

S E M I N A I R E  
sur les  
PROBLEMES MATHEMATIQUES DE LA PHYSIQUE THEORIQUE

---

IV et VI - Axiomatique et représentations  
de la Mécanique Quantique

---

par L.MICHEL ( Université de Lille ).

Université de Lille

Année 1956-1957.

---

AXIOMATIQUE et REPRESENTATIONS  
de la  
MECANIQUE QUANTIQUE

---

La Mécanique classique s'est révélée une mauvaise approximation pour les phénomènes à l'échelle atomique et subatomique, et a dû laisser la place à une mécanique nouvelle : la Mécanique Quantique.

L'approximation de la mécanique classique consiste à négliger  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , la constante de Planck, introduite en 1900. ( $h=6,62.10^{-27}$  cgs ).

En mécanique classique, on peut aussi distinguer la dynamique de la relativité restreinte (Einstein, 1905) et la dynamique approchée, non relativiste, (où l'on considère la vitesse  $c$  de la lumière comme infinie).

De même, on peut distinguer entre mécanique quantique non relativiste et relativiste. Je parlerai d'abord et surtout de la première.

La mécanique quantique a été créée vers 1924-25, apparaissant sous des aspects différents dans trois endroits à la fois : Copenhague (Heisenberg et école de Niels Bohr), Paris (Louis de Broglie) et Cambridge (Dirac).

L'effort le plus célèbre d'axiomatisation de la Mécanique quantique est celui de von Neumann, publié en 1932 dans son livre : Les Fondements mathématiques de la Mécanique quantique (traduction française par A. Proca, aux Presses Universitaires). Il s'agit là du travail profond d'un mathématicien.

Il faut signaler aussi les premiers chapitres du livre de Dirac : Les Principes de la Mécanique quantique (3ème édition, Oxford 1947). Il y a évidemment quelques (et rares) mémoires originaux sur cette question.

Ici, nous allons partir du travail de von Neumann, donner la représentation de la mécanique quantique qu'il étudie. Puis, peu à peu, nous nous aventurerons sur un terrain moins sûr, plus récent. Et il faudra bien conclure que l'axiomatique de la mécanique quantique n'est pas encore au point.

I - La Mécanique quantique non relativiste.

---

Commençons donc par décrire la représentation de la mécanique quantique non relativiste, celle que l'on utilisait il y a 25 ans, (et que l'on utilise encore souvent). Il ne s'agit pas de donner la structure de la mécanique quantique par un système d'axiomes, mais de permettre de travailler effectivement en mécanique quantique. Pour cela, on utilisera une construction à partir de la mécanique

analytique classique, grâce à une correspondance entre mécanique classique et quantique.

1 - Rappel de la mécanique classique.

Considérons, en mécanique classique, un système à  $n$  degrés de liberté, décrit par les paramètres  $q_i$  ( $i = 1$  à  $n$ ), et évoluant au cours du temps  $t$ .

On peut faire le Lagrangien  $L = T - V$  de ce système ( $T$ : énergie cinétique,  $V$ : potentiel), avec les  $q_i$  et les  $\dot{q}_i = \frac{dq}{dt}$ . On utilisera alors les équations de Lagrange :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (1)$$

On peut encore étudier l'évolution de ce système par les équations de Hamilton.

On écrit :  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$  et on définit l'Hamiltonien :  $H = L - \sum_i p_i \dot{q}_i$

On obtient alors les dérivées de  $p$  et  $q$  par rapport au temps par les équations

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad - \frac{dp_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Les quantités  $p_i$  sont dites variables conjuguées des paramètres  $q_i$ . Il y a une dualité entre les  $p_i$  et les  $q_i$ , dualité qui sera très importante en mécanique quantique.

Exemples de grandeurs conjuguées :

$q_i$  = coordonnée rectangulaire  $\vec{r} = (x, y, z)$  alors

$p_i$  = quantité de mouvement  $\vec{p} = m \vec{v} = (m\dot{x}, m\dot{y}, m\dot{z}) = m \frac{d\vec{r}}{dt}$

$q_i$  = angle, azimuth autour d'un axe  $\vec{n}$

$p_i$  = projection du moment cinétique sur  $\vec{n}$  ( $\vec{l} \cdot \vec{n} = \vec{p} \wedge \vec{r} \cdot \vec{n}$  où  $\vec{p}$  est la quantité de mouvement).

2 - Système de Postulats pour la mécanique quantique .

Nous pouvons maintenant donner 4 règles permettant de traiter tous les problèmes de la mécanique non relativiste, et sans spin. (Nous utilisons le vocabulaire mathématique des séminaires précédents).

Considérons l'espace d'Hilbert  $\mathcal{H}$  des fonctions  $\Psi(q_i, t)$  de carré sommable. Nous notons  $\langle u, v \rangle$  le produit scalaire.

Postulat 1 . A tout état d'un système physique  $S$  correspond un vecteur normé à 1 ( $\|\Psi\| = 1$ ) de  $\mathcal{H}$  .

Nous verrons plus tard comment construire  $\Psi$  lorsqu'on a le maximum d'information possible sur l'état de S.

Postulat 2. A toute variable dynamique  $m$ , on fait correspondre un opérateur  $M$  hermitique sur  $\mathcal{H}$ , la correspondance étant établie ainsi :

à  $q_i$  correspond  $q_i$  (multiplication par un scalaire de  $\mathcal{H}$ )  
à  $p_i$  (variable conjuguée de  $q_i$ ) correspond  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$   
à  $m(p_i, q_j)$  correspond  $M(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}, q_j)$ .

Cette règle est ambiguë car  $q_i$  et  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$  ne commutent pas.

Précisons donc que l'on symétrisera  $m(p_i, q_j)$  au maximum en  $p_i, q_i$  (pour tout  $i$ ) Cela assurera de plus l'hermiticité de  $M$ .

ex :  $p_i^m q_i^n = \frac{1}{N} \sum' p_i^{\alpha_1} q_i^{\beta_1} p_i^{\alpha_2} q_i^{\beta_2} \dots p_i^{\alpha_s} q_i^{\beta_s}$

$\sum'$  étant la somme sur toutes les partitions des entiers  $m$  et  $n$  (c'est à dire  $\sum_1 \alpha_t = m \quad \sum_1 \beta_t = n$ ), cette somme ayant  $N$  termes.

ex : à l'hamiltonien  $h = \frac{p^2}{2m} + v(x,y,z)$  d'un point de masse  $m$ , soumis au potentiel  $v$ , correspondra l'opérateur :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(x,y,z) \quad \text{où } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \text{Laplacien}$$

autre exemple : Moment cinétique  $\vec{L} = \vec{p} \wedge \vec{r}$  si  $q_i = (x,y,z)$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} y - \frac{\partial}{\partial y} x \right) = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

Postulat 3. L'équation d'évolution de  $\Psi(q_i, t)$  au cours du temps est

$$H \Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (2)$$

La connaissance de  $\Psi(q_i, t_0)$  à l'instant  $t_0$ , nous permet donc de trouver  $\Psi(q_i, t)$  pour tout  $t$ , par résolution de l'équation (2).

L'équation (2) est l'équation de Schrödinger.

Postulat 4. Pour l'état décrit par  $\Psi$ , la mécanique quantique ne permet que les prédictions suivantes sur la valeur  $\mu$  que l'on obtiendra en cherchant à mesurer la valeur de la variable dynamique  $m$  pour cet état.

Si  $\mu$  appartient au spectre de  $M$ , l'espérance mathématique de la valeur de

$$m = \langle \Psi, M \Psi \rangle.$$

(L'espérance mathématique =  $\frac{1}{N} \sum \mu_i n_i$ , où  $n_i$  est le nombre de fois que l'on trouve les résultats  $\mu_i$  en faisant  $N = \sum n_i$  mesures sur des systèmes identiques dans le même état).

On dit aussi couramment : valeur moyenne, au lieu de espérance mathématique.

La mécanique quantique ne permet donc, en général, de prédire qu'en probabilité les résultats d'une mesure.

### 1.3 - Signification physique de $\Psi$ .

On en déduit aisément la signification physique de la fonction  $\Psi(q_i, t)$  (En utilisant les décompositions spectrales de l'identité).

$$\int_{q'_1}^{q''_1} \int_{q'_n}^{q''_n} |\Psi(q_i, t)|^2 dq_1 \dots dq_n$$

est la probabilité pour que les valeurs des paramètres  $q_i$  soient dans l'intervalle  $I_i = (q'_i, q''_i)$ .

$|\Psi|^2$  est donc une densité de probabilité. Et si  $D$  est le domaine de variation des  $q_i$ , on doit avoir :

$$\int_D |\Psi|^2 dq_1 \dots dq_n = \|\Psi\| = 1$$

(Ce qui signifie simplement : le système est certainement dans un état possible !)

On vérifie que la propriété de la norme de  $\Psi(q_i, t)$  d'être indépendante du temps est compatible avec l'équation (2).

### 1.3 - Relations d'incertitude.

Des postulats 1, 2, 3, 4, nous allons déduire une relation pour les mesures d'une grandeur  $a$  et de sa conjuguée  $b$ , sur le système  $S$  dans l'état  $\Psi$ .

Par une transformation canonique en mécanique rationnelle, choisissons  $b$  comme paramètre. En mécanique quantique, les opérateurs hermitiques correspondants seront (postulat 2)

$$B = b \qquad A = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial b}$$

On a  $[A, B] = \frac{\hbar}{i}$  (où  $[A, B] = AB - BA$ )

Soient  $\alpha$ ,  $\beta$  les résultats des mesures, et  $\underline{\alpha}$ ,  $\underline{\beta}$  les valeurs moyennes

$$\underline{\alpha} = \langle \Psi, A \Psi \rangle \qquad \underline{\beta} = \langle \Psi, B \Psi \rangle$$

A partir d'un ensemble de résultats  $\alpha$ ,  $\beta$  la statisticien définit la dispersion (ou écart quadratique moyen)  $\Delta \alpha$ , définit par :  $(\Delta_2 \alpha)^2 =$  valeur moyenne de

$$(\alpha - \underline{\alpha})^2$$

et de même, le nombre d'ordre  $n$  de la distribution de  $\alpha$  par

$$(\Delta_n \alpha)^n = \text{valeur moyenne de } (\alpha - \underline{\alpha})^n$$

On a 
$$(\Delta_2 \alpha)^2 = \langle \Psi, (A - \underline{\alpha})^2 \Psi \rangle = \| (A - \underline{\alpha}) \Psi \|^2$$

donc :

$$(\Delta_2 \alpha)(\Delta_2 \beta) = \|A' \Psi\| \|B' \Psi\|$$

en posant  $A' = A - \underline{\alpha}$   $B' = B - \underline{\beta}$

L'inégalité de Schwarz donne :

$$\begin{aligned} (\Delta_2 \alpha)(\Delta_2 \beta) &\geq |\langle A' \Psi, B' \Psi \rangle| \geq |\operatorname{Im} \langle A' \Psi, B' \Psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle A' \Psi, B' \Psi \rangle - \langle B' \Psi, A' \Psi \rangle| \\ &= \frac{1}{2} |\langle (B' A' - A' B') \Psi, \Psi \rangle| \end{aligned}$$

et

$$[A', B'] = [A, B] = \frac{\hbar}{i}$$

$$(\Delta_2 \alpha)(\Delta_2 \beta) \geq \frac{\hbar}{2}$$

ce sont les relations d'incertitudes d'Heisenberg.

Exemple :  $\beta = x$   $\alpha = p_x = m v_x$  (position et quantité de mouvement)  
 $\beta = t$   $\alpha = h$ , l'énergie.

Ces relations nous donnent une limite inférieure de la précision que l'on peut obtenir sur la mesure de deux grandeurs conjuguées correspondant à des opérateurs non commutables.

Comme nous l'avons dit, on passe à l'approximation de la mécanique classique en posant  $\hbar = 0$ .

On montre aisément qu'on a l'égalité  $(\Delta_2 \alpha)(\Delta_2 \beta) = \frac{\hbar}{2}$ , si et seulement si :

$$\begin{aligned} \Psi(\beta, t) &= \left(\frac{4\pi r^2}{\hbar^2}\right)^{1/4} \int_0^{+\infty} \frac{i/\hbar [\alpha_0(\beta - \beta_0) - \omega t] - \frac{(\beta - \beta_0)^2}{2\hbar^2} r^2}{\alpha} d\alpha \\ &= \left(\frac{1}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i/\hbar [\alpha(\beta - \beta_0) - \omega t] - \frac{(\alpha - \alpha_0)^2}{2} \frac{\hbar^2}{r^2}}{\alpha} d\alpha \end{aligned}$$

$$\underline{\alpha} = \langle \Psi, A \Psi \rangle = \alpha_0$$

$$\underline{\beta} = \beta_0$$

$$\Delta_2 \alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2r}}$$

$$\Delta_2 \beta = \sqrt{\frac{\hbar r}{2}}$$

$$(\Delta_2 \alpha)(\Delta_2 \beta) = \frac{\hbar}{2}$$

L'équation (2) étant une équation d'onde, on peut encore dire que les  $\Psi$  sont des fonctions d'onde et l'analyse de Fourier des "paquets d'onde" nous donne les relations d'incertitude. Il ne s'agit là que d'un autre langage pour les mêmes ma-

thématiques. Cet autre langage est appelé "mécanique ondulatoire"

Si  $d = x$ ,  $p = p_x$ , la pulsation de l'onde  $\omega = \frac{E}{\hbar}$

Le nombre d'onde est :  $k_x = \frac{p_x}{\hbar}$ . Relations de Louis de Broglie.

Dans un milieu dispersif  $\omega$  est fonction de  $k$  :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + v_g (k-k_0) + \frac{1}{2} \omega'' (k-k_0)^2 + \dots$$

ou :  $v_g = \left(\frac{\partial \omega}{\partial k}\right)_{k=k_0}$   $\omega = \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}\right)_{k=k_0}$

et pour le paquet d'onde :

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{1}{h}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} f(k-k_0) e^{i(k(x-x_0) - \omega t)} dk$$

$v_g$  est la vitesse de groupe, et  $\Delta_p \Delta_x \gg \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \omega''^2 t^2 \hbar^4}$

Le paquet d'onde s'étale avec le temps si  $\omega'' \neq 0$

L'égalité étant pour le paquet d'onde gaussien

$$f(k-k_0) = e^{-1/2(k-k_0)^2 r^2}$$

Ce point de vue permet au physicien qui connaît bien les phénomènes ondulatoires, de "sentir" qualitativement les phénomènes quantiques.

- Systèmes complets d'observables.

A tout état d'un système physique correspond un  $\Psi$  et à toute grandeur de la mécanique classique correspond un opérateur hermitique. Mais la réciproque n'est pas exacte. Nous montrerons qu'il y a des  $\Psi \in \mathcal{H}$  de norme 1, qui ne correspondent pas à un état physique. Il y a des opérateurs "hermitiques", correspondant à des grandeurs "observables", bien qu'elles n'aient pas de correspondance en mécanique classique, (par exemple la parité). Mais il y a aussi des opérateurs hermitiques pour lesquels nous ne savons pas (ou même pour d'autres, nous montrerons que nous ne pouvons pas), faire les mesures qui correspondraient à leur observation.

Le but de ce paragraphe et du suivant est de montrer comment la connaissance de l'état d'un système physique  $S$  nous permet de construire effectivement son vecteur d'état  $\Psi$ . Dans ce paragraphe, nous nous plaçons dans le cas idéal où nous avons fait toutes les mesures correspondant à un ensemble complet d'observables commutables. A cet ensemble correspond un ensemble  $T$  complet d'opérateurs hermitiques commutables.

Nous rappelons que l'on dit que  $A$  est un opérateur complet si l'ensemble de ses vecteurs propres engendre  $\mathcal{H}$  en entier. Si  $[A, B] = 0$ , ils ont des vecteurs propres en commun.

Si  $A \varphi = \alpha \varphi$ ,  $A \psi = \beta \psi$  et  $\alpha \neq \beta$ ,  $A = A^*$ ,

on a :  $\langle \varphi, \psi \rangle = 0$

On appelle ensemble complet  $C$  d'opérateurs hermitiques commutables, un ensemble d'opérateurs hermitiques dont l'ensemble des vecteurs propres communs forme une base orthonormale de  $\mathcal{H}$ . Soient  $\varphi_n$  ( $n$  entier  $> 0$ ), ces vecteurs de base auxquels correspondent les valeurs propres  $\gamma_i(n)$  des  $C_i$ .

Pour 2 valeurs différentes de  $n$ , on ne peut avoir  $\gamma_i(n_1) - \gamma_i(n_2) = 0$  pour tout  $i$ .

D'après le postulat 4, l'ensemble des mesures faites sur un état  $S$ , correspondant aux  $C_i$ , doit donner un ensemble de valeurs  $\alpha_i$ , valeurs propres des  $C_i$ . Et, puisque les  $C_i$  forment un ensemble complet d'observables, il existe une et une seule valeur  $n_0$  de  $n$ , telle que :  $\alpha_i = \gamma_i(n_0)$ .

On représentera l'état  $S$  par le vecteur normé  $\Psi = \varphi_{n_0}$ , et nous aurons son évolution en utilisant l'équation de Schrödinger.

Nous pouvons comprendre maintenant comment la Mécanique quantique décrit une mesure. Admettons que nous connaissions entièrement l'état d'un système  $S$ . Il est décrit par le vecteur  $\Psi$ .

Faisons les mesures correspondant à un ensemble complet d'observables  $C_i$ . Nous pouvons prédire seulement en probabilité quels seront leurs résultats. On a la probabilité :

$$0 \leq |\langle \Psi, \varphi_n \rangle|^2 = |c_n|^2 \leq 1, \text{ d'obtenir les valeurs } \gamma^i(n).$$

Mais si  $\gamma^i(k)$  sont les valeurs obtenues lorsque les mesures auront été faites, la probabilité d'obtenir un ensemble de  $\gamma^i(n)$  différents de  $\gamma^i(k)$ , est alors nulle, et nous devons décrire le système par  $\varphi_k$ , vecteur propre des  $C_i$  avec les valeurs propres  $\gamma^i(k)$ .

En mesurant un système, il se peut qu'on le modifie. La Mécanique quantique décrit ainsi l'action de l'observateur sur le système qu'il observe.

- Représentation de Schrödinger et d'Heisenberg.\* (au bas de la page suivante)

Ce que nous venons d'utiliser jusqu'à présent, c'est la représentation de Schrödinger : les opérateurs<sup>F</sup> correspondant aux observables sont donnés, et indépendants du temps.

Le vecteur  $\Psi$  est fonction du temps, et son évolution est définie par (2)

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi$$

Soit  $\psi_0$  sa valeur à  $t = t_0$ .

Nous aurons : 
$$\psi(t) = U(t, t_0) \psi(t_0)$$

Les  $U(t)$  étant des opérateurs unitaires, formant un groupe abélien à un paramètre; et (2) s'écrit :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} U(t) = H U \quad (3)$$

Soit  $F$  un observable. Sa valeur moyenne à l'instant  $t$  est :

$$\langle \psi(t), F \psi(t) \rangle = \langle U \psi_0, F U \psi_0 \rangle = \langle \psi_0, \mathcal{F}(t) \psi_0 \rangle$$

en posant :

$$\mathcal{F}(t) = U^{-1}(t) F U(t) \quad (4)$$

$\mathcal{F}(t)$  est la représentation de Heisenberg de l'observable  $F$ .

Dans la représentation de Heisenberg, tout système physique est décrit par un vecteur  $\psi$  donné invariable, mais les observables  $\mathcal{F}(t)$  sont fonctions du temps, et leur valeur moyenne à l'instant  $t$  est donnée par

$$\langle \psi_0, \mathcal{F}(t) \psi_0 \rangle$$

En dérivant (4) par rapport au temps, et en utilisant (3), on déduit aisément :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\mathcal{F}}{dt} = [\mathcal{F}, \mathcal{H}] \quad \text{avec} \quad \mathcal{H}(t) = U^{-1}(t) H U(t)$$

ce qui nous donne l'évolution des opérateurs observables en fonction du temps.

#### 1.7 - Matrice densité . (von Neumann,

Généralement, notre information sur un système n'est pas maximum, soit que l'on n'ait fait qu'un ensemble incomplet de mesure, soit que les mesures soient imprécises, etc ... Nous pouvons seulement dire que le système  $S$  observé, a probabilité  $0 \leq C_n \leq 1$  (avec  $\sum C_n = 1$ ) d'être dans les états décrits par les vecteurs  $\psi_n$ .

\* Dans les livres en anglais, on employait autrefois les termes "représentations". Mais ce mot est utilisé pour trop de concepts différents par les physiciens. Aussi, depuis une dizaine d'années, à la suite de Dirac, parlait-on (en anglais) de "Schrödinger and Heisenberg pictures", expressions non encore traduites techniquement dans les ouvrages en français.

L'espérance (ou valeur moyenne) de l'observable A est alors :

$$\text{Esp. A} = \sum_n C_n \langle \varphi_n, A \varphi_n \rangle = \text{tr } \rho A.$$

en posant :  $\rho = \sum_n C_n P_n = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$

$P_n$  est le projecteur hermitique, ( $P_n^2 = P_n = P_n^*$ ,  $\text{tr } P_n = 1$ ), de rang 1 sur l'état  $\varphi_n$ , et la notation de Dirac correspondante  $|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$  est très utilisée par les physiciens, grâce à sa commodité.

On a :  $\text{tr } \rho = 1 = \sum_n C_n$  mais  $\text{tr } \rho^k = \sum_n C_n^k \leq 1$

l'égalité n'ayant lieu que si un seul  $C_n$  est différent de zéro (il est alors égal à 1), et on a :

$$\rho^2 = \rho \text{tr } \rho$$

L'opérateur  $\rho$  est la matrice densité de von Neumann.

Le vecteur  $\Psi = \varphi_n$  ne nous permettait de décrire les systèmes que lorsqu'ils sont dans état pur, et que l'on a une information maximum sur cet état. Dans ce cas  $\rho$  est le projecteur sur  $\varphi_n$ .

Dans le cas général, on a : soit un mélange d'états purs, (par exemple faisceau monocinétique de particules, mais dont les polarisations sont différentes) avec des fréquences  $C_n$  (avec  $\sum_n C_n = 1$ ) pour les différents états, soit une information partielle : on a une loi de probabilité (il est facile d'étendre du cas discret  $C_n$  au cas continu  $C(\alpha)$ ), pour les différents états possibles.

Dans ce cas, <sup>la matrice</sup> densité  $\rho$ , à la fois projecte sur les différents états possibles  $\varphi_n$  et fait des homothéties  $C_n$ .

Par exemple, si l'on sait que le vecteur représentatif du système doit être dans un certain sous espace  $\mathcal{E}$  (ex : particule d'impulsion donnée, mais dont on ignore tout de la polarisation, on dit encore que la particule "n'est pas polarisée"), tous les états de ce sous espace sont également probables, et la restriction de  $\rho$  agissant sur  $\mathcal{E}$  est alors proportionnelle à l'unité, (c'est à dire  $\rho$  est proportionnel à  $P_{\mathcal{E}}$ , opérateur de projection sur le sous espace).

L'accroissement de l'information sur un système se traduit donc par une diminution du rang de  $\rho$ , son opérateur densité.

Noter que, dans la formule :  $\text{Esp. A} = \text{tr } \rho A = \text{tr } A \rho$

il y a une dualité complète entre les opérateurs hermitiques A et  $\rho$  représentant respectivement, en quelque sorte, l'appareil de mesure, et le système

à observer.

L'équation (2) nous permet aisément d'écrire l'équation d'évolution de  $\rho$  en représentation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]$$

## 2 - La Mécanique quantique relativiste.

---

Nous venons de donner une interprétation assez complète d'une axiomatique de la Mécanique quantique. Mais cette axiomatique est insuffisante, (et même incohérente, comme nous le verrons plus loin!). En effet, nous n'avons pas encore considéré le problème suivant :

Considérons deux observateurs (en mouvement quelconque l'un par rapport à l'autre) étudiant le même système : comment comparer leurs observations ? qu'est - ce qui, dans leurs observations, est invariant (par rapport aux observateurs) et caractérise le système ?

Pour comparer les observations de  $O$  et  $O'$ , on peut faire la transformation nécessaire des coordonnées  $(\vec{n}', t')$  en fonction de  $(\vec{x}$  et  $t$ ), pour passer du système de référence  $\mathcal{E}$  de  $O$ , à celui  $\mathcal{E}'$  de  $O'$ .

Nous ne considérerons ici que le cas où la transformation  $\mathcal{E}' = \Lambda \mathcal{E}$  est linéaire : c'est à dire où ses coefficients sont constants (indépendants de  $\vec{x}$ ,  $t$ ).\*

Les  $\Lambda$  forment un groupe  $\mathcal{Q}$  (le groupe de Lorentz, dans le cas de la relativité restreinte, le groupe de Galilée, pour la mécanique de Newton) que nous appellerons groupe de relativité.

Réexaminons maintenant, de façon plus critique, l'axiomatique que nous avons donnée de la Mécanique Quantique, (en nous plaçant en représentation d'Heisenberg) pour la compléter.

### - Rayons normés de l'Espace d'Hilbert.

---

Nous n'avons précisé qu'implicitement que l'espace d'Hilbert, que nous considérerons pour les vecteurs d'état, a pour corps, le corps des

---

\* Sinon, cela nous entraînerait en dehors du cadre de la théorie de la relativité restreinte, considérée ici. La Mécanique quantique, en relativité générale, est peu étudiée.

complexes. Nous renvoyons aux premiers chapitres de Dirac, (P.A.M. Dirac : The Principles of Quantum Mechanics, 3<sup>e</sup> édition, Oxford 1947) , pour montrer que la physique (plus précisément l'étude des phénomènes de polarisation) rejette le corps des réels. <sup>⊕</sup>

Mais l'utilisation du corps des complexes est, en partie, superfétatoire, puisque les observables sont des formes hermitiques des vecteurs d'états :

$$\text{Esp. } A = \text{tr } S A = \sum_n c_n \langle \varphi_n, A \varphi_n \rangle.$$

Les observables sont donc invariants pour la multiplication de  $\varphi_n$  par une phase. Nous allons donc remplacer le postulat 1 par le postulat suivant plus précis :

" A tout état pur (entièrement déterminé et pour lequel on possède la formulation maximum) d'un système physique S, correspond un vecteur normé, défini à une phase près, d'un espace d'Hilbert .

Nous désignerons par  $\Psi$  l'ensemble des vecteurs qui ne diffèrent du vecteur donné  $\psi$  que par une phase multiplicative, et nous appellerons  $\Psi$  le rayon contenant  $\psi$ .

C'est donc en termes de rayon qu'il nous faut exprimer les postulats de la Mécanique Quantique.

## 2.2 - Changement de système de référence.

Considérons deux observateurs  $O_1$  et  $O_2$  , ayant chacun leur système de coordonnées (en général en mouvement l'un par rapport à l'autre), et observant le même système, S, que, pour simplifier, nous considérons dans un état pur.

Comment traduire les observations de l'un pour l'autre ? Les deux descriptions doivent être isomorphes, si aucun des deux systèmes de référence n'est privilégié par rapport à l'autre. Appelons les équivalents dans ce cas.

Considérons l'ensemble des systèmes de référence équivalents à  $O_1$ , et G l'ensemble des transformations permettant de passer de  $O_1$  à l'un d'eux. G est un groupe, que nous avons appelé le groupe de relativité de la Théorie

<sup>⊕</sup> Peut-être l'utilisation d'un espace d'Hilbert sur le corps des quaternions permettrait de mieux comprendre la conservation du spin isotope que pour les couplages forts.

### 2.3 - Normalisation des phases.

Soit  $\underline{\psi}_1$  le rayon représentatif de l'état (pur) d'un système S dans le repère  $O_1$ , et  $\underline{\psi}_i$  dans  $O_i$ . Les correspondances entre rayons  $\underline{\psi}_1 \rightarrow \underline{\psi}_i$  pour tous les indices  $i$  (= tous les systèmes équivalents) forment une représentation  $U$  de  $G$ . Notons que  $\underline{\psi}_i$ , dans le repère  $O_1$  représente un autre état possible de S (principe de relativité). Ce qui donne donc une nouvelle interprétation de  $U$ . Le sous-espace sur lequel elle opère est l'espace des vecteurs d'état pur de S. Les opérations de  $U$  doivent laisser invariant le carré du module des produits scalaires  $|\langle \underline{\psi}_1 | \underline{\psi}_1 \rangle|^2 = |\langle \underline{\psi}_i | \underline{\psi}_i \rangle|^2$

On en déduit que ce sont des opérateurs unitaires ou antiunitaires définis à une phase près.

On appelle sous-groupe connexe de  $G$ , l'ensemble des éléments de  $G$  qui peuvent être obtenus de façon continue à partir de l'identité. L'identité étant une opération unitaire, tous les éléments du sous-groupe connexe de  $G$  sont représentés par des opérateurs unitaires.

Peut-on normaliser ces phases (et en même temps les phases de  $|\underline{\psi}_i\rangle$  se trouvent normalisées) ? La réponse est oui, à une restriction près. C'est le théorème de Wigner (voir son livre Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Q.M. 1931. Voir aussi Bargmann : Ann. Math. 1954).

Dans le cas particulier où toutes les phases des opérateurs de  $U$  peuvent être égalées à un (dans le cas général, on a :  $U(g_1) U(g_2) = \omega(g_1, g_2) U(g_1 g_2)$  où  $\omega(g_1, g_2)$  est une phase fonction de  $g_1$  et  $g_2$ ),  $U$  est une vraie représentation du groupe. Mais il existe aussi d'autres cas, acceptables en mécanique quantique, c'est par exemple le cas des représentations spinorielles (la phase est  $\pm 1$ ).

Le théorème de Wigner fait intervenir essentiellement des conditions de topologie. Nous dirons quelques mots des phases pour les opérations discontinues de  $G$  (c'est à dire, non dans le sous-groupe connexe).

La restriction annoncée est la suivante : si  $U$  est une représentation réductible, il peut être impossible de normaliser la phase à la fois pour des représentations irréductibles différentes. C'est le cas entre des représentations spinorielles d'une part, et tensorielles de l'autre. De façon générale, ce sera le cas lorsque l'identité n'est pas représentée par un multiple de l'identité, mais doit être décomposée en sommes directes de matrices multiples de

l'unité  $\neq$ . Or, pour une rotation d'angle  $2\pi$ , avec la normalisation habituelle des phases, les tenseurs sont invariants, les spineurs sont multipliés par  $-1$ .

- Un autre exemple est fourni par les transformations de jauge  $c^{i\alpha}$ , correspondant à des charges totales  $Q_i$  différentes. Alors les phases  $c^{i\alpha}$  sont différentes. Les transformations de jauge ne sont pas physiques. Physiquement elles correspondent à l'identité.

De telles représentations sont dites séparées par des règles de supersélection. (voir Wock, Wightman, Wigner : Phys. Rev. 88, 101 (1952) ).

Soient  $\psi_1$  et  $\psi_2$  représentant deux états appartenant à des représentations séparées par une règle de supersélection (par exemple un état de spin entier et un état de spin demi-entier, deux états de charge électrique, ou nucléaire, différente). Ils sont orthogonaux  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$ , puisque leur "probabilité de transition" est nulle. Montrons que tout ket combinaison linéaire de  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  ne peut représenter un état physique. Le ket  $|\psi_+\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle$ , avec  $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$ , est orthogonal à  $|\psi_-\rangle = \bar{\alpha}_2 |\psi_1\rangle - \bar{\alpha}_1 |\psi_2\rangle$ . Donc :  $\langle \psi_+ | \psi_- \rangle = 0$ .

Par une transformation correspondant physiquement à l'identité,  $\psi_+$  et  $\psi_-$  sont transformés en :  $|\psi'_+\rangle = \omega_1 \alpha_1 |\psi_1\rangle + \omega_2 \alpha_2 |\psi_2\rangle$

$$|\psi'_-\rangle = \omega_1 \bar{\alpha}_2 |\psi_1\rangle - \omega_2 \bar{\alpha}_1 |\psi_2\rangle .$$

Et :  $\langle \psi'_+ | \psi'_- \rangle = (|\omega_1|^2 - |\omega_2|^2) \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 \neq 0$  en général.

De même :  $|\langle \psi'_+ | \psi'_+ \rangle|^2 \neq 1$  si  $\omega_1 \neq \omega_2$ .

Cela est absurde, puisque la transformation est l'identité. On ne peut donc fixer une phase relative entre  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$ .

En résumé : L'espace  $\mathcal{H}$  des vecteurs d'états est divisé en sous-espaces  $\mathcal{H}_i$  que nous appellerons cohérents. A l'intérieur de chaque  $\mathcal{H}_i$ , on peut définir la phase relative des vecteurs d'état. Ce n'est pas possible pour des vecteurs d'état appartenant à des  $\mathcal{H}_i$  différents.

$\neq$  : Il serait facile de formuler de façon précise mathématiquement ces conditions. Avec les exemples, je crois que c'est très clair pour le physicien. Au mathématicien, disons en un seul mot. Il y a règle de supersélection entre les représentations du groupe de relativité  $\mathcal{G}$ , qui n'appartiennent pas à la même classe de cohomologie, lorsqu'on considère les extensions de  $\mathcal{G}$  par le groupe du cercle.

En conséquence, tout ket qui a des composantes non nulles dans des  $\mathcal{H}_i$  différents, ne représente pas un état physique.

De même, tout opérateur hermitique, qui a des vecteurs propres ne pouvant représenter des états physiques, ne peut correspondre à un observable.

Rappelons que les règles de supersélection actuellement connus semblent être entre les états de différentes :

statistiques (en spins entiers et demi-entiers)

charge électrique, charge nucléaire,

et nous le verrons plus tard, les différentes possibilités pour le renversement du temps.

La notion de parité, qui joue sur le signe du vecteur d'état, n'a pas de sens absolu, et il n'y a même pas moyen de définir la parité relative entre deux états séparés par des règles de supersélection. Cela ne doit pas nous gêner, car le seul problème concernant la parité est sa conservation, ou non-conservation, pour les transitions physiques, donc respectant les règles de supersélection !

Parmi les sous-espaces cohérents, il y en a un  $\mathcal{H}_0$  qui contient le ket du vide. Si on néglige toutes les interactions, autres que nucléaire, le groupe de relativité est plus grand (et contient le groupe des transformations isotopiques en plus), et il n'y a évidemment pas de règles de supersélection de charge électrique. Mais quand on tient compte de cette dernière, les transformations de spin isotopique sont plus difficiles à comprendre. Il y a là un problème.

### 3 - Définition et classification des particules.

Les physiciens désignent par "particule" un système de micro-physique qui, à une approximation suffisante, peut être rendu isolé. Ex : un électron, une particule alpha, une molécule, un méson  $\pi$ .

Evidemment, ce mot de particules recouvre des réalités bien différentes : des particules composées, c'est à dire qui peuvent être décomposées en plusieurs particules lorsqu'on leur fournit de l'énergie : molécules, atomes, noyaux; des particules métastables, qu'on ne sait pas dissocier, mais qui se dissocient spontanément (neutrons, mésons, hypérons) et les autres, qu'actuellement nous appelons élémentaires, électrons, protons,  $\bar{\nu}$ , neutrinos. Cette classification est empirique.

Mathématiquement, comment caractérisera-t-on une particule = système isolé de microphysique ? En cherchant à traduire ce qui est commun à toutes les observations qui peuvent être faites par différents observateurs. En mathématique, cela s'appelle rechercher les invariants du groupe de relativité, ou encore : à chaque particule correspond une représentation unitaire (pour le sous-groupe connexe, et qui peut être antiunitaire pour d'autres opérations), irréductible (sinon, on a autant de particules différentes que de représentations composantes), à un facteur près, du groupe de relativité. Cela correspond à ce qui a déjà été dit : l'espace sur lequel agit la représentation est l'espace des vecteurs représentant les états purs de la particule.

Remarquons que la définition de la particule dépend, en partie, du choix du groupe de relativité. Ex :  $\pi^+$ ,  $\pi^0$ ,  $\pi^-$  sont trois particules, à moins qu'on ajoute les transformations isotopiques ou groupe de relativité (négliger les interactions non fortes), alors,  $\pi^+$ ,  $\pi^0$ ,  $\pi^-$  ne sont plus que trois états d'une même particule, le  $\pi$ .

Ici, nous considérons le groupe connexe de Lorentz comme groupe de relativité. L'étude systématique des représentations de ce groupe a été faite par Wigner (Ann. Math. 40, 149, (1939)). Cette étude a systématisé des résultats presque tous antérieurement connus. Nous ne donnons ici que les résultats. (Pour une étude de détail, nous renvoyons au séminaire ultérieur de R. Dehoveles).

Les grandeurs caractéristiques d'une particule, du point de vue du groupe de Lorentz inhomogène, connexe, sont la masse et le spin. L'état de la particule (qui dépend du système de référence) est caractérisé par une impulsion énergie ( $\vec{p}$ ,  $E$ , formant les 4 composantes  $p^\mu$  d'un quadrivecteur  $\underline{p}$  dont le carré :  $p^\mu p_\mu = \underline{p}^2 = m^2$ , le carré de la masse), et une polarisation, (on fait :  $c = 1$ ).

Deux cas sont à considérer :

$m > 0$  : le spin peut alors prendre toutes les valeurs  $j$  telles que  $2j$  entier  $> 0$ . Pour une valeur de  $\underline{p}$  donnée, les états de polarisation forment un espace à  $2j+1$  dimensions.

$m = 0$  : le spin peut alors prendre toutes les valeurs  $j$  telles que  $2j$  entier  $\geq 0$ . Il n'existe qu'un état de polarisation.

Il semble que nous connaissons au moins deux particules de masse zéro, les photons avec  $|j| = 1$ , et les neutrinos  $|j| = \frac{1}{2}$ .

Pour les photons, il semble qu'il y ait une symétrie complète entre les états  $j = +1$  (photons polarisés circulairement à droite) et les états  $j = -1$  (photons polarisés circulairement à gauche). Ce qui incite à élargir le groupe de relativité en lui adjoignant les réflexions spatiales.

La situation est beaucoup moins claire pour les neutrinos.

Noter que :

1°) A chaque représentation de masse  $m$  (= énergie au repos :  $\vec{p} = 0$ ) positive, correspond une représentation de masse  $-m$ . Ces représentations apparaissent ensemble dans les premières théories relativistes : difficulté tournée par la conjugaison particules - antiparticules, sur laquelle nous ne pouvons nous étendre ici, faute de temps.

2°) Sans parler des représentations avec  $m^2 < 0$ , il y a aussi celles avec  $m = 0$ , spin infini, qui ne semblent pas exister dans la nature.

Conclusion.

-----  
Nous venons de voir qu'à partir de l'axiomatique, nous pourrions retrouver les propriétés covariantes des particules.

Cette axiomatique est très féconde pour le physicien. Il est vrai qu'à part le détail de la phase arbitraire de  $\Psi$  nous n'avons pas reformulé les quatre postulats dans le cadre relativiste, faute de temps. Nous laissons ce soin au lecteur, en le priant de noter que l'équation d'évolution (2) n'est qu'un cas particulier.

Il existe des équations semblables pour les quatre coordonnées  $xyzt$ . Nous pensons d'ailleurs qu'il est préférable d'utiliser la représentation d'Heisenberg pour décrire un système relativiste et les équations (4) expriment simplement que les observables  $\mathcal{F}$  en  $x'_\mu$  peuvent être obtenus à partir de  $\mathcal{F}_{x_\mu}$  par les opérateurs unitaires des représentations du Groupe de Lorentz.