

# De la mécanique classique à la mécanique quantique: *pourquoi et comment quantifier?*

Charles-Michel Marle

Université Pierre et Marie Curie  
Paris, France

# Origines de la mécanique quantique

Vers la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle, on pensait que l'évolution des systèmes physiques pouvait être décrite dans le cadre de la mécanique classique. Cependant, certains faits restaient mal compris et allaient conduire à remettre en question cette croyance.

# Origines de la mécanique quantique

Vers la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle, on pensait que l'évolution des systèmes physiques pouvait être décrite dans le cadre de la mécanique classique. Cependant, certains faits restaient mal compris et allaient conduire à remettre en question cette croyance.

La non-invariance des équations de Maxwell par le groupe de Galilée amenait à admettre l'existence de repères privilégiés, ceux dans lesquels l'hypothétique éther (support des ondes électromagnétiques) est fixe; l'espace absolu postulé par Newton, dont les mécaniciens avaient eu tant de mal à se débarrasser, ressurgissait.

# Origines de la mécanique quantique

Vers la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle, on pensait que l'évolution des systèmes physiques pouvait être décrite dans le cadre de la mécanique classique. Cependant, certains faits restaient mal compris et allaient conduire à remettre en question cette croyance.

La non-invariance des équations de Maxwell par le groupe de Galilée amenait à admettre l'existence de repères privilégiés, ceux dans lesquels l'hypothétique éther (support des ondes électromagnétiques) est fixe; l'espace absolu postulé par Newton, dont les mécaniciens avaient eu tant de mal à se débarrasser, ressurgissait. Or le mouvement de la Terre par rapport à l'éther n'a pas pu être mis en évidence expérimentalement (A.A. Michelson et E.W. Morley, vers 1880). Cela allait conduire à l'abandon du concept de temps absolu (Relativité, A. Einstein, 1905).

# Origines de la mécanique quantique (2)

D'autre part, les principes de la mécanique statistique classique, appliqués par Rayleigh au rayonnement du corps noir (1900), conduisaient à une densité d'énergie infinie. En laissant de côté ces principes et en admettant que pour chaque fréquence  $\nu$ , la valeur de l'énergie du rayonnement de fréquence  $\nu$  ne pouvait être qu'un multiple entier de  $h\nu$  ( $h$  étant une constante universelle aujourd'hui appelée constante de Planck), M. Planck parvint à établir une formule conduisant à une densité totale d'énergie finie, en excellent accord avec l'expérience.

# Origines de la mécanique quantique (2)

D'autre part, les principes de la mécanique statistique classique, appliqués par Rayleigh au rayonnement du corps noir (1900), conduisaient à une densité d'énergie infinie. En laissant de côté ces principes et en admettant que pour chaque fréquence  $\nu$ , la valeur de l'énergie du rayonnement de fréquence  $\nu$  ne pouvait être qu'un multiple entier de  $h\nu$  ( $h$  étant une constante universelle aujourd'hui appelée constante de Planck), M. Planck parvint à établir une formule conduisant à une densité totale d'énergie finie, en excellent accord avec l'expérience.

La découverte de M. Planck a conduit à modifier la formule empirique donnant la chaleur spécifique des solides, découverte par P.L. Dulong et A.T. Petit (1819), et d'obtenir un bien meilleur accord avec l'expérience aux basses températures (A. Einstein et P. Debye, 1906).

# Origines de la mécanique quantique (3)

Autre succès de la découverte de M. Planck: A. Einstein montre (1905) qu'elle fournit une explication satisfaisante de l'effet photoélectrique, découvert en 1902 par J.J. Thomson et P. Lenard.

# Origines de la mécanique quantique (3)

Autre succès de la découverte de M. Planck: A. Einstein montre (1905) qu'elle fournit une explication satisfaisante de l'effet photoélectrique, découvert en 1902 par J.J. Thomson et P. Lenard.

En 1911, E. Rutherford découvre expérimentalement la structure de l'atome: un noyau doté d'une charge électrique positive, autour duquel gravitent des électrons chargés négativement (la découverte de l'électron, la mesure de sa masse et de sa charge, sont dues à J.J. Thomson, 1897). Mais pourquoi ces chargent en mouvement ne perdent pas leur énergie en émettant un rayonnement? Et comment expliquer les spectres d'émission des atomes?

# Origines de la mécanique quantique (3)

Autre succès de la découverte de M. Planck: A. Einstein montre (1905) qu'elle fournit une explication satisfaisante de l'effet photoélectrique, découvert en 1902 par J.J. Thomson et P. Lenard.

En 1911, E. Rutherford découvre expérimentalement la structure de l'atome: un noyau doté d'une charge électrique positive, autour duquel gravitent des électrons chargés négativement (la découverte de l'électron, la mesure de sa masse et de sa charge, sont dues à J.J. Thomson, 1897). Mais pourquoi ces chargent en mouvement ne perdent pas leur énergie en émettant un rayonnement? Et comment expliquer les spectres d'émission des atomes?

En 1913, N. Bohr montre que l'idée, initialement due à M. Planck, de "quantifier" les échanges d'énergie, permet de répondre à ces questions.

# Origines de la mécanique quantique (4)

N. Bohr admet que dans l'atome d'hydrogène, l'électron gravite autour du noyau en étant soumis aux forces électrostatique, selon les lois de la mécanique classique, sans rayonner, en gardant une énergie constante. Il admet:

# Origines de la mécanique quantique (4)

N. Bohr admet que dans l'atome d'hydrogène, l'électron gravite autour du noyau en étant soumis aux forces électrostatique, selon les lois de la mécanique classique, sans rayonner, en gardant une énergie constante. Il admet:

- les seules orbites possibles sont celles correspondant à une valeur du moment cinétique multiple entier de  $h/(2\pi)$ .

# Origines de la mécanique quantique (4)

N. Bohr admet que dans l'atome d'hydrogène, l'électron gravite autour du noyau en étant soumis aux forces électrostatique, selon les lois de la mécanique classique, sans rayonner, en gardant une énergie constante. Il admet:

- les seules orbites possibles sont celles correspondant à une valeur du moment cinétique multiple entier de  $h/(2\pi)$ .
- l'atome émet un rayonnement lorsque l'électron passe d'une orbite où son énergie est  $E_1$  à une orbite où cette énergie est  $E_2$ ; le rayonnement est émis de manière discrète, sous forme d'un "photon", dont la fréquence est

$$\nu = (E_1 - E_2)/h .$$

# Origines de la mécanique quantique (4)

N. Bohr admet que dans l'atome d'hydrogène, l'électron gravite autour du noyau en étant soumis aux forces électrostatique, selon les lois de la mécanique classique, sans rayonner, en gardant une énergie constante. Il admet:

- les seules orbites possibles sont celles correspondant à une valeur du moment cinétique multiple entier de  $h/(2\pi)$ .
- l'atome émet un rayonnement lorsque l'électron passe d'une orbite où son énergie est  $E_1$  à une orbite où cette énergie est  $E_2$ ; le rayonnement est émis de manière discrète, sous forme d'un "photon", dont la fréquence est

$$\nu = (E_1 - E_2)/h .$$

Cela permet de rendre compte de manière très satisfaisante du spectre de rayonnement de l'hydrogène, et d'autres atomes plus complexes.

# Principes de la mécanique quantique

Malgré ces succès, l'emploi de "règles de quantification" et de la mécanique classique restait peu satisfaisant. W. Heisenberg et E. Schrödinger, indépendamment, ont en 1925 formulé deux théories quantiques plus systématiques, en apparence différentes mais qui se sont révélées équivalentes.

# Principes de la mécanique quantique

Malgré ces succès, l'emploi de "règles de quantification" et de la mécanique classique restait peu satisfaisant.

W. Heisenberg et E. Schrödinger, indépendamment, ont en 1925 formulé deux théories quantiques plus systématiques, en apparence différentes mais qui se sont révélées équivalentes.

Sur cette base, grâce aux efforts de ces deux savants, de P. Dirac, J. von Neumann, N. Bohr, M. Born et d'autres, une nouvelle Mécanique a été créée: la **Mécanique quantique**.

# Principes de la mécanique quantique (2)

Cette nouvelle Mécanique

- admet la Mécanique classique comme cas limite, pour les systèmes de grande dimension et de grande masse,

# Principes de la mécanique quantique (2)

Cette nouvelle Mécanique

- admet la Mécanique classique comme cas limite, pour les systèmes de grande dimension et de grande masse,
- conduit à des règles de quantification précises, non imposées *a priori*, mais conséquences de la théorie ,

# Principes de la mécanique quantique (2)

Cette nouvelle Mécanique

- admet la Mécanique classique comme cas limite, pour les systèmes de grande dimension et de grande masse,
- conduit à des règles de quantification précises, non imposées *a priori*, mais conséquences de la théorie ,
- “explique” pourquoi la matière et le rayonnement électromagnétique peuvent se comporter tantôt comme des particules et tantôt comme des ondes.

# Principes de la mécanique quantique (2)

Cette nouvelle Mécanique

- admet la Mécanique classique comme cas limite, pour les systèmes de grande dimension et de grande masse,
- conduit à des règles de quantification précises, non imposées *a priori*, mais conséquences de la théorie ,
- “explique” pourquoi la matière et le rayonnement électromagnétique peuvent se comporter tantôt comme des particules et tantôt comme des ondes.

La Mécanique quantique a permis d'expliquer de nombreuses propriétés physiques jusqu'alors mystérieuses, telles que, par exemple, les propriétés chimiques des éléments, la formation des liaisons chimiques.

# Principes de la mécanique quantique (3)

En Mécanique statistique classique, on utilise, pour représenter un système, un **espace des phases** qui est une variété symplectique. Un **état** du système est une mesure de probabilité  $\mu$  sur l'espace des phases. Une **observable** est une fonction  $f$ , à valeurs réelles, définie sur l'espace des phases. La valeur prise par l'observable  $f$  lorsque l'état du système est  $\mu$  est une variable aléatoire dont la loi de probabilité est la mesure image  $f_*\mu$ .

# Principes de la mécanique quantique (3)

En Mécanique statistique classique, on utilise, pour représenter un système, un **espace des phases** qui est une variété symplectique. Un **état** du système est une mesure de probabilité  $\mu$  sur l'espace des phases. Une **observable** est une fonction  $f$ , à valeurs réelles, définie sur l'espace des phases. La valeur prise par l'observable  $f$  lorsque l'état du système est  $\mu$  est une variable aléatoire dont la loi de probabilité est la mesure image  $f_*\mu$ .

En Mécanique quantique, on utilise encore les notions d'**état** et d'**observable**, et lorsque le système est dans un état donné, la valeur prise par l'observable est encore une variable aléatoire. Mais sa loi de probabilité n'est plus la mesure image, par une fonction, définie sur un espace des phases, représentant l'observable, d'une mesure représentant l'état du système.

# Principes de la mécanique quantique (4)

En Mécanique quantique, à un système physique est associé un **espace de Hilbert complexe**  $\mathcal{H}$ .

# Principes de la mécanique quantique (4)

En Mécanique quantique, à un système physique est associé un **espace de Hilbert complexe**  $\mathcal{H}$ .

Un **état pur** du système est un sous-espace vectoriel de dimension 1 de  $\mathcal{H}$ ; un représentant de cet état est un élément non nul  $\Psi$  de ce sous-espace vectoriel, qu'on peut toujours choisir de norme 1.

# Principes de la mécanique quantique (4)

En Mécanique quantique, à un système physique est associé un **espace de Hilbert complexe**  $\mathcal{H}$ .

Un **état pur** du système est un sous-espace vectoriel de dimension 1 de  $\mathcal{H}$ ; un représentant de cet état est un élément non nul  $\Psi$  de ce sous-espace vectoriel, qu'on peut toujours choisir de norme 1.

Une **observable** est un opérateur auto-adjoint  $A$ , pas nécessairement borné, sur  $\mathcal{H}$ .

# Principes de la mécanique quantique (4)

En Mécanique quantique, à un système physique est associé un **espace de Hilbert complexe**  $\mathcal{H}$ .

Un **état pur** du système est un sous-espace vectoriel de dimension 1 de  $\mathcal{H}$ ; un représentant de cet état est un élément non nul  $\Psi$  de ce sous-espace vectoriel, qu'on peut toujours choisir de norme 1.

Une **observable** est un opérateur auto-adjoint  $A$ , pas nécessairement borné, sur  $\mathcal{H}$ .

Le **théorème spectral** permet d'associer à chaque opérateur auto-adjoint  $A$  sur  $\mathcal{H}$  une **mesure à valeurs projections**  $P^A$  sur la tribu de Borel de  $\mathbb{R}$  qui associe, à chaque partie borélienne  $E$  de  $\mathbb{R}$ , un opérateur de projection dans  $\mathcal{H}$  noté  $P_E^A$ .

# Principes de la mécanique quantique (5)

La probabilité pour que la mesure de l'observable  $A$ , lorsque le système est dans l'état pur représenté par le vecteur unitaire  $\Psi$  de  $\mathcal{H}$ , donne un résultat appartenant au borélien  $E$  de  $\mathbb{R}$ , est

$$\langle P_E^A(\Psi) \mid \Psi \rangle,$$

où  $(\Phi, \Psi) \mapsto \langle \Phi \mid \Psi \rangle$  est la forme sesquilinéaire qui définit la structure hilbertienne de  $\mathcal{H}$ .

# Principes de la mécanique quantique (5)

La probabilité pour que la mesure de l'observable  $A$ , lorsque le système est dans l'état pur représenté par le vecteur unitaire  $\Psi$  de  $\mathcal{H}$ , donne un résultat appartenant au borélien  $E$  de  $\mathbb{R}$ , est

$$\langle P_E^A(\Psi) \mid \Psi \rangle,$$

où  $(\Phi, \Psi) \mapsto \langle \Phi \mid \Psi \rangle$  est la forme sesquilinéaire qui définit la structure hilbertienne de  $\mathcal{H}$ .

L'évolution de l'état du système au cours du temps est déterminée par la donnée d'un opérateur autoadjoint  $H$ , le **Hamiltonien** du système.

# Principes de la mécanique quantique (6)

Dans le **schéma de Schrödinger**, l'élément de  $\mathcal{H}$  qui représente l'état du système, noté  $\Psi_t$ , dépend du temps  $t$ , tandis que les observables qui représentent les diverses propriétés physiques du système sont indépendants du temps. On a

$$\Psi_t = \exp(-itH)\Psi_0 ,$$

# Principes de la mécanique quantique (6)

Dans le **schéma de Schrödinger**, l'élément de  $\mathcal{H}$  qui représente l'état du système, noté  $\Psi_t$ , dépend du temps  $t$ , tandis que les observables qui représentent les diverses propriétés physiques du système sont indépendants du temps. On a

$$\Psi_t = \exp(-itH)\Psi_0,$$

et par suite  $t \mapsto \Psi_t$  est solution de l'**équation de Schrödinger abstraite**

$$\frac{d\Psi_t}{dt} = -iH\Psi_t.$$

# Principes de la mécanique quantique (7)

Dans le **schéma de Heisenberg**, l'état du système est représenté par un élément fixe  $\Psi_0$  de  $\mathcal{H}$ , ne dépendant pas du temps, tandis que les observables correspondant aux grandeurs physiques du système dépendent du temps. Si  $A_0$  est l'opérateur autoadjoint représentant une grandeur physique donnée à l'instant 0, l'opérateur qui représente cette même grandeur physique à l'instant  $t$  est

$$A_t = \exp(-itH) \circ A_0 \circ \exp(itH),$$

# Principes de la mécanique quantique (7)

Dans le **schéma de Heisenberg**, l'état du système est représenté par un élément fixe  $\Psi_0$  de  $\mathcal{H}$ , ne dépendant pas du temps, tandis que les observables correspondant aux grandeurs physiques du système dépendent du temps. Si  $A_0$  est l'opérateur autoadjoint représentant une grandeur physique donnée à l'instant 0, l'opérateur qui représente cette même grandeur physique à l'instant  $t$  est

$$A_t = \exp(-itH) \circ A_0 \circ \exp(itH),$$

et  $t \mapsto A_t$  est solution de l'équation différentielle

$$\frac{dA_t}{dt} = -i[H, A_t] = -i(H \circ A_t - A_t \circ H).$$

# Quantification d'un système classique

La Mécanique quantique n'est pas une théorie physique autonome: elle s'appuie nécessairement sur la Mécanique et l'électromagnétisme classiques, car elle ne fait que fournir des prévisions sur des résultats de mesures. Or chaque mesure résulte d'une interaction du système étudié avec un appareil de mesure, dont le comportement est régi par la Physique classique.

# Quantification d'un système classique

La Mécanique quantique n'est pas une théorie physique autonome: elle s'appuie nécessairement sur la Mécanique et l'électromagnétisme classiques, car elle ne fait que fournir des prévisions sur des résultats de mesures. Or chaque mesure résulte d'une interaction du système étudié avec un appareil de mesure, dont le comportement est régi par la Physique classique.

D'autre part, la description d'un système classique au moyen de la Mécanique classique doit être une première approximation d'une description plus fine de ce même système au moyen de la Mécanique quantique. Comment faire, lorsqu'on connaît les équations qui régissent l'évolution d'un système dans le cadre de la Mécanique classique, pour trouver les équations quantiques correspondantes? C'est le problème de la **quantification**.

# Quantification d'un système classique (2)

Rappelons l'équation qui, dans le schéma de Heisenberg, décrit l'évolution d'une observable quantique en fonction du temps:

$$\frac{dA_t}{dt} = -i[H, A_t] = -i(H \circ A_t - A_t \circ H).$$

# Quantification d'un système classique (2)

Rappelons l'équation qui, dans le schéma de Heisenberg, décrit l'évolution d'une observable quantique en fonction du temps:

$$\frac{dA_t}{dt} = -i[H, A_t] = -i(H \circ A_t - A_t \circ H).$$

Cette équation ressemble beaucoup à celle qui régit l'évolution d'une observable classique, pour un système hamiltonien, que nous allons rappeler.

# Quantification d'un système classique (2)

Rappelons l'équation qui, dans le schéma de Heisenberg, décrit l'évolution d'une observable quantique en fonction du temps:

$$\frac{dA_t}{dt} = -i[H, A_t] = -i(H \circ A_t - A_t \circ H).$$

Cette équation ressemble beaucoup à celle qui régit l'évolution d'une observable classique, pour un système hamiltonien, que nous allons rappeler.

Soit  $(M, \omega)$  une variété symplectique et  $E \in C^\infty(M, \mathbb{R})$  une fonction, le **hamiltonien classique** (dont la signification physique est l'**énergie** du système). Soit  $X_E$  le champ de vecteurs hamiltonien associé à  $E$ , défini par

$$i(X_E)\omega = -dE.$$

# Quantification d'un système classique (3)

L'équation différentielle déterminée par  $X_E$ , appelée **équation de Hamilton**, s'écrit

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = X_E(\varphi(t)),$$

ou, en coordonnées canoniques  $(x^1, \dots, x^n, p_1, \dots, p_n)$ ,

$$\frac{dx^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x^i}, \quad 1 \leq i \leq n.$$

# Quantification d'un système classique (4)

Soit  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$  une observable classique. Si  $t \mapsto \varphi(t) = (x^i(t), p_i(t))$  est une solution de l'équation de Hamilton, on a

$$\frac{df(\varphi(t))}{dt} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial f}{\partial x^i} \frac{\partial E}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial E}{\partial x^i} \right) (\varphi(t)).$$

# Quantification d'un système classique (4)

Soit  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$  une observable classique. Si  $t \mapsto \varphi(t) = (x^i(t), p_i(t))$  est une solution de l'équation de Hamilton, on a

$$\frac{df(\varphi(t))}{dt} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial f}{\partial x^i} \frac{\partial E}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial E}{\partial x^i} \right) (\varphi(t)).$$

Cela s'écrit aussi, en utilisant le crochet de Poisson,

$$\frac{df(\varphi(t))}{dt} = \{E, f\}(\varphi(t)).$$

# Quantification d'un système classique (5)

On peut mettre cette dernière équation sous une forme encore plus voisine de celle de l'équation quantique en faisant intervenir le **flot réduit**  $\Phi_t$  du champ de vecteurs  $X_E$ .  
On peut alors écrire

$$\frac{d(\Phi_t^* f)}{dt} = \Phi_t^* \{E, f\} = \{E, \Phi_t^* f\},$$

car  $\Phi_t^* E = E$  (l'énergie est une intégrale première de  $X_E$ ),  
et le tenseur de Poisson est aussi invariant par le flot  $\Phi_t$ ,

# Quantification d'un système classique (5)

On peut mettre cette dernière équation sous une forme encore plus voisine de celle de l'équation quantique en faisant intervenir le **flot réduit**  $\Phi_t$  du champ de vecteurs  $X_E$ .  
On peut alors écrire

$$\frac{d(\Phi_t^* f)}{dt} = \Phi_t^* \{E, f\} = \{E, \Phi_t^* f\},$$

car  $\Phi_t^* E = E$  (l'énergie est une intégrale première de  $X_E$ ),  
et le tenseur de Poisson est aussi invariant par le flot  $\Phi_t$ ,  
à comparer à l'équation quantique

$$\frac{dA_t}{dt} = -i[H, A_t] = -i(H \circ A_t - A_t \circ H).$$

# Quantification d'un système classique (6)

Cette comparaison conduit à penser que la quantification d'un système classique devrait permettre d'associer, à un système hamiltonien classique  $(M, \omega, E)$ , un espace de Hilbert complexe  $\mathcal{H}$ , et d'associer à chaque observable classique  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ , une observable quantique, c'est-à-dire un opérateur autoadjoint  $F$  sur  $\mathcal{H}$ , de manière telle que l'application  $f \mapsto F$  soit un homomorphisme de l'algèbre de Lie  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  (munie du crochet de Poisson) dans une algèbre de Lie d'opérateurs autoadjoints sur  $\mathcal{H}$  (avec, pour loi de composition, le produit du commutateur par une constante imaginaire pure convenablement choisie).

# Quantification d'un système classique (6)

Cette comparaison conduit à penser que la quantification d'un système classique devrait permettre d'associer, à un système hamiltonien classique  $(M, \omega, E)$ , un espace de Hilbert complexe  $\mathcal{H}$ , et d'associer à chaque observable classique  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ , une observable quantique, c'est-à-dire un opérateur autoadjoint  $F$  sur  $\mathcal{H}$ , de manière telle que l'application  $f \mapsto F$  soit un homomorphisme de l'algèbre de Lie  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  (munie du crochet de Poisson) dans une algèbre de Lie d'opérateurs autoadjoints sur  $\mathcal{H}$  (avec, pour loi de composition, le produit du commutateur par une constante imaginaire pure convenablement choisie. En fait, la loi de composition de l'algèbre de Lie des observables quantiques est (avec  $\hbar = h/(2\pi)$ ):

$$(A, B) \mapsto \{A, B\} = \frac{i}{\hbar}(A \circ B - B \circ A).$$

# La quantification canonique formelle

Le procédé de quantification traditionnellement employé est la **quantification canonique formelle**. Il s'applique aux systèmes hamiltoniens classiques de  $N$  particules ponctuelles, de masses  $m_i$ , dont l'énergie potentielle  $V$  ne dépend que des positions de ces particules. On notera  $x^i$  (avec  $1 \leq i \leq n = 3N$ ) les coordonnées de ces particules dans un repère cartésien orthonormé, et on posera

$$p_i = m_i \frac{dx^i}{dt},$$

$m_i$  désignant la masse de la particule  $i$ .

# La quantification canonique formelle

Le procédé de quantification traditionnellement employé est la **quantification canonique formelle**. Il s'applique aux systèmes hamiltoniens classiques de  $N$  particules ponctuelles, de masses  $m_i$ , dont l'énergie potentielle  $V$  ne dépend que des positions de ces particules. On notera  $x^i$  (avec  $1 \leq i \leq n = 3N$ ) les coordonnées de ces particules dans un repère cartésien orthonormé, et on posera

$$p_i = m_i \frac{dx^i}{dt},$$

$m_i$  désignant la masse de la particule  $i$ . L'**énergie** du système est

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{m_i} + V(x^1, \dots, x^n).$$

# La quantification canonique formelle (2)

On prend pour espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  l'espace  $L^2(\mathbb{R}^n)$  des (classes de) fonctions de carré intégrable des  $n$  variables  $x^1, \dots, x^n$ . On associe aux observables classiques  $x^i$  et  $p_i$  les opérateurs

$\mu_{x^i}$ , multiplication par la coordonnée  $x^i$ ,

et

$$P_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^i}.$$

# La quantification canonique formelle (3)

L'énergie quantique, encore notée  $E$  comme l'énergie classique, s'obtient en remplaçant dans celle-ci les  $p_i$  par les opérateurs quantiques correspondants et en considérant  $V(x^1, \dots, x^n)$  comme opérateur de multiplication par  $V(x^1, \dots, x^n)$ . On a donc, si  $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$  appartient au domaine de définition de l'opérateur  $E$ ,

$$E(\Psi) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^j{}^2} + V\Psi .$$

# La quantification canonique formelle (3)

L'énergie quantique, encore notée  $E$  comme l'énergie classique, s'obtient en remplaçant dans celle-ci les  $p_i$  par les opérateurs quantiques correspondants et en considérant  $V(x^1, \dots, x^n)$  comme opérateur de multiplication par  $V(x^1, \dots, x^n)$ . On a donc, si  $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$  appartient au domaine de définition de l'opérateur  $E$ ,

$$E(\Psi) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^n \frac{1}{m_j} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^j{}^2} + V\Psi .$$

Le **hamiltonien quantique**  $H$  est lié à l'énergie quantique  $E$  par la relation très simple

$$E = \hbar H .$$

# La quantification canonique formelle (4)

Les applications de la quantification canonique formelle à des systèmes physiques ont conduit à de nombreux succès. Cependant, on peut se poser, à propos de ce procédé, diverses questions. Par exemple:

# La quantification canonique formelle (4)

Les applications de la quantification canonique formelle à des systèmes physiques ont conduit à de nombreux succès. Cependant, on peut se poser, à propos de ce procédé, diverses questions. Par exemple:

Pourquoi employer des coordonnées cartésiennes orthonormées, plutôt que des coordonnées curvilignes plus générales? Peut-on mettre le procédé de quantification canonique formelle sous une forme plus intrinsèque?

# La quantification canonique formelle (4)

Les applications de la quantification canonique formelle à des systèmes physiques ont conduit à de nombreux succès. Cependant, on peut se poser, à propos de ce procédé, diverses questions. Par exemple:

Pourquoi employer des coordonnées cartésiennes orthonormées, plutôt que des coordonnées curvilignes plus générales? Peut-on mettre le procédé de quantification canonique formelle sous une forme plus intrinsèque?

Comment trouver l'expression de l'énergie quantique dans des cas plus généraux, par exemple lorsque l'énergie classique comporte des termes de la forme  $p_i x^i$ ? Si l'on transforme ces termes en remplaçant  $p_i$  par l'opérateur  $P_i$  et  $x^i$  par l'opérateur de multiplication par  $x^i$ , dans quel ordre doit-on placer ces deux opérateurs, qui ne commutent pas?

# La quantification géométrique

La théorie de la **quantification géométrique** (qui a été développée principalement par **B. Kostant** et **J.-M. Souriau**, pour des motivations autant mathématiques que physiques) tente de répondre à ces questions. On distingue en général deux étapes.

# La quantification géométrique

La théorie de la **quantification géométrique** (qui a été développée principalement par **B. Kostant** et **J.-M. Souriau**, pour des motivations autant mathématiques que physiques) tente de répondre à ces questions. On distingue en général deux étapes.

Première étape: la **préquantification**. Cette étape permet, étant donné une variété symplectique  $(M, \omega)$  vérifiant certaines conditions, dite **préquantifiable**, d'associer à chaque fonction différentiable sur  $M$  un opérateur sur l'espace des sections d'un certain espace fibré ayant pour base  $M$ . Cette correspondance est un homomorphisme d'algèbres de Lie.

# La quantification géométrique

La théorie de la **quantification géométrique** (qui a été développée principalement par **B. Kostant** et **J.-M. Souriau**, pour des motivations autant mathématiques que physiques) tente de répondre à ces questions. On distingue en général deux étapes.

Première étape: la **préquantification**. Cette étape permet, étant donné une variété symplectique  $(M, \omega)$  vérifiant certaines conditions, dite **préquantifiable**, d'associer à chaque fonction différentiable sur  $M$  un opérateur sur l'espace des sections d'un certain espace fibré ayant pour base  $M$ . Cette correspondance est un homomorphisme d'algèbres de Lie.

Deuxième étape: la **quantification**. A partir de l'espace des sections de l'espace fibré précédent, on construit l'espace de Hilbert utilisé en Mécanique quantique.

# La préquantification

Soit  $(M, \omega)$  une variété symplectique. La préquantification de cette variété est présentée, par B. Kostant et J.-M. Souriau, de deux manières légèrement différentes, mais équivalentes.

# La préquantification

Soit  $(M, \omega)$  une variété symplectique. La préquantification de cette variété est présentée, par B. Kostant et J.-M. Souriau, de deux manières légèrement différentes, mais équivalentes.

B. Kostant étudie l'existence d'un **fibré en droites complexes**  $\pi : L \rightarrow M$  de base  $M$ , muni d'une **structure hermitienne**  $H : (u, v) \mapsto H(u, v) = \langle u | v \rangle$  et d'une **connexion** pour laquelle cette structure hermitienne est invariante, dont la courbure est égale à  $\omega$ .

# La préquantification

Soit  $(M, \omega)$  une variété symplectique. La préquantification de cette variété est présentée, par B. Kostant et J.-M. Souriau, de deux manières légèrement différentes, mais équivalentes.

B. Kostant étudie l'existence d'un **fibré en droites complexes**  $\pi : L \rightarrow M$  de base  $M$ , muni d'une **structure hermitienne**  $H : (u, v) \mapsto H(u, v) = \langle u | v \rangle$  et d'une **connexion** pour laquelle cette structure hermitienne est invariante, dont la courbure est égale à  $\omega$ .

J.-M. Souriau étudie l'existence d'un **fibré en cercles**  $\varpi : U \rightarrow M$ , de base  $M$ , et d'une **1-forme de contact**  $\alpha$  sur  $U$  telle que  $d\alpha = \varpi^*\omega$ .

# La préquantification

Soit  $(M, \omega)$  une variété symplectique. La préquantification de cette variété est présentée, par B. Kostant et J.-M. Souriau, de deux manières légèrement différentes, mais équivalentes.

B. Kostant étudie l'existence d'un **fibré en droites complexes**  $\pi : L \rightarrow M$  de base  $M$ , muni d'une **structure hermitienne**  $H : (u, v) \mapsto H(u, v) = \langle u|v \rangle$  et d'une **connexion** pour laquelle cette structure hermitienne est invariante, dont la courbure est égale à  $\omega$ .

J.-M. Souriau étudie l'existence d'un **fibré en cercles**  $\varpi : U \rightarrow M$ , de base  $M$ , et d'une **1-forme de contact**  $\alpha$  sur  $U$  telle que  $d\alpha = \varpi^*\omega$ .

Ces deux problèmes sont équivalents, le fibré en cercles  $U$  s'identifiant à l'ensemble des éléments  $u$  de  $L$  tels que  $\langle u|u \rangle = 1$ , et la forme de contact  $\alpha$  à la forme de connexion.

# La préquantification (2)

La forme de connexion est une 1-forme  $\alpha$ , définie sur  $L^* =$  complémentaire dans  $L$  de la section nulle, invariante par l'action de  $\mathbb{C}^* = \mathbb{C} - \{0\}$  par multiplication, et vérifiant, pour tout isomorphisme  $\sigma$  de  $\mathbb{C}^*$  sur une fibre de  $L^*$ :

$$\sigma^* \alpha = \frac{1}{2\pi i} \frac{dz}{z} .$$

# La préquantification (2)

La forme de connexion est une 1-forme  $\alpha$ , définie sur  $L^* =$  complémentaire dans  $L$  de la section nulle, invariante par l'action de  $\mathbb{C}^* = \mathbb{C} - \{0\}$  par multiplication, et vérifiant, pour tout isomorphisme  $\sigma$  de  $\mathbb{C}^*$  sur une fibre de  $L^*$ :

$$\sigma^* \alpha = \frac{1}{2\pi i} \frac{dz}{z}.$$

B. Kostant et J.-M. Souriau montrent que le problème qu'ils étudient (existence d'un fibré en droites complexes, ou d'un fibré en cercles, vérifiant les propriétés indiquées) a une solution si et seulement si la **classe de cohomologie** de la forme symplectique  $\omega$  est **entière** (ce théorème est parfois aussi attribué à **A. Weil**).

# La préquantification (3)

Lorsque c'est le cas, ils montrent que l'ensemble des classes d'isomorphisme de fibrés solutions du problème est un espace homogène principal du groupe  $\widehat{\Pi}_1(M)$  (groupe des caractères du groupe fondamental  $\Pi_1(M)$ ).

# La préquantification (3)

Lorsque c'est le cas, ils montrent que l'ensemble des classes d'isomorphisme de fibrés solutions du problème est un espace homogène principal du groupe  $\widehat{\Pi}_1(M)$  (groupe des caractères du groupe fondamental  $\Pi_1(M)$ ).

Une fois choisi un fibré en droites complexes  $\pi : L \rightarrow M$  ayant les propriétés voulues, on peut associer, à chaque fonction  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ , un opérateur  $\delta(f)$  agissant sur l'espace des sections différentiables de ce fibré, selon la formule

$$\delta(f)s = \nabla_{X_f}s - 2\pi i f s,$$

où  $X_f$  est le champ de vecteurs hamiltonien sur  $M$  associé à  $f$ , et  $\nabla$  l'opérateur de dérivation covariante de la connexion.

# La préquantification (4)

L'opérateur  $\delta(f)$  peut aussi être considéré comme un champ de vecteurs sur le fibré  $L^*$  (ou, dans le formalisme de J.-M. Souriau, sur le fibré en cercles  $U$ ), projetable sur  $M$  et ayant  $X_f$  pour projection. Dans le formalisme de Souriau, c'est le champ hamiltonien associé à  $\varpi^* f$  sur la variété de contact  $(U, \alpha)$ .

# La préquantification (4)

L'opérateur  $\delta(f)$  peut aussi être considéré comme un champ de vecteurs sur le fibré  $L^*$  (ou, dans le formalisme de J.-M. Souriau, sur le fibré en cercles  $U$ ), projectable sur  $M$  et ayant  $X_f$  pour projection. Dans le formalisme de Souriau, c'est le champ hamiltonien associé à  $\varpi^* f$  sur la variété de contact  $(U, \alpha)$ .

L'application  $\delta : f \mapsto \delta(f)$  est un **homomorphisme de l'algèbre de Lie**  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  (munie du crochet de Poisson) dans une **algèbre de Lie d'opérateurs** sur l'espace des sections différentiables de  $L$ , avec le commutateur pour loi de composition:

$$\delta(\{f, g\}) = \delta(f) \circ \delta(g) - \delta(g) \circ \delta(f).$$

# La préquantification (5)

On peut munir l'espace des sections différentiables et à support compact du fibré  $L$  d'une structure préhilbertienne, et considérer l'espace de Hilbert obtenu en le complétant.

# La préquantification (5)

On peut munir l'espace des sections différentiables et à support compact du fibré  $L$  d'une structure préhilbertienne, et considérer l'espace de Hilbert obtenu en le complétant.

En prolongeant (lorsque c'est possible) les opérateurs  $\delta(f)$  en opérateurs anti-adjoints sur cet espace de Hilbert, et en multipliant les opérateurs obtenus par une constante imaginaire pure (pour transformer les opérateurs anti-adjoints en opérateurs autoadjoints), on obtient un homomorphisme d'une sous-algèbre de Lie de  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  dans une algèbre de Lie d'opérateurs autoadjoints sur un espace de Hilbert.

# La préquantification (5)

On peut munir l'espace des sections différentiables et à support compact du fibré  $L$  d'une structure préhilbertienne, et considérer l'espace de Hilbert obtenu en le complétant.

En prolongeant (lorsque c'est possible) les opérateurs  $\delta(f)$  en opérateurs anti-adjoints sur cet espace de Hilbert, et en multipliant les opérateurs obtenus par une constante imaginaire pure (pour transformer les opérateurs anti-adjoints en opérateurs autoadjoints), on obtient un homomorphisme d'une sous-algèbre de Lie de  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  dans une algèbre de Lie d'opérateurs autoadjoints sur un espace de Hilbert.

Appliquée à la **variété des mouvements** de certains systèmes hamiltoniens, la préquantification explique, par exemple, le caractère discret de l'ensemble des valeurs de l'énergie pour des systèmes tels que l'atome d'hydrogène.

# La préquantification (6)

Pourtant, la préquantification n'est qu'une première étape. Appliquée à la variété symplectique  $\mathbb{R}^{2n}$  (coordonnées  $x^1, \dots, x^n, p_1, \dots, p_n$ ), munie de la forme symplectique usuelle  $\sum_{j=1}^n dp_j \wedge dx^j$ , la préquantification conduit à utiliser  $L^2(\mathbb{R}^{2n})$  comme espace de Hilbert, et à associer

- à  $x^j$  l'opérateur  $i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} + x^j$ ,
- à  $p_j$  l'opérateur  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j}$ .

# La préquantification (6)

Pourtant, la préquantification n'est qu'une première étape. Appliquée à la variété symplectique  $\mathbb{R}^{2n}$  (coordonnées  $x^1, \dots, x^n, p_1, \dots, p_n$ ), munie de la forme symplectique usuelle  $\sum_{j=1}^n dp_j \wedge dx^j$ , la préquantification conduit à utiliser  $L^2(\mathbb{R}^{2n})$  comme espace de Hilbert, et à associer

- à  $x^j$  l'opérateur  $i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} + x^j$ ,
- à  $p_j$  l'opérateur  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^j}$ .

Cela ne correspond pas à ce que donne la quantification canonique formelle, dans laquelle l'espace de Hilbert est  $L^2(\mathbb{R}^n)$ . La représentation obtenue au moyen de la préquantification n'est pas irréductible.

# La quantification

La seconde étape a pour but de construire, à partir du fibré préquantique et de l'homomorphisme d'algèbres de Lie  $f \mapsto \delta(f)$ , un sous-espace de l'espace des sections du fibré  $L$  permettant d'obtenir une représentation irréductible d'une sous-algèbre de l'algèbre de Lie  $C^\infty(M, \mathbb{R})$ .

# La quantification

La seconde étape a pour but de construire, à partir du fibré préquantique et de l'homomorphisme d'algèbres de Lie  $f \mapsto \delta(f)$ , un sous-espace de l'espace des sections du fibré  $L$  permettant d'obtenir une représentation irréductible d'une sous-algèbre de l'algèbre de Lie  $C^\infty(M, \mathbb{R})$ .

On utilise pour cela une **polarisation** de la variété symplectique  $(M, \omega)$ , c'est-à-dire un feuilletage de  $M$  dont les feuilles sont des sous-variétés lagrangiennes. Dans les cas les plus favorables, les feuilles de cette polarisation sont simplement connexes, leur ensemble est une variété différentiable  $N$  et la projection de  $M$  sur  $N$  est une submersion. On ne considère plus que les sections de  $L$  qui sont **covariantes constantes** le long des feuilles de la polarisation, et on montre qu'elles s'identifient aux sections d'un fibré réduit, de base  $N$ .

# La quantification (2)

Si une fonction  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$  est telle que  $\delta(f)$ , considéré comme champ de vecteurs sur  $L^*$ , laisse, par son flot, la polarisation invariante, on peut considérer  $\delta(f)$  comme opérant sur l'espace des sections du fibré réduit de base  $N$ .

# La quantification (2)

Si une fonction  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$  est telle que  $\delta(f)$ , considéré comme champ de vecteurs sur  $L^*$ , laisse, par son flot, la polarisation invariante, on peut considérer  $\delta(f)$  comme opérant sur l'espace des sections du fibré réduit de base  $N$ .

En utilisant des **demi-densités**, on peut construire, à partir de l'espace des sections différentiables à support compact du fibré réduit de base  $N$ , un espace préhilbertien. En complétant cet espace on obtient une représentation d'une sous-algèbre de l'algèbre de Lie  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  dans cet espace de Hilbert. Il reste à s'assurer que cette représentation est irréductible.

# La quantification (2)

Si une fonction  $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$  est telle que  $\delta(f)$ , considéré comme champ de vecteurs sur  $L^*$ , laisse, par son flot, la polarisation invariante, on peut considérer  $\delta(f)$  comme opérant sur l'espace des sections du fibré réduit de base  $N$ .

En utilisant des **demi-densités**, on peut construire, à partir de l'espace des sections différentiables à support compact du fibré réduit de base  $N$ , un espace préhilbertien. En complétant cet espace on obtient une représentation d'une sous-algèbre de l'algèbre de Lie  $C^\infty(M, \mathbb{R})$  dans cet espace de Hilbert. Il reste à s'assurer que cette représentation est irréductible.

Appliquée à  $\mathbb{R}^{2n}$  avec la polarisation verticale, cette méthode permet de retrouver les formules données par la quantification canonique formelle pour les opérateurs correspondant aux  $x^j$  et  $p_j$ .

# La quantification (3)

**Malheureusement**, les fonctions  $f$  telles que  $\delta(f)$  soit compatible avec la polarisation verticale sont les polynômes de degré au plus 1 en les  $p_j$ , à coefficients fonctions de  $x^1, \dots, x^n$ . La plupart des hamiltoniens usuels sont quadratiques en les  $p_j$ , donc ne peuvent pas être quantifiés par ce procédé!

# La quantification (3)

**Malheureusement**, les fonctions  $f$  telles que  $\delta(f)$  soit compatible avec la polarisation verticale sont les polynômes de degré au plus 1 en les  $p_j$ , à coefficients fonctions de  $x^1, \dots, x^n$ . La plupart des hamiltoniens usuels sont quadratiques en les  $p_j$ , donc ne peuvent pas être quantifiés par ce procédé!

On est donc conduit à transporter la polarisation au moyen du flot des champs de vecteurs  $\delta(f)$ . Ce qui conduit à devoir définir des isomorphismes entre les espaces de Hilbert construits avec deux polarisations différentes. On doit encore remplacer les demi-densités par des **demi-formes**, afin de gérer les singularités qui apparaissent lorsque les deux polarisations considérées ne sont pas transverses . . .

# Références

**S. Bates and A. Weinstein**, *Lectures on Geometric Quantization*, Berkeley Mathematics Lecture Notes 8, Amer. Math. Soc., Providence, 1997.

**R. J. Blattner**, Quantization and Representation Theory, in *Harmonic Analysis on Homogeneous Spaces*, Proceedings of Symposia in Pure Mathematics 26, American Mathematical Society, Providence, 1973.

**P. A. M. Dirac**, *Lectures on Quantum Mechanics*, Belfer graduate School of Science, Yeshiva University, New York, 1964.

**W. Heisenberg**, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover, New York 1949 (first published by the University of Chicago Press, 1930).

**B. Kostant**, *Quantization and Unitary Representations, part 1, Prequantization*, Lecture Notes in Mathematics 170 (1970), 87–208.

# Références (2)

L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Éditions Mir, Moscou, 1967.

G. W. Mackey, *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1963.

D. J. Simms and N. M. J. Woodhouse, *Lectures on Geometric Quantization*, Lecture Notes in Physics 53, Springer, Berlin 1976.

J.-M. Souriau, *Structure des systèmes dynamiques*, Dunod, Paris, 1970.

N. Woodhouse, *Geometric Quantization*, Clarendon Press, Oxford, 1980.