

ANNALES DE L'I. H. P., SECTION A

J.-F. VINSON

Fonctions classiques correspondant aux opérateurs quantiques

Annales de l'I. H. P., section A, tome 12, n° 3 (1970), p. 255-261

http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1970__12_3_255_0

© Gauthier-Villars, 1970, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annales de l'I. H. P., section A » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

Fonctions classiques correspondant aux opérateurs quantiques

par

J.-F. VINSON

Institut Henri Poincaré

I. — INTRODUCTION

Depuis l'origine de la formulation axiomatique de la Mécanique Quantique un problème est resté en suspens. C'est celui posé par la détermination des « observables quantiques » qui doivent correspondre aux grandeurs physiques classiques. Certes, le formalisme de la Mécanique Quantique permet de déterminer les observables quantiques qui correspondent aux coordonnées canoniques et la substitution des coordonnées par les observables est le seul principe que l'on peut appliquer : c'est la « règle de substitution ». Mais cette règle s'avère insuffisante et ambiguë. En effet, à une fonction classique des coordonnées correspondent plusieurs observables quantiques selon l'ordre dans lequel on dispose les termes consistant en produits de coordonnées. Le résultat est une conséquence directe de la non-commutativité des observables quantiques qui est un trait essentiel de la Mécanique Quantique. C'est ainsi que Messiah [0] affirme : « Aucune règle basée sur la correspondance avec la Mécanique Classique ne peut résoudre de telles ambiguïtés... Il faut donc fixer empiriquement la forme précise... »

Quelques règles d'association essentiellement empiriques ont été énoncées initialement par Dirac [1], Von Neumann [2] et Weyl [3], puis par Yvon [4] et Rivier [5]. Enfin, plus récemment, de nombreux auteurs [6 à 12] à l'instigation de Shewell [13] ont étudié les règles dites d'ordre standard et antistandard et d'ordre normal et antinormal sans toutefois parvenir à déterminer laquelle de ces différentes règles il convenait d'utiliser.

Le problème posé a repris récemment de l'importance car si l'on peut parvenir empiriquement à associer un opérateur « convenable » à une grandeur classique, le problème inverse s'avère beaucoup plus délicat étant donné les différents opérateurs de base qui peuvent intervenir. C'est ainsi que l'habitude prise d'introduire de nouveaux opérateurs hamiltoniens forgés uniquement d'après la Théorie Quantique rend très difficile la « traduction » de ces problèmes en Théorie Classique. On ne peut plus établir de véritable correspondance entre un problème posé en termes quantiques et le problème classique équivalent.

Nous nous proposons d'énoncer une règle générale d'association entre les observables quantiques et les fonctions classiques qui satisfasse le critère d'unicité (association biunivoque) et qui, à tout opérateur Hermitien fasse correspondre une fonction classique réelle. Nous montrerons, en utilisant le formalisme des états cohérents que cette règle qui recouvre la règle « d'ordre normal » est une conséquence nécessaire de la Théorie Quantique, ce qui lui enlève tout caractère empirique.

II. — RÈGLE D'ASSOCIATION OPÉRATEUR QUANTIQUE-FONCTION CLASSIQUE

Le formalisme des « états cohérents » créé par Glauber [14] pour s'appliquer au domaine de l'Optique Quantique constitue une méthode générale que l'on peut aisément adapter à la Mécanique [6 b] de la façon suivante :

Soient q et p les coordonnées d'un système dynamique classique à un seul degré de liberté. Introduisons la quantité α , nombre complexe,

$$\alpha = \frac{q + ip}{\sqrt{2}} \quad , \quad \alpha^* = \frac{q - ip}{\sqrt{2}} \quad .$$

Les observables quantiques \hat{q} et \hat{p} qui correspondent aux coordonnées q et p canoniques vérifient la relation de commutation :

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i \quad ,$$

Définissons les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+

$$\hat{a} = \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad , \quad \hat{a}^+ = \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad .$$

Ils vérifient la relation de commutation

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad .$$

On peut alors introduire le formalisme des états cohérents normalisés $|\alpha\rangle$ et de la représentation diagonale $P(\alpha)$:

$$(1) \quad \begin{aligned} \hat{a}|\alpha\rangle &= \alpha|\alpha\rangle, \\ \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha &= 1, \\ \Omega &= \int \omega(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha, \\ d^2\alpha &= d(\Re \alpha) \cdot d(\Im \alpha). \end{aligned}$$

En particulier pour l'opérateur densité $\hat{\rho}$ d'un mélange statistique quantique

$$\hat{\rho} = \int P(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha.$$

La valeur moyenne d'une observable $\hat{\Omega}$ est alors fournie par une « intégrale de trace »

$$\text{Trace} \{ \hat{\rho} \hat{\Omega} \} = \int P(\alpha) \Omega(\alpha) d^2\alpha, \quad \Omega(\alpha) = \langle \alpha | \hat{\Omega} | \alpha \rangle.$$

Cette intégrale de trace entièrement déduite de la Théorie Quantique a le grand avantage d'être purement algébrique « effaçant » ainsi en apparence le caractère non-commutatif de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ et de l'observable $\hat{\Omega}$. Nous avons souvent eu recours à ce type de relation lorsque nous avons établi la nature de la correspondance entre la Théorie Classique et la Théorie Quantique des Champs en Electrodynamique [15].

Ce type de relation est en effet privilégié pour établir une comparaison avec le calcul d'une valeur moyenne en théorie classique qui est donné par l'expression

$$\langle F(E) \rangle = \int \mathcal{P}(\{C_k\}) F[E(\{C_k\})] \prod_k d^2C_k,$$

où les $\{C_k\} = C_1, C_2, \dots, C_k \dots$ sont les coefficients du développement en série de Fourier du champ $E(\{C_k\})$.

On peut montrer en effet, que $P(\alpha)$ constitue l'équivalent de la fonction de répartition statistique $p(\{C_k\})$ ce qui conduit nécessairement à attribuer à la fonction $\Omega(\alpha)$ de la variable complexe α le rôle de la fonction $F[E(\{C_k\})]$ représentant la grandeur physique classique.

D'autre part, la discussion que nous avons menée au sujet de la représentation diagonale a permis d'établir qu'elle était le seul cadre compatible avec la Théorie Quantique où les opérateurs pouvaient sous certaines

conditions n'intervenir que sous la forme de la fonction de la variable complexe α

$$\Omega(\alpha) = \langle \alpha | \hat{\Omega} | \alpha \rangle ,$$

ce qui justifie l'appellation de « diagonale » attribuée à cette représentation. Nous sommes ainsi assurés qu'il n'y a pas d'autre façon possible d'associer directement un opérateur quantique et une fonction classique.

Nous proposons donc comme règle générale d'association entre les observables quantiques et les grandeurs physiques classiques la relation

$$(3) \quad \Omega'(p, q) = \Omega' \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2} (\alpha + \alpha^*) \right), \left(\frac{i\sqrt{2}}{2} (\alpha - \alpha^*) \right) \right] = \Omega(\alpha) = \langle \alpha | \hat{\Omega} | \alpha \rangle .$$

$\hat{\Omega}$ est l'opérateur quantique qui est associé à la fonction classique $\Omega'(p, q)$ et réciproquement.

La justification de cette règle tient à ce qu'elle est définie en termes « opérationnels ». En effet, au lieu de faire reposer l'association entre opérateurs et fonctions sur des considérations formelles, elles associe l'opérateur et la fonction qui, selon le formalisme séparé des deux théories permettent d'obtenir une valeur moyenne identique. Nous ne parlerons donc désormais d'association qu'au sens restreint que nous venons de définir.

Montrons que la règle (3) recouvre l'ancienne « règle de substitution ». Soit l'opérateur

$$\Omega'(\hat{q}, \hat{p}) = \hat{\Omega}' \left[\left(\frac{\sqrt{2}}{2} (\hat{a} + \hat{a}^+) \right), \left(\frac{i\sqrt{2}}{2} (\hat{a} - \hat{a}^+) \right) \right] = \hat{\Omega}(\hat{a}, \hat{a}^+) .$$

Supposons qu'il soit « normalement ordonné » c'est-à-dire que, toutes les fois que \hat{a} et \hat{a}^+ agissent successivement, ils interviennent dans l'ordre « normal »

$$\hat{a}^+ \dots \hat{a}^+ \hat{a} \dots \hat{a} .$$

On peut alors écrire la relation

$$\langle \alpha | \hat{\Omega}(\hat{a}, \hat{a}^+) | \alpha \rangle = \Omega(\alpha, \alpha^*) = \Omega'(q, p) .$$

En effet l'expression $\langle \alpha | \hat{\Omega}(\hat{a}, \hat{a}^+) | \alpha \rangle$ se décompose en des termes qui sont d'après (1) de la forme

$$\langle \alpha | \hat{a}^+ \dots \hat{a}^+ \hat{a} \dots \hat{a} | \alpha \rangle = \alpha^* \dots \alpha^* \alpha \dots \alpha ,$$

ce qui autorise, dans ce cas particulier, le remplacement de l'opération produit scalaire par la substitution pure et simple des coordonnées classiques aux observables quantiques associées. A l'opérateur $\hat{\Omega}'(\hat{q}, \hat{p})$ corres-

pond simplement la fonction $\Omega'(q, p)$. Réciproquement cette démonstration prouve que l'observable quantique associée à une fonction classique peut être obtenue sans ambiguïté par simple substitution, à condition de ranger préalablement les coordonnées canoniques classiques de façon à ce que cette fonction exprimée avec les variables α et α^* soit normalement ordonnée selon ces variables.

La règle (3) que nous proposons recouvre donc bien l'ancienne « règle de substitution » mais elle lui apporte ce qui lui manquait totalement : un critère supplémentaire qui lève l'indétermination quant à l'ordre dans lequel doivent être rangés les opérateurs \hat{q} et \hat{p} que l'on substitue aux coordonnées canoniques q et p . Nous pouvons donc définir une règle de substitution normalement ordonnée qui comprenne ce critère. C'est la règle d'« ordre normal » qui a déjà été étudiée.

III. — REMARQUES

La règle de substitution ne peut s'appliquer directement qu'aux opérateurs « normalement ordonnés ». Lorsque l'on désire déterminer la fonction classique qu'il convient d'associer à un opérateur quantique on peut donc, soit appliquer directement la règle (3) avec les difficultés mathématiques que cela comporte, soit faire intervenir les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+ , prendre la forme « normalement ordonnée » de cet opérateur et y opérer la substitution.

La règle (3) permet de présenter la règle de substitution comme une déduction de la Théorie Quantique et non plus comme une sorte d'Axiome supplémentaire. Elle présente en outre l'avantage d'être tout à fait générale. En effet la méthode que nous avons appelée « règle d'ordre normal » suppose que tous les opérateurs quantiques peuvent être mis sans difficulté sous la forme normalement ordonnée. Or il existe toute une classe d'opérateurs de forme originelle simple dont la forme normalement ordonnée ne peut être explicitée à l'aide d'une simple fonction des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^+ mais nécessite le recours à la théorie des distributions. Cependant le calcul de $\langle \alpha | \Omega | \alpha \rangle$ par une autre méthode aboutit à une fonction $\Omega(\alpha)$ régulière. Cela tient à ce que les états cohérents forment une base « sur-complète » ce qui entraîne la pluralité des représentations $\Omega(\alpha)$ de $\hat{\Omega}$. Il faut toutefois bien souligner que les différentes fonctions $\Omega(\alpha)$ associées au même opérateur $\hat{\Omega}$ conduisent à des valeurs moyennes identiques lorsqu'elles sont insérées dans l'intégrale de trace.

Glauber [14] a montré qu'à tout opérateur $\hat{\Omega}$ il peut n'être associée

qu'une seule fonction $\Omega(\alpha)$ à condition d'exiger que $\Omega(\alpha)$ soit une fonction entière de α et α^* . Or l'on peut affirmer que toute grandeur physique classique peut s'exprimer sous la forme d'une fonction entière des coordonnées canoniques.

Pour éviter l'ambiguïté dans l'association recherchée il faut donc s'astreindre à rechercher parmi la classe des différentes représentations $\Omega(\alpha)$ de l'opérateur $\hat{\Omega}$ la fonction qui soit une fonction entière des variables α et α^* .

La « règle d'ordre normal » comporte donc encore des lacunes et des ambiguïtés qui ne peuvent se dissiper que par référence à la règle générale qui recouvre la règle d'ordre normal sans se confondre avec elle.

En pratique on utilisait souvent une règle de symétrisation [0] dont Shewell [13] a montré qu'elle était équivalente à la règle de Rivier [5]. Cependant Mehta [6 b] a montré dans un article où il étudie les propriétés de cinq règles d'association que la règle de Rivier était très différente de la règle d'ordre normal. La symétrisation ne doit donc intervenir que sur des opérateurs déjà constitués selon la règle (3) et seulement dans le cas d'un système de particules identiques.

Nous n'avons envisagé jusqu'ici qu'un système dynamique classique à un seul degré de liberté. L'extension de la règle (3) lorsque l'on considère plusieurs degrés de liberté ne présente pas de difficultés. Il suffit d'introduire à la place des états cohérents $|\alpha_k\rangle_k$ d'un seul mode repéré par l'indice k les états cohérents globaux

$$|\{\alpha_k\}\rangle = \prod_k |\alpha_k\rangle_k .$$

IV. — CONCLUSION

Il convient de rappeler que l'existence de fonctions classiques associées biunivoquement aux opérateurs quantiques ne prouve en rien l'identité entre le formalisme de la Théorie Classique et celui de la Théorie Quantique. En effet l'intégrale de trace (2) n'établit qu'une analogie entre les deux formalismes et ne peut être considérée comme une simple transposition. La distinction fondamentale réside dans le fait que les états cohérents ne forment pas une base complète contrairement aux états classiques et que, d'autre part, la représentation diagonale $P(\alpha)$ de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ ne peut pas, en général, être assimilée à une fonction de répartition de probabilité classique [15 c].

L'existence d'une règle d'association générale entre les opérateurs quantiques et les fonctions classiques permet donc seulement d'obtenir, lorsqu'elle existe, la « traduction » d'un problème quantique en termes classiques. Ceci est cependant d'un intérêt capital pour permettre d'insérer dans un problème quantique des conditions aux limites qui sont données sous forme classique. Il devient alors possible d'étudier précisément dans quelles conditions la Mécanique Quantique et la Mécanique Classique se raccordent.

BIBLIOGRAPHIE

- [0] A. MESSIAH, *Mécanique quantique*. Dunod, 1958.
- [1] P. A. M. DIRAC, *Proc. Roy Soc. (London)*, A **110**, 1926, 561.
- [2] J. VON NEUMAN, *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math. Physik. Kl.*, 1927, 252.
- [3] H. WEYL, *Z. Physik*, **46**, 1927, 1.
- [4] J. YVON, *Cahiers de Physique*, **33**, 1948, 25.
- [5] D. C. RIVIER, *Phys. Rev.*, **83**, 1957, 862 (L).
- [6] C. L. MEHTA, a) *J. Math. Phys.*, **5**, 1964, 677 ; b) *J. Phys. A (Proc. Phys. Soc.)*, **2**, 1968, 382.
- [7] R. KUBO, *J. Phys. Soc. Japan*, **19**, 1964, 2127.
- [8] C. L. MEHTA et E. C. G. SUDARSHAN, *Phys. Rev.*, **138 B**, 1965, 274.
- [9] L. COHEN, *J. Math. Phys.*, **7**, 1965, 781.
- [10] H. DAUGHADAY et B. P. NIGAM, *Phys. Rev.*, **139 B**, 1965, 1436.
- [11] G. S. AGARWAL et E. WOLF, *Phys. Rev.*
- [12] K. E. CAHILL et R. J. GLAUBER, *Phys. Rev.*, **176**, 1968, 1882.
- [13] J. R. SHEWEL, *Am. J. Phys.*, **27**, 1969, 16.
- [14] R. J. GLAUBER, *Phys. Rev.*, **131**, 1963, 2766.
- [15] J.-F. VINSON, *Comptes Rendus Académie des Sciences de Paris*, a) **267**, 1968, 1219 ; b) **267**, 1968, 1282 ; c) *Cohérence optique classique et quantique*. Dunod, Paris, 1969.
- [16] K. E. CAHILL et R. J. GLAUBER, *Phys. Rev.*, **176**, 1968, 1857.

Reçu le 29 septembre 1969.
