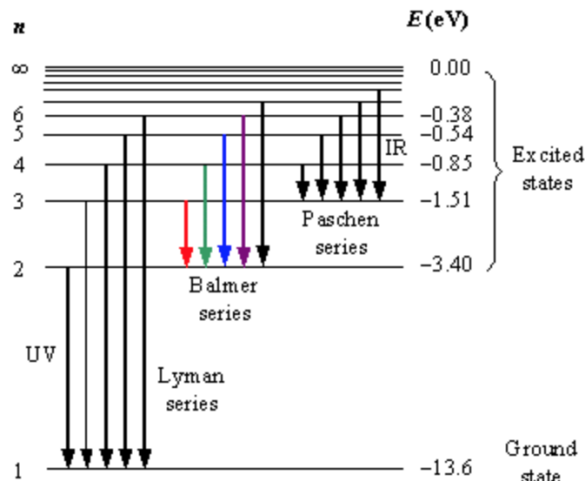
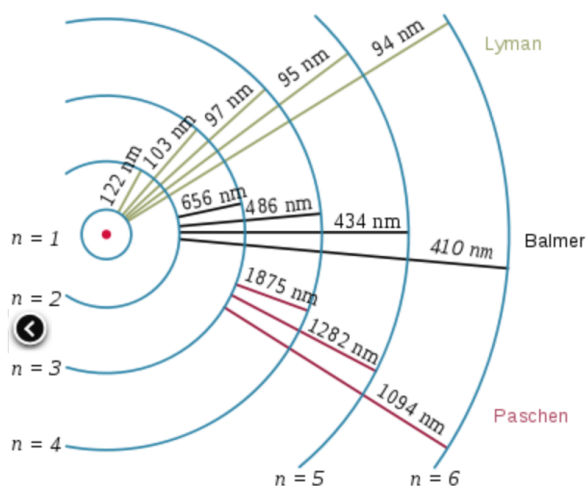


Les énergies $E_n = (-13,6\text{ev})/n^2$ ont été ajustées de manière cohérente avec les observations concernant les raies spectrales de l'atome d'hydrogène. On disposait en particulier de la formule de Balmer, améliorée ensuite en la formule de Rydberg:

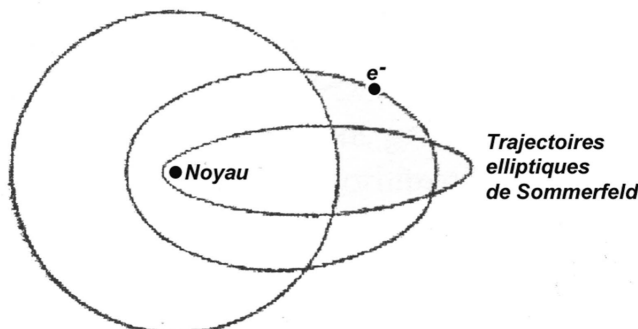
$$\lambda_{nm} = \frac{B}{4} \frac{m^2 n^2}{m^2 - n^2}, \quad \nu_{nm} = \frac{1}{\lambda_{nm}} = \frac{4}{B} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad n < m.$$

Les fréquences quantiques ν_{nm} (car correspondant aux sauts observés dans les raies spectrales) sont regroupées en "séries" (Lyman, Balmer, Paschen, ...):





Remark 1 (L'atome de Bohr-Sommerfeld). Le modèle de Bohr a juste après (en 1916) été amélioré par A. Sommerfeld (1868). Il s'agissait de pouvoir prendre un compte le (très léger) dédoublement des raies observé. A. Sommerfeld introduit pour cela des corrections relativistes et décrit les orbites non pas comme des cercles mais comme des ellipses. Il a ainsi recours à deux nombres quantiques (disons a et b) au lieu d'un seul (r) dans le cas des cercles. Les nombres a et b quantifiés en a_1, a_2, \dots et b_1, b_2, \dots sont associés à la longueur des grands et petits axes des ellipses (alors que les r_1, r_2, \dots étaient associés au rayons des cercles).



Le lecteur trouvera dans ce [texte](#) plus de détails sur l'atome de Bohr ainsi qu'une description quantique (sommaire).

1.4. Confrontation du modèle de Bohr avec les observations. Dans le modèle de Bohr, la position $q_n^c(t) \in \mathbb{R}^3$ de l'électron qui se déplace sur la $n^{\text{ième}}$ orbite effectue un mouvement périodique (un cercle). Elle est donc développable en une série de Fourier

$$(1.1) \quad q_n^c(t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} A(n, \alpha) e^{2\pi i \nu(n,1) \alpha t}, \quad A(n, -\alpha) = \bar{A}(n, \alpha).$$

On voit ainsi apparaître deux paramètres *classiques* (car correspondant à une représentation classique du mouvement de l'électron):

- les fréquences *classiques* $\nu(n, \alpha) := \nu(n, 1)\alpha$;
- les amplitudes *classiques* $A(n, \alpha)$.

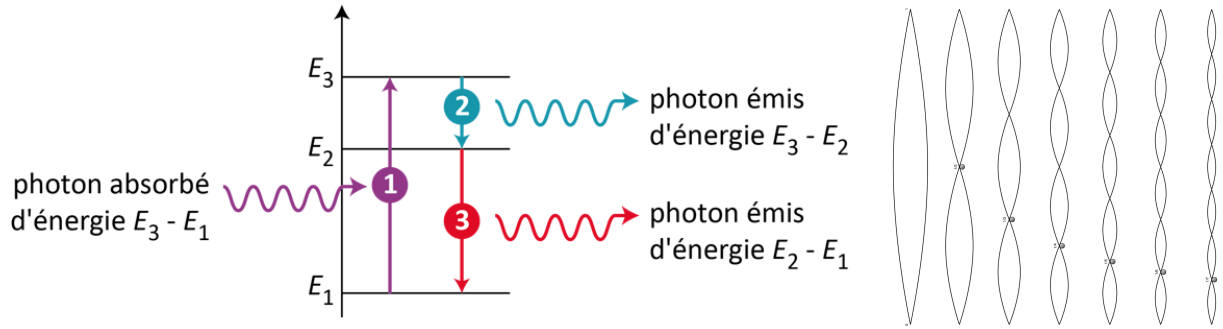
Pour diverses raisons, la fréquence quantique $\nu_{n(n-\alpha)}$ est liée à la fréquence classique $\nu(n, \alpha)$. Cette comparaison fait par exemple sens d'un point de vue asymptotique. En effet, pour α fixé et n qui tend vers $+\infty$, la formule de Rydberg indique que:

$$\nu_{n(n-\alpha)} = -\frac{8}{B n^3} \alpha + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^4}\right) \sim \nu(n, 1) \alpha = \nu(n, \alpha) \quad \text{avec} \quad \nu(n, 1) = -\frac{8}{B n^3}.$$

De même, l'amplitude quantique $A_{n(n-\alpha)}$ (disons l'intensité effective de la raie qui est observée à la fréquence $\nu_{n(n-\alpha)}$) peut être mise en correspondance avec l'amplitude classique $A(n, \alpha)$. Poussant l'analogie du côté de (1.1), on peut songer à décrire les mouvements $q_n^q(t)$ d'un électron quantique (imaginaire) situé sur la $n^{\text{ième}}$ orbite selon

$$(1.2) \quad q_n^q(t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} A_{n(n-\alpha)} e^{2\pi i \nu_{n(n-\alpha)} t}.$$

Il est utile de comparer à l'aide de deux dessins les logiques sous-jacentes à la répartition des fréquences quantiques et classiques.



Le dessin ci-dessus à gauche met en valeur les relations:

$$(E_n - E_{n-\alpha'}) + (E_{n-\alpha'} - E_{n-\alpha}) = E_n - E_{n-\alpha}$$

qui se traduisent par:

$$(1.3) \quad \nu_{n(n-\alpha')} + \nu_{(n-\alpha')(n-\alpha)} = \nu_{n(n-\alpha)}.$$

Le dessin à droite est inspiré quant à lui du modèle classique des cordes vibrantes pour lequel les fréquences sont multiples d'une fréquence fondamentale $\nu(n, 1)$. Comme $\nu(n, \alpha) = \nu(n, 1) \alpha$ pour tout $\alpha \in \mathbb{Z}$, on a:

$$(1.4) \quad \nu(n, \alpha') + \nu(n, \alpha - \alpha') = \nu(n, \alpha).$$

Remark 2 (Comparaison des structures de fréquences). *Il est important de retenir que les fréquences quantiques ν_{nj} ne satisfont pas les relations (1.4) mais (1.3). On va voir que les ν_{nj} peuvent s'interpréter comme les valeurs propres d'opérateurs. D'où l'intérêt en théorie spectrale de s'intéresser aux structures algébriques et/ou géométriques révélées par le dessin (dans \mathbb{R} ou \mathbb{C}) du spectre. Par ailleurs, notons qu'en remplaçant (1.1) par (1.2), on passe du cadre des fonctions périodiques à celui des fonctions presque périodiques, qui ont été définies durant cette période (vers 1923) par H. Bohr (mathématicien et footballeur danois, frère de Niels Bohr).*

Par contre, pour α fixé et n grand, la relation (1.4) peut être utilisée pour les $\nu_{n(n-\alpha)}$ avec un bon degré d'approximation. Ceci est dans l'esprit de la limite de correspondance de Bohr qui stipule qu'à la limite des grands nombres quantiques (ici n) caractérisant les systèmes atomiques on doit retrouver les formules de la physique classique.

Remark 3 (À propos de l'analyse semi-classique). *Cette idée de Bohr sur le passage entre physique classique et quantique a conduit à une branche des mathématiques, l'analyse semi-classique (pour laquelle c'est souvent le paramètre h qui est choisi comme tendant vers zéro). Le lecteur peut se reporter à cette présentation de Y. Colin de Verdière ou, pour une bibliographie commentée, à ce texte de B. Helfer.*

2. LA MÉCANIQUE MATRICIELLE

Il s'agit là d'une formulation de la mécanique quantique initiée par **W. Heisenberg** dans des travaux datant de 1925. Poussé par une forme de positivisme (mais **créons-nous le monde en le regardant ?**), W. Heisenberg s'affranchit (du moins en partie) du modèle conceptuel de Bohr pour ne retenir que les amplitudes effectives $Q_{nm}(t) := A_{nm} e^{2\pi i \nu_{nm} t}$ qui sont extraites du signal $q_n^q(t)$ et qui vérifient (du simple fait de leur définition):

$$(2.1) \quad i \hbar \frac{d}{dt} Q_{nm}(t) = (E_m - E_n) Q_{nm}(t), \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

2.1. L'interprétation de Copenhague. L'école de Copenhague est un courant de pensée qui considère que parler d'objets indépendamment de toute mesure n'a pas de sens. Elle a été initiée par N. Bohr, W. Heisenberg, **P. Jordan** et **M. Born** qui décident de se concentrer sur les quantités observables que sont les $Q_{nm}(t)$ et les E_n répartis dans des tableaux à double entrée:

$$Q(t) = \begin{pmatrix} Q_{11}(t) & Q_{12}(t) & \cdots & Q_{1n}(t) & \cdots \\ Q_{21}(t) & \ddots & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ Q_{n1}(t) & & & \ddots & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & E_2 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ 0 & & & \ddots & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Les **observables** que sont les matrices infinies $Q(t)$ et H peuvent être vues comme agissant sur l'espace des **états** regroupant les vecteurs de $\mathbb{C}^{\mathbb{N}}$ (ou encore les éléments d'un espace de Hilbert complexe séparable). L'opérateur $Q(t)$ est dit de position car il combine les effets des $q_n^q(t)$ en un signal complet

$$(2.2) \quad q^q(t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} q_n^q(t) = \sum_{n,m} A_{nm} e^{2\pi i \nu_{nm} t}.$$

La fonction q^q doit être à valeurs réelles, ce qui impose $A_{mn} = \bar{A}_{nm}$. Du fait de sa définition et des règles de calcul matriciel, l'observable $Q(t)$ évolue en temps selon l'*équation de Heisenberg*:

$$(2.3) \quad i \hbar \frac{d}{dt} Q = [Q, H], \quad [Q, H] := QH - HQ.$$

L'observable H qui est constante en temps et qui commute avec elle-même vérifie elle aussi (2.3). Par ailleurs, par analogie avec la situation classique, on peut déduire de (1.2) une quantité de mouvement quantique, ou impulsion, notée $p_n^q(t)$ et donnée par:

$$(2.4) \quad p_n^q(t) = m \frac{d}{dt} q_n^q(t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} P_{n(n-\alpha)}(t), \quad P_{nm}(t) := 2\pi i m \nu_{nm} A_{nm} e^{2\pi i \nu_{nm} t}.$$

De nouveaux, les coefficients $P_{nm}(t) = \bar{P}_{mn}(t)$ sont solutions de (2.1), tandis que l'observable $P(t) := (P_{nm}(t))_{nm}$ qui en découle vérifie (2.3). L'opérateur $P(t)$ est dit d'impulsion car il combine les effets de tous les $p_n^q(t)$. On peut d'ailleurs sommer en n les $p_n^q(t)$ pour obtenir $p^q(t)$ qui est le signal complet observé.

On voit ainsi apparaître les premiers prémisses des **postulats de la mécanique quantique** (qui seront axiomatisés par J. Von Neumann en 1932 dans son livre **Mathematical Foundations of Quantum Mechanics**), selon lesquels:

Toutes les observables évoluent en temps selon l'équation de Heisenberg (2.3).

En mécanique classique, les quantités physiques que sont l'énergie, les moments cinétiques, les moments magnétiques ... peuvent être déterminées à l'aide des positions q et des impulsions p . A titre d'exemple, pour l'oscillateur harmonique (le ressort), l'énergie est donnée par l'hamiltonien:

$$H(q, p) = \frac{1}{2} (q^2 + p^2).$$

Mais comment récupérer l'observable H à l'aide des observables Q et P ? Par extrapolation, on peut songer à regarder:

$$H(q^q(t), p^q(t)) = \frac{1}{2} (q^q(t)^2 + p^q(t)^2).$$

Compte tenu de la structure (2.2) des signaux impliqués, cela amène à considérer des produits du type

$$(2.5) \quad \left(\sum_{n,m} A_{nm} e^{2\pi i \nu_{nm} t} \right) \left(\sum_{p,q} B_{pq} e^{2\pi i \nu_{pq} t} \right) \\ = \sum_{m \neq p} A_{nm} B_{pq} e^{2\pi i (\nu_{nm} + \nu_{pq}) t} + \sum_{n,q} \left(\sum_m A_{nm} B_{mq} \right) e^{2\pi i \nu_{nq} t}$$

où la loi (1.3) a été exploitée pour obtenir des simplifications. Le membre de droite est "presque" de la forme (2.2), mais pas complètement ...

Remark 4 (Règles de composition). *De telles considérations non linéaires sont typiques des calculs d'optique géométrique [5]. On observe une sommation des fréquences et une multiplication des coefficients. Dans ce processus, la relation (1.3) exprime une résonance (ou corrélation de fréquences). Elle met l'accent sur les coefficients d'amplitude situés à droite de (2.5), à savoir:*

$$(2.6) \quad (AB)_{nq} = \sum_m A_{nm} B_{mq}$$

tandis que la somme faisant intervenir les indices $m \neq p$ (qui n'est pas compatible avec les écritures précédentes) peut à ce titre être négligée.

Les raisons précises ayant poussé W. Heisenberg à s'intéresser à la règle de composition (2.6) (sans pour autant connaître les règles de composition matricielle) sont évoquées et analysées dans [2]. Il ressort de ce qui précède que l'intérêt et la nécessité de recourir à un calcul matriciel s'impose au travers de deux types de considérations: *linéaires* au niveau de (2.3) et *non linéaires* à propos de (2.6). La solution de (2.3) est non stationnaire (donc non triviale) lorsque les observables Q et H ne commutent pas.

Dans le cas d'école fournit par l'oscillateur harmonique quantique pour lequel

$$H = \frac{1}{2} (Q^2 + P^2) \quad (\text{oscillateur harmonique quantique}),$$

étudier le terme source de (2.3) revient à savoir commuter Q et P . Soutenu par N. Bohr, le groupe formé de M. Born, P. Jordan et de W. Heisenberg s'attelle à la tâche et en arrive à la conclusion que les observables de position Q et d'impulsion P doivent vérifier les relations de commutation canonique (en abrégé RCC) suivantes:

$$(2.7) \quad [P, P] = 0, \quad [Q, Q] = 0, \quad [P, Q] = -i\hbar Id.$$

Remark 5. *En dimension d d'espace, les positions et impulsions sont indexées par $i \in \{1, \dots, d\}$. On travaille avec P_i et Q_i et il y a $3d^2$ relations à écrire qui sont:*

$$(2.8) \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [Q_i, Q_j] = 0, \quad [P_i, Q_j] = -i\hbar Id \delta_{ij}.$$

C'est P. Dirac qui (vers 1925) fera le lien entre (2.8) et la relation $\{p, q\} = 1$ vérifiée en mécanique Hamiltonienne par le crochet de Poisson $\{p, q\}$ impliquant des variables classiques q et p qui sont canoniquement conjuguées. Pour un système à d degrés de liberté, les d coordonnées q_i de q définissent la position d'un point q sur une variété différentielle \mathcal{V} à d dimensions. Le moment conjugué p est un élément de l'espace cotangent $T_p^* \mathcal{V}$. Les $2d$ coordonnées de (q, p) représentent un point dans l'espace des phases $T^* \mathcal{V}$ qui est naturellement muni de la forme symplectique:

$$\sigma := \sum_{i=1}^d dq_i \wedge dp_i.$$

On dit de la transformation $\mathcal{T} : T^*\mathcal{V} \rightarrow T^*\mathcal{V}$ qu'elle est canonique lorsqu'elle respecte la structure symplectique. Etant donnée une fonction $f : T^*\mathcal{V} \rightarrow T^*\mathcal{V}$, la question se pose de savoir comment lui associer (disons naturellement) un opérateur sur $L^2(\mathcal{V})$. C'est le problème de la **quantification géométrique** (dite parfois canonique) qui cherche à connecter d'une part les variétés symplectiques (vues comme des espaces de phases, penser à $T^*\mathcal{V}$) et leurs transformations canoniques \mathcal{T} avec d'autre part les espaces de Hilbert \mathcal{H} - songer à $L^2(\mathcal{V})$ - et les opérateurs unitaires $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ associés. Le passage des quantités physiques classiques aux observables quantiques doit obéir au **principe de correspondance**. Dans le cas $d = 1$ et $\mathcal{V} \equiv \mathbb{R}$, les règles de base consistent à associer à la coordonnée q l'opérateur (non borné) de multiplication $q \times$ et à la coordonnée p l'opérateur (non borné) de dérivation $-i\hbar\partial_q$. On considère ainsi les actions:

$$\begin{aligned} q \times : \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}) & -i\hbar\partial_q : \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}) \\ f(q) &\mapsto q \times f(q), & f(q) &\mapsto -i\hbar\partial_q f(q). \end{aligned}$$

Plus généralement, on dispose du tableau ci-dessous.

TABLEAU 2. Correspondances entre observables classiques et quantiques

Quantité physique a	Observable A
Position x, y, z, r	Multiplication par x, y, z, r
Energie potentielle $V(r)$	Multiplication par $V(r)$
Impulsion p_x, p_y, p_z	Dérivations $-i\hbar\partial_x, -i\hbar\partial_y, -i\hbar\partial_z$
Vecteur impulsion p	Gradient $-i\hbar \nabla$
Energie cinétique $E_c = p ^2/(2m)$	Laplacien $-\hbar^2\Delta/(2m)$
Energie totale $E = E_c + V(r)$	Hamiltonien $-\hbar^2\Delta/(2m) + V(r)$
Moment cinétique orbital $L = r \times p$	$L = -i\hbar r \times \nabla$

Remark 6 (Sur la liste des observables). *Il existe des observables quantiques qui ne sont pas directement issues d'observables classiques (c'est à dire de fonctions de q et de p). C'est le cas par exemple du **spin** qui, au même titre que la masse ou la charge électrique, exprime une propriété interne des particules. Il s'ensuit que l'espace des états associé à une particule quantique située dans \mathcal{V} est en fait plus gros que $L^2(\mathbb{R})$. Il se présente typiquement sous la forme $L^2(\mathbb{R}) \times \mathbb{C}^n$ pour un certain $n \in \mathbb{N}^*$.*

*Le spin est souvent assimilé à un moment cinétique intrinsèque. Il est aussi parfois associé aux notions de **polarisation** et d'**hélicité** qui s'en déduisent. Il peut aussi être obtenu à l'aide de considérations plus géométriques. Il peut en effet être décrit via les représentations unitaires irréductibles du groupe $SU(2)$, voir [10]-paragraphe 3.5.*

Remark 7 (Sur l'interprétation d'observables classiques plus générales). *Les fonctions impliquées à gauche du tableau mettent toutes en jeu des produits dont les observables associées commutent. C'est vrai y compris pour les composantes du moment cinétique orbital, par exemple $xp_y - yp_x$. Du coup, il n'y a pas de question à se poser sur la droite du tableau quant à la manière de les représenter comme opérateurs. Mais quel choix faudrait-il effectuer pour ce qui est de $xp_x = p_x x$. Prendre QP ou PQ sachant que $QP \neq PQ$? Il y a une ambiguïté sur l'ordre des opérations qui sera discutée ultérieurement.*

Remark 8 (Deux significations sont à retenir et à bien savoir distinguer concernant l'emploi du terme **quantification**). *Dans le domaine de la physique mathématique, le mot "quantification" peut recouvrir deux sens bien distincts. Les notes de cours d'I. Todorov expliquent, après un rapide historique, la nuance entre ces deux thèmes:*

- La *quantification géométrique* (dite aussi parfois canonique) évoquée précédemment. Cette démarche peut s'interpréter comme une approche formelle (fondée sur la géométrie symplectique) destinée à transiter de la mécanique classique à la mécanique quantique. C'est la gestion du passage des "symboles" aux "opérateurs";

- La *seconde quantification*. Cette seconde méthode fournit une description quantique d'un système à plusieurs particules à partir de celle (déjà quantique) d'une seule particule. Ce dernier système peut comporter un nombre N fini de particules (*problème à N corps*) ou encore un nombre possiblement infini de particules (pour tenir compte de la création spontanée de particules). La seconde quantification construit un foncteur de la catégorie des espaces de Hilbert dans elle-même qui envoie un espace de Hilbert \mathcal{H} vers son *espace de Fock* $\Gamma(\mathcal{H})$.

Le passage entre classique et quantique se fait aussi au niveau des équations du mouvement. L'équation de Heisenberg (2.3) peut être vue comme une extension de l'équation de Liouville. Quoi qu'il en soit, la contrainte (2.7) est un prérequis. Et on aimerait savoir dans quel cadre fonctionnel elle est susceptible de se concrétiser.

Question 9. *Quels sont (à isomorphisme près) l'ensemble des triplets (\mathcal{H}, Q, P) formés de deux opérateurs auto-adjoints Q et P qui agissent (en qualité d'opérateurs non bornés) sur l'espace de Hilbert complexe \mathcal{H} et qui sont compatibles avec (2.7). Et comment les construire ?*

2.2. Traduction mathématique. Le point de départ est (2.7).

Lemma 10. *On suppose (2.7). Alors \mathcal{H} est de dimension infinie.*

C'est une motivation pour étudier les espaces vectoriels de dimension infinie !

Preuve. Comme observé par H. Weyl, dans le cas contraire, en prenant la trace de (2.7), on obtient $0 = -i\hbar \dim \mathcal{H}$ ce qui est absurde. □

Lemma 11. *On suppose (2.7). Alors les opérateurs Q et P sont non bornés.*

C'est une motivation pour étudier les opérateurs non bornés !

Preuve. On raisonne par l'absurde. Par symétrie, on peut partir de l'hypothèse que Q est borné. Comme $P = P^*$, l'action de $e^{\pm itP/\hbar}$ est unitaire (c'est le *théorème de Stone* sur les semi-groupes unitaires - à connaître). Par ailleurs:

$$(2.9) \quad e^{itP/\hbar} Q e^{-itP/\hbar} = Q + tId, \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

C'est en effet vrai pour $t = 0$. Et, du fait de (2.7), la dérivée en temps des termes de gauche et de droite coïncident. Le terme à gauche de (2.9) est uniformément borné en temps. Par contre, le terme de droite ne l'est clairement pas. C'est la contradiction recherchée. □

Il s'ensuit que la relation (2.7) ne peut être envisagée que pour des opérateurs non bornés agissant sur un espace \mathcal{H} de dimension infinie, avec toutes les subtilités [4] qui en découlent ! Le premier écueil concerne déjà le test de la RCC. Que dire en effet de PQ si l'image de Q n'est pas dans le domaine de définition de P ?

Une manière de contourner ces difficultés consiste à interpréter (2.7) du côté exponentiel. Un des avantages ainsi gagnés tient à ce que les domaines des opérateurs (bornés) que sont $e^{\pm isQ/\hbar}$ et $e^{\pm itP/\hbar}$ sont l'espace \mathcal{H} tout entier. On se trouve ainsi amené à manipuler les opérateurs auxiliaires que sont:

$$(2.10) \quad U_s := e^{isQ/\hbar} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}), \quad V_t := e^{-itP/\hbar} \in \mathcal{U}(\mathcal{H})$$

qui conduisent à une version exponentielle des RCCs.

Definition 12. [*Relations de commutation de Weyl*] Il s'agit de la relation:

$$(2.11) \quad U_s V_t = e^{ist/\hbar} V_t U_s, \quad \forall (s, t) \in \mathbb{R}^2.$$

Il y a un argument heuristique donnant (2.11) à partir de (2.9). Il suffit en effet de développer U_s en une somme formelle puis d'utiliser (2.9) en vue de récupérer:

$$\begin{aligned} V_t^{-1} U_s V_t &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} V_t^{-1} \left(\frac{isQ}{\hbar} \right)^n V_t = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^n V_t^{-1} Q^n V_t = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^n (V_t^{-1} Q V_t)^n \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^n (Q + tId)^n = e^{is(Q+tId)/\hbar} = e^{ist/\hbar} U_s. \end{aligned}$$

Remark 13. *Attention, le raisonnement tenu ci-dessus n'est pas correct. En effet, pour $n > 2$, l'opérateur Q^n n'est pas (toujours) bien défini (car Q est un opérateur non borné dont l'image n'est pas forcément contenue dans le domaine de Q).*

Le passage de (2.9) à (2.11) n'est pas complètement rigoureux. Pour mieux s'en convaincre, il convient de fournir un contre-exemple. On prend $\mathcal{H} = L_p^2([-1, 1])$ qui est L^2 avec des conditions périodiques au bord. On travaille avec $Q = x \times$ et $P = -i\hbar \partial_x$. On obtient $U_s = e^{isx/\hbar} \times$. Par ailleurs (pour tout $n \in \mathbb{N}$), on a:

$$V_t e^{i\pi n x} = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{j!} \left(\frac{-itP}{\hbar} \right)^j e^{i\pi n x} = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{1}{j!} (-i\pi n t)^j e^{i\pi n x} = e^{-i\pi n t} e^{i\pi n x} = e^{i\pi n(x-t)}.$$

La position $x - t$ n'est pas forcément dans l'intervalle $[-1, 1]$ mais elle le devient par translation. Soit $m_{t,x}$ l'unique entier vérifiant $-1 \leq x - t - 2m_{t,x} \leq 1$. Alors:

$$e^{i\pi n(x-t)} = e^{i\pi n(x-t-2m_{t,x})}.$$

Comme la suite des $\psi_n(x) := e^{i\pi n x}$ avec $n \in \mathbb{N}$ est dense dans $L_p^2([-1, 1])$, on a

$$V_t \equiv S_{-t}, \quad (S_{-t}\psi)(x) := \psi(x - t - 2m_{t,x}).$$

On trouve alors:

$$U_s V_t \psi_0 = U_s S_{-t} \psi_0 = U_s \psi_0 = e^{isx/\hbar}.$$

Par ailleurs:

$$e^{ist/\hbar} V_t U_s \psi_0 = e^{ist/\hbar} S_{-t} e^{isx/\hbar} = e^{ist/\hbar} e^{is(x-t-2m_{t,x})/\hbar} = e^{isx/\hbar} e^{-2ism_{t,x}/\hbar}.$$

On constate ici qu'en général $U_s V_t \neq e^{ist/\hbar} V_t U_s$.

Remark 14. *Notons toutefois que, sous des hypothèses raisonnables, on peut déduire (2.11) de (2.9). C'est le théorème de Nelson, voir [8] - p. 15.*

On va considérer (2.11) comme un substitut de (2.9). Dans le prolongement de (2.11), on définit alors l'opérateur unitaire

$$\rho(t, s, r) := e^{ir/\hbar} V_t U_s \in \mathcal{U}(\mathcal{H}) := \{A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}); A^{-1} = A^*\}.$$

Par construction, on a:

$$\begin{aligned} \rho(t_1, s_1, r_1) \rho(t_2, s_2, r_2) &= (e^{ir_1/\hbar} V_{t_1} U_{s_1}) (e^{ir_2/\hbar} V_{t_2} U_{s_2}) \\ &= e^{i(r_1+r_2)/\hbar} V_{t_1} (U_{s_1} V_{t_2}) U_{s_2} \\ (2.12) \quad &= e^{i(r_1+r_2+s_1 t_2)/\hbar} V_{t_1+t_2} U_{s_1+s_2} \\ &= \rho(t_1 + t_2, s_1 + s_2, r_1 + r_2 + s_1 t_2). \end{aligned}$$

Remark 15. *Introduisons le groupe de matrices*

$$(2.13) \quad \text{Heis}(\mathbb{R}) := \left\{ \begin{pmatrix} 1 & s & r \\ 0 & 1 & t \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; (s, r, t) \in \mathbb{R}^3 \right\}.$$

La loi de composition de ces matrices 3×3 unipotentes s'écrit:

$$\begin{pmatrix} 1 & s_1 & r_1 \\ 0 & 1 & t_1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & s_2 & r_2 \\ 0 & 1 & t_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & s_1 + s_2 & r_1 + r_2 + s_1 t_2 \\ 0 & 1 & t_1 + t_2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Elle se traduit par des règles de composition analogues à (2.12):

$$(s_1, r_1, t_1) \circ (s_2, r_2, t_2) = (s_1 + s_2, r_1 + r_2 + s_1 t_2, t_1 + t_2).$$

L'ensemble $\text{Heis}(\mathbb{R})$ muni de la composition des matrices est appelé le *groupe de Heisenberg* d'ordre trois associé à \mathbb{R} . On peut aussi regarder $\text{Heis}(\mathbb{R})$ comme l'*algèbre de Lie* \mathfrak{h}_1 dont l'exponentielle définit un groupe de Lie (le groupe de Heisenberg à proprement parler). Du point de vue algébrique, le recours à l'exponentielle, concrétisé au niveau de (2.10), est ce qui fait passer de l'algèbre de Lie au groupe de Lie. Le lecteur intéressé peut se reporter aux *notes de cours* d'O. Schiffmann [9].

Le choix de ρ effectué ci-dessus ne fait pas jouer un rôle symétrique à s et t . On peut lui préférer la version plus symétrique suivante:

$$(2.14) \quad \varrho(t, s, r) := e^{i(r+st/2)/\hbar} V_t U_s$$

qui fournit

$$(2.15) \quad \varrho(0, 0, r) = e^{ir/\hbar} \text{Id}_{\mathcal{H}},$$

ainsi que

$$(2.16) \quad \begin{aligned} \varrho(t_1, s_1, r_1) \varrho(t_2, s_2, r_2) &= (e^{i(r_1+s_1 t_1/2)/\hbar} V_{t_1} U_{s_1}) (e^{i(r_2+s_2 t_2/2)/\hbar} V_{t_2} U_{s_2}) \\ &= e^{i(r_1+r_2+s_1 t_1/2+s_2 t_2/2)/\hbar} V_{t_1} (U_{s_1} V_{t_2}) U_{s_2} \\ &= e^{i(r_1+r_2+s_1 t_1/2+s_2 t_2/2+s_1 t_2)/\hbar} V_{t_1+t_2} U_{s_1+s_2} \\ &= e^{i[(r_1+r_2)+(s_1+s_2)(t_1+t_2)/2+(s_1 t_2-s_2 t_1)/2]/\hbar} V_{t_1+t_2} U_{s_1+s_2} \\ &= \varrho(t_1 + t_2, s_1 + s_2, r_1 + r_2 + (s_1 t_2 - s_2 t_1)/2). \end{aligned}$$

Les variables s et t étant respectivement associées à la position (Q) et à l'impulsion (P), elles sont duales l'une de l'autre. La formule (2.16) met l'accent sur la *forme symplectique*

$$\sigma((t_1, s_1), (t_2, s_2)) = (t_1, s_1) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_2 \\ s_2 \end{pmatrix} = (s_1 t_2 - s_2 t_1)$$

ce qui incite à regarder les vecteurs $v = (t, s) \in \mathbb{R}^2$ comme étant les éléments d'un espace symplectique de dimension deux.

Definition 16 (Algèbre de Heisenberg d'un espace vectoriel symplectique). *Etant donné un espace symplectique (E, σ) , il s'agit de l'algèbre de Lie donnée par $\text{heis}(E, \sigma) = E \oplus \mathbb{R}e_0$ muni du crochet de Lie*

$$[v_1 + r_1 e_0, v_2 + r_2 e_0] = \sigma(v_1, v_2) e_0.$$

Remark 17. Les vecteurs $Q = (1, 0)$ et $P = (0, 1)$ forment une base symplectique de $E = \mathbb{R}^2$ dont les représentants $\tilde{Q} = Q + 0 \times e_0$ et $\tilde{P} = P + 0 \times e_0$ dans $\text{heis}(E, \sigma)$ satisfont à:

$$[\tilde{P}, \tilde{P}] = 0, \quad [\tilde{Q}, \tilde{Q}] = 0, \quad [\tilde{P}, \tilde{Q}] = \sigma((0, 1), (1, 0)) e_0 = e_0.$$

Ainsi l'algèbre de Heisenberg permet de conceptualiser (2.7) tout en faisant le lien avec une structure symplectique sous-jacente.

Remark 18. On a

$$[[v_1 + r_1 e_0, v_2 + r_2 e_0], v_3 + r_3 e_0] = 0,$$

ce qui montre que $\text{heis}(E, \sigma)$ est une algèbre de Lie nilpotente de rang deux.

Definition 19 (Groupe de Heisenberg - Version symplectique). *Le groupe de Heisenberg sur l'espace symplectique (E, σ) est le groupe $\mathcal{N} = E \oplus \mathbb{R}e_0$ muni de la loi de composition*

$$(2.17) \quad (v_1 + r_1 e_0) \circ (v_2 + r_2 e_0) = v_1 + v_2 + (r_1 + r_2 + \sigma(v_1, v_2)/2)e_0, \quad (v_i, r_i) \in E \times \mathbb{R}.$$

Dans le cas particulier de la dimension deux, lorsque $E = \mathbb{R}^2$, on peut identifier $v + r e_0$ avec le triplet (t, s, r) de sorte que:

$$(v_1 + r_1 e_0) \circ (v_2 + r_2 e_0) = (t_1 + t_2, s_1 + s_2, r_1 + r_2 + \sigma(v_1, v_2)/2).$$

Definition 20 (Représentation unitaire). *Une représentation unitaire du groupe (\mathcal{N}, \circ) est un morphisme de groupe ϱ de \mathcal{N} dans l'ensemble $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ des opérateurs unitaires sur \mathcal{H} . Autrement dit $\varrho : \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ et on a:*

$$(2.18) \quad \varrho(v_1 + r_1 e_0) \varrho(v_2 + r_2 e_0) = \varrho((v_1 + r_1 e_0) \circ (v_2 + r_2 e_0)).$$

La représentation est dite non triviale lorsqu'elle n'est pas (constante) égale à l'identité. Elle est irréductible s'il n'existe pas de sous-espace de \mathcal{H} différent de $\{0\}$ ou \mathcal{H} qui est globalement invariant par $\varrho(\mathcal{N})$.

Pour $E = \mathbb{R}^2$, posant $\varrho(t_i, s_i, r_i) = \varrho(v_i + r_i e_0)$, on peut reconnaître en (2.16) la formule (2.18). Du coup, la question 9 se prolonge en un problème de classification.

Question 21. *Quelles sont toutes les représentations unitaires du groupe de Heisenberg \mathcal{N} sur un espace symplectique (E, σ) qui satisfont à (2.15) ?*

Remark 22. *La description (2.13) de Heis(\mathbb{R}) est à valeurs dans le groupe spécial linéaire $SL(3)$. Elle n'est cependant pas unitaire. Elle ne remplit donc pas le cahier des charges de la question 21. Mentionnons aussi l'existence de la *représentation theta*.*

Avant de poursuivre plus loin, on va regarder les choses sous un angle légèrement différent. Pour cela, on a besoin du résultat préliminaire suivant (parfois appelé formule de Glauber) qui peut être vu comme un cas particulier de la *formule de Baker-Campbell-Hausdorff*.

Lemma 23. *[Formule de Glauber] Soient $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ et $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ deux opérateurs linéaires continus qui commutent avec leur commutateur. Autrement dit*

$$(2.19) \quad [A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0.$$

Alors:

$$(2.20) \quad e^A e^B = e^{A+B+[A,B]/2}.$$

Preuve. Si on remplace A par tA et B par tB avec $t \in \mathbb{R}$ dans (2.20), on récupère une formule plus générale, à savoir

$$(2.21) \quad e^{tA} e^{tB} = e^{t(A+B)+t^2[A,B]/2}.$$

En exploitant (2.19), cela s'interprète en

$$h(t) = e^{t(A+B)}, \quad h(t) := e^{tA} e^{tB} e^{-t^2[A,B]/2}.$$

Le calcul fournit

$$h'(t) = e^{tA} A e^{tB} e^{-t^2[A,B]/2} + e^{tA} e^{tB} B e^{-t^2[A,B]/2} - t e^{tA} e^{tB} e^{-t^2[A,B]/2} [A, B].$$

Par ailleurs, toujours à l'aide de (2.19), on a

$$\frac{d}{dt}(e^{-tB} A e^{tB}) = e^{-tB} [A, B] e^{tB} = [A, B],$$

ce qui donne après intégration

$$e^{-tB} A e^{tB} = A + t[A, B]$$

puis

$$e^{tA} A e^{tB} = e^{tA} e^{tB} e^{-tB} A e^{tB} = e^{tA} e^{tB} (A + t[A, B]).$$

On a donc

$$h'(t) = h(t) (A + t[A, B] + B - t[A, B]) = h(t) (A + B),$$

et évidemment $h(0) = Id$. La fonction h vérifie donc la même EDO que $e^{t(A+B)}$ et partage la même condition initiale. Les deux expressions doivent donc coïncider. □

Au lieu de travailler avec U_s et V_t puis ϱ comme en (2.14), on peut préférer avoir recours à

$$\tilde{\rho}(t, s, r) := e^{i(tQ+sP+rId)/\hbar} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}).$$

Comme

$$[t_2Q + s_2P + r_2Id, t_1Q + s_1P + r_1Id] = t_2s_1[Q, P] + s_2t_1[P, Q] = i\hbar(s_1t_2 - s_2t_1),$$

la formule de Glauber donne directement accès aux lois du groupe de Heisenberg, à savoir

$$\tilde{\rho}(t_2, s_2, r_2) \tilde{\rho}(t_1, s_1, r_1) = \tilde{\rho}(t_1 + t_2, s_1 + s_2, r_1 + r_2 + (s_1t_2 - s_2t_1)/2).$$

On peut aussi interpréter les manipulations précédentes sous l'angle de l'analyse complexe. Etant donné $z = s + it$ et $z' = s' + it'$, on pose alors

$$W_z := e^{-i(sP-tQ)}, \quad W_{z'} := e^{-i(s'P-t'Q)}.$$

Avec $A = -i(sP - tQ)$ et $B = -i(s'P - t'Q)$, on obtient pour commutateur

$$[A, B] = -[sP - tQ, s'P - t'Q] = st'[P, Q] + ts'[Q, P] = i\hbar(ts' - st') Id$$

qui commute à l'évidence avec A et B . Bien que les opérateurs $sP - tQ$ et $s'P - t'Q$ ne soient pas bornés, on va (comme au niveau de la définition 12) passer outre les complications liées aux domaines des opérateurs. On applique le Lemme 23. On récupère ainsi

$$(2.22) \quad W_z W_{z'} = e^{i\hbar(ts' - st')/2} W_{z+z'} = e^{-i\hbar \text{Im}(zz')/2} W_{z+z'} = e^{-i\hbar \text{Im}\langle z, z' \rangle/2} W_{z+z'}.$$

C'est là une nouvelle version des lois de commutation de Weyl suivant laquelle W apparaît comme une représentation projective du groupe $(\mathbb{C}, +)$. Selon le contexte, il est ainsi préférable de manipuler les choses sous leurs facettes réelles et symplectiques via (12) ou préférer leur formulation complexe (2.22).

3. LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE

Il s'agit là des recherches initiées par E. Schrödinger à partir de 1926. Mais il convient de citer d'abord les travaux précurseurs de L. De Broglie (menés en 1924 dans le cadre d'une thèse sur la nature ondulatoire des électrons). L. De Broglie est un mathématicien et physicien français qui adopta le point de vue opposé à celui qui va de l'onde à la particule, c'est à dire selon lequel:

À toute particule matérielle de masse m et de vitesse v doit être associée une onde réelle.

Une onde peut être représentée par une fonction $\psi(t, x)$ définie sur l'espace-temps. A supposer qu'elle soit suffisamment localisée et intégrable, elle peut être interprétée à l'instant t comme appartenant à $L^2(\mathbb{R}^d)$, avec $d = 1$ ou 2 ou 3 selon la dimension du phénomène étudié. Une vision de type "objet discret" peut toujours être réinstaurée par la sélection d'une base orthonormale $e_1, e_2, \dots, e_n, \dots$ de l'espace $L^2(\mathbb{R}^d)$, souvent notée $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle, \dots$ par les physiciens. Cette base admet une base duale $\langle e_1|, \langle e_2|, \dots, \langle e_n|, \dots$ caractérisée par

$$\langle e_i | e_j \rangle \equiv (e_i, e_j) = \int_{\mathbb{R}^d} \bar{e}_i(x) e_j(x) dx = \delta_{ij}, \quad \forall (i, j) \in \mathbb{N}^2.$$

Tout élément $\psi(t, \cdot)$ de $L^2(\mathbb{R}^d)$ se décompose en

$$\psi(t, \cdot) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t) |e_n\rangle, \quad c_n(t) := \langle e_n | \psi(t, \cdot) \rangle.$$

On peut ainsi identifier les états $\psi(t, \cdot) \in \mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^d)$ aux vecteurs $(c_n(t))_n \in \ell^2(\mathbb{N}; \mathbb{C}) \subset \mathbb{C}^{\mathbb{N}}$. Le point de vue de Schrödinger consiste à fixer les observables, et à voir les états comme des ondes $\psi(t, \cdot) \in L^2(\mathbb{R}^d; \mathbb{C})$ qui se déplacent conformément à :

$$(3.1) \quad i \hbar \partial_t \psi = H \psi, \quad H : \text{Dom}(H) \subset L^2 \rightarrow L^2.$$

Pour simplifier, on va supposer que l'opérateur H ne dépend pas du temps. Pour un électron de l'atome soumis au potentiel électromagnétique $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ créé par les protons du noyau, on peut prendre en première approximation :

$$(3.2) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(x), \quad \Delta_x = \sum_{j=1}^d \partial_{x_j}^2, \quad V \in C^\infty(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}).$$

On voit ici que l'action de H se fait typiquement au travers d'un opérateur autoadjoint non borné [4]. Le choix de H provient souvent d'une formulation lagrangienne ou hamiltonienne des équations. L'observable H correspond à une grandeur d'énergie. L'état du système évolue selon :

$$\psi(t) = W(t)\psi(0), \quad W(t) := e^{-itH/\hbar}.$$

Cela signifie que l'opérateur H joue le rôle (au sens du [théorème de Stone](#) [4]) d'un *générateur* des translations des fonctions d'onde en temps. Connaissant H , un choix particulièrement bien adapté (du point de vue des interprétations physiques) consiste à sélectionner (lorsqu'elle existe, se reporter au cours de théorie spectrale) la base des vecteurs propres $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle, \dots$ (associés aux valeurs propres E_n) qui sont générés par H . On récupère alors :

$$W(t)\psi(0) = \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-itE_n/\hbar} c_n(0) |e_n\rangle.$$

Remark 24 (Le cas des particules libres). *Lorsque $V \equiv 0$, on peut résoudre l'équation (3.1) dont les coefficients sont alors constants par transformée de Fourier. On récupère :*

$$W(t)\psi(0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{\hbar}(p) e^{-ip^2 t/(2m\hbar)} e^{ixp/\hbar} dp,$$

où $\varphi_{\hbar}(p)$ est obtenu à partir de $\psi(0)$ par transformée de Fourier (avec paramètre \hbar).

Le propagateur $W(t)$ est un opérateur unitaire. Donc la norme L^2 de $\psi(t, \cdot)$ vaut 1 si celle de la donnée initiale $\psi(0)$ a été normalisée. Dès lors, le carré $|\psi(t, x)|^2$ peut être interprété (comme l'a d'abord suggéré N. Bohr) comme la densité de probabilité de présence de la particule en (t, x) . La valeur moyenne $\langle A \rangle(t)$ d'une *observable* A contre l'état $\psi(t)$ n'est autre que :

$$\langle A \rangle(t) := \langle \psi(t), A\psi(t) \rangle = \langle \psi(0), A(t)\psi(0) \rangle, \quad A(t) := W(t)^* A W(t).$$

Dans l'approche de Heisenberg, c'est l'état $\psi(0)$ qui est fixé tandis que l'opérateur A se transforme au cours du temps comme $A(t)$. À partir de la définition de $A(t)$, on retrouve d'ailleurs facilement l'équation de Heisenberg. En effet, sachant que

$$[W(t), H] = 0, \quad W(t)^* W(t) = W(t) W(t)^* = \text{Id},$$

on obtient comme attendu :

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t A(t) &= -W(t)^* H A W(t) + W(t)^* A H W(t) \\ &= -W(t)^* H W(t) W(t)^* A W(t) + W(t)^* A W(t) W(t)^* H W(t) = [A(t); H]. \end{aligned}$$

Remark 25 (Le [théorème d'Ehrenfest](#)). *Le calcul fournit*

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \frac{1}{i \hbar} \langle \psi(0), [A(t); H] \psi(0) \rangle = \frac{1}{i \hbar} \langle [A(t); H] \rangle.$$

Dans le cas d'un hamiltonien du type $H(Q, P) = V(Q) + (P^2/2m)$, cela conduit à:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\langle Q \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [Q; P^2/2m] \rangle \\ \frac{d}{dt}\langle P \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [P; V(Q)] \rangle. \end{cases}$$

La relation (2.7) fournit directement:

$$[Q; P^2/2m] = i\hbar P/m.$$

Pour un potentiel $V(\cdot)$ analytique, elle donne aussi accès à:

$$[P; V(Q)] = \sum_{n=0}^{+\infty} V_n [P; Q^n] = -i\hbar \sum_{n=1}^{+\infty} n V_n Q^{n-1} = -i\hbar V'(Q).$$

On doit donc gérer:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\langle Q \rangle(t) = \langle P \rangle/m, \\ \frac{d}{dt}\langle P \rangle(t) = -\langle V'(Q) \rangle. \end{cases}$$

À supposer que $\langle V'(Q) \rangle$ puisse être remplacé ci-dessus par $V'(\langle Q \rangle)$, on retrouve les *équations de Hamilton-Jacobi* pour une particule classique située en $(\langle Q \rangle, \langle P \rangle)$ et soumise à l'hamiltonien:

$$H(\langle Q \rangle, \langle P \rangle) = V(\langle Q \rangle) + (\langle P \rangle^2/2m).$$

Cet argument fournit une correspondance (via le calcul de moyennes) entre le quantique et le classique. Cela étant dit, la moyenne de $V'(Q)$ ne coïncide en général pas avec V' évalué en $\langle Q \rangle$. Il peut s'ensuivre des différences notables entre les dynamiques classiques et quantiques (dont l'*effet tunnel* est l'une des manifestations [6]).

Remark 26 (Le point de vue de l'analyse microlocale). Il est possible de regarder l'action de l'opérateur $A(t) : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ au travers de celle de son symbole $\sigma(t, x, \xi)$. L'action de $A(t)$ est ainsi perçue comme celle d'un élément $\sigma(t, \cdot) \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, et on peut lire sur l'évolution de la distribution $\sigma(t, \cdot)$ une dynamique dans l'espace des phases. Une autre méthode, souvent plus illustrative mais moins générale, consiste à étudier l'action de $A(t)$ sur un état spécifique. On est alors amené à regarder la représentation de Husimi (voir [6] - paragraphe 1.3.2.2) d'un état quantique $\psi(t, \cdot)$ qui est solution particulière de l'équation de Schrödinger. Une méthode alternative consiste à utiliser la *transformée de Segal-Bargmann*

Remark 27 (Retour sur la spectroscopie atomique). Les valeurs obtenues pour les E_n dépendent évidemment du choix de H . Pour un potentiel coulombien (du type $1/|x|$ et non $|x|^2$ comme dans l'oscillateur harmonique), on récupère les $1/n^2$ de la formule de Rydberg avec pour chaque $E_n = 1/n^2$ une multiplicité $(2k+1)n^2$ (où k est le spin - c'est $1/2$ pour l'électron). Dans la pratique, on constate autour de chaque E_n l'existence de décalages parmi lesquels:

- une *structure fine* qui décrit des dédoublements de la raie spectrale associée à E_n . Cet effet est d'origine relativiste et s'explique en ayant recours aux équations de Dirac (l'hamiltonien devient à valeurs dans \mathbb{C}^4), voir [10]-paragraphe 4.3;

- un *décalage de Lamb* qui est dû aux interactions entre les fluctuations du vide et l'électron de l'hydrogène dans ses orbitales. Pour l'expliquer, il faut avoir recours à la seconde quantification;

- des *structures hyperfines* qui proviennent des interactions entre les dipôles magnétiques qui sont induits par les nucléons et les électrons.

La description théorique de ces différents aspects se fait par de la modélisation puis au travers de la théorie spectrale d'opérateurs ad hoc.

4. LE THÉORÈME DE STONE VON-NEUMANN

Revenons sur la question 9. À ce stade, on a mis en avant deux conceptions en apparence distinctes: les approches matricielles et ondulatoires. Il existe toutefois une analogie entre elles qui concerne (2.7). Considérons en effet les opérateurs (non bornés) de position \tilde{Q}_j et d'impulsion \tilde{P}_j agissant suivant:

$$\tilde{Q}_j \psi = x_j \psi, \quad \tilde{P}_j \psi = -i\hbar \partial_{x_j} \psi.$$

Pour simplifier, on travaille en dimension un d'espace (avec $d = 1$ et $x \in \mathbb{R}$). Les opérateurs mis en jeu sont alors juste:

$$\tilde{Q} = x \times, \quad \tilde{P} = -i\hbar \partial_x.$$

Comme déjà expliqué, le premier geste de quantification d'une particule ponctuelle consiste à remplacer la position x de la particule et son impulsion p par les opérateurs \tilde{Q} et \tilde{P} . À l'évidence:

$$[\tilde{P}, \tilde{Q}] \psi = -i\hbar \partial_x(x\psi) + ix\hbar \partial_x \psi = -i\hbar \psi.$$

Les opérateurs \tilde{Q} et \tilde{P} sont donc compatibles avec (2.7). Par ailleurs, un calcul formel (qui pour ψ dans l'espace de Schwartz ne pose pas de soucis de domaines puis qui se justifie en revenant à la caractérisation différentielle dans le théorème de Stone) fournit

$$\begin{aligned} \tilde{U}_s \psi &:= e^{is\tilde{Q}/\hbar} \psi = \sum \frac{1}{n!} (is\tilde{Q}/\hbar)^n \psi = \sum \frac{1}{n!} (isx/\hbar)^n \psi = e^{isx/\hbar} \psi, \\ \tilde{V}_t \psi &:= e^{-it\tilde{P}/\hbar} \psi = \sum \frac{1}{n!} (-it\tilde{P}/\hbar)^n \psi = \sum \frac{1}{n!} (-t)^n \partial_x^n \psi = \psi(x - t). \end{aligned}$$

Comme attendu, les actions de \tilde{U}_s et \tilde{V}_t ont un sens sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ tout entier. On constate aussi que les opérateurs de position \tilde{Q} et d'impulsion \tilde{P} sont les générateurs de groupes de translation respectivement en moment p et en position x (voir [6]-paragraphe 2.1). Un autre point nouveau est qu'on dispose de formules explicites qui permettent de tester directement (sans passer par \tilde{Q} et \tilde{P}) la validité de (2.11). On a en effet:

$$(4.1) \quad \tilde{U}_s \tilde{V}_t \psi = e^{isx/\hbar} \psi(x - t) = e^{ist/\hbar} e^{is(x-t)/\hbar} \psi(x - t) = e^{ist/\hbar} \tilde{V}_t \tilde{U}_s \psi.$$

Sachant (4.1), en appliquant (2.14), on peut construire de manière effective une représentation unitaire du groupe (\mathcal{N}, \circ) qui est bâtie sur $L^2(\mathbb{R})$. C'est la représentation (unidimensionnelle) de Schrödinger. Il existe en fait d'autres représentations explicites. Par exemple, V. Bargmann qui a été l'assistant d'Albert Einstein à l'Institute for Advanced Study de Princeton de 1937 à 1946, en a introduit une (en 1961) reposant sur l'espace de Segal-Bargmann.

Theorem 28. [Théorème de Stone Von Neumann] Toute représentation unitaire irréductible non triviale $\varrho : \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})$ telle que $\varrho(re_0) = e^{ir/\hbar} Id_{\mathcal{H}}$ est unitairement équivalente à la représentation de Schrödinger.

La démonstration est faite par exemple dans [7]-paragraphe 3.4.

La formule (2.18) et la condition $\varrho(re_0) = e^{ir/\hbar} Id_{\mathcal{H}}$ ont été introduites à partir de (2.11) et de (2.15). On va se contenter ci-dessous de travailler avec des représentations déduites de Q et P après passage à l'exponentiel via (2.10). Dans ce contexte, la notion d'irréductibilité se traduit par la condition suivante.

Definition 29. Des opérateurs Q et P vérifiant (2.11) agissent de manière irréductible sur \mathcal{H} si les seuls sous-espaces fermés de \mathcal{H} qui sont invariants sous l'action des U_s et V_t sont $\{0\}$ et \mathcal{H} .

Partant de (2.11), on peut alors formuler l'alternative suivante au Théorème 28.

Theorem 30. [Théorème de Stone Von Neumann sous une forme simplifiée pour $d = 1$] Soient Q et P deux opérateurs auto-adjoints agissant de manière irréductible sur \mathcal{H} et vérifiant les relations (2.11) de commutation de Weyl. Il existe une transformation unitaire $\mathfrak{U} : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ telle que:

$$\mathfrak{U} e^{isQ/\hbar} \mathfrak{U}^{-1} = e^{is\tilde{Q}/\hbar}, \quad \mathfrak{U} e^{-itP/\hbar} \mathfrak{U}^{-1} = e^{-it\tilde{P}/\hbar}.$$

Selon cet énoncé, les représentations obtenues par Heisenberg et Schrödinger sont unitairement équivalentes. Autrement dit, elles sont les deux facettes d'un seul et même objet. Ou encore, travailler avec $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ et (3.1) permet d'incarner (2.7).

Remark 31. *Comme déjà expliqué, les relations (2.11) sont construites via une représentation unitaire de (\mathcal{N}, o) pour laquelle $\mathcal{N} = E \oplus \mathbb{R}e_0$ avec E de dimension finie (en l'occurrence paire). Il existe des situations plus générales pour lesquelles E est de dimension infinie. Cela se produit typiquement en théorie quantique des champs. Il y a alors une infinité de degrés de liberté, souvent indexés par des vecteurs d'onde $k \in \mathbb{R}^3$. On perd alors l'unicité à transformation unitaire près (sauf à imposer des contraintes supplémentaires [9]) mais on garde l'existence d'une réduction à des équations de Schrödinger.*

Ce cours suit un chemin qui conduit à la démonstration du Théorème 30. Il sera aussi l'occasion de parler de l'oscillateur harmonique (leçon 2), du principe d'incertitude (leçon 3) et des divers problèmes de quantification (leçon 4).

5. RÉFÉRENCES

- Du côté des romans:
 - [1] *M. Kumar, Le grand roman de la physique quantique;*
- Pour une *perspective historique et philosophique* ciblée sur les débuts des mécaniques matricielles et ondulatoires:
 - [2] *L. Coquille, Etude de l'équivalence entre mécanique matricielle de Heisenberg et la mécanique ondulatoire de Schrödinger;*
- Pour une présentation des *concepts de base* de la mécanique quantique:
 - [3] *L. Susskind et A. Friedman, Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum;*
- Pour des rappels d'*analyse fonctionnelle*:
 - [4] *C. Cheverry et N. Raymond, A Guide to Spectral Theory: Applications and Exercises;*
- Pour faire le lien avec l'*optique géométrique* classique et avec le cours de V. Duchêne sur les équations hyperboliques:
 - [5] *G. Métivier, The Mathematics of Nonlinear Optics;*
- Pour un cours sur la *mécanique quantique* à l'interface entre physique et mathématiques:
 - [6] *F. Faure, Notes de cours sur la mécanique quantique (chap. 1);*
- Pour un texte d'*analyse* axé sur le théorème de Stone-Von Neumann:
 - [7] *F. Nier, Variations sur un théorème de Stone-Von Neumann;*
- Pour une discussion sur les différentes représentations du *groupe de Heisenberg*:
 - [8] *Y. Laszlo, Oscillateurs harmoniques et représentation du groupe de Heisenberg;*
- Pour un texte d'*algèbre* axé sur le théorème de Stone-Von Neumann:
 - [9] *O. Schiffmann, Algèbre de Heisenberg et espaces de Fock;*
- Du côté de la théorie quantique des champs:
 - [10] *G. B. Folland, Quantum field theory: a tourist guide for mathematicians (chap. 3).*