Recherche Coopérative sur Programme nº 25

A. Voros

Calcul symbolique sur les états quantiques stationnaires

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1975, tome 22
« Exposés de : H. Araki, H.J. Borchers, J.P. Ferrier, P. Krée, J.F. Pommaret, D. Ruelle, R. Stora et A. Voros », , exp. nº 5, p. 1-34

<http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1975__22__A5_0>

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1975, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme nº 25 » 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/

CALCUL SYMBOLIQUE SUR LES ETATS QUANTIQUES STATIONNAIRES *

A. VOROS

Attaché de Recherches au C N R S

Détaché au Service de Physique Théorique

du Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay

* Conférence présentée à la R. C. P. n° 25, Strasbourg du 22 au 24 Mai 1975

1. Introduction.

Nous présentons ici des méthodes régulières pour calculer des solutions des équations de la mécanique quantique à partir de la mécanique classique. Nous décrivons en détail les calculs d'états propres (ou stationnaires) non relativistes, solutions d'équations de Schrödinger "indépendantes du temps". Ces calculs sont seulement possibles pour certains systèmes "contrôlables" ; pour des systèmes encore plus particuliers, "complètement intégrables" , nous obtenons des expressions fermées pour la fonction d'onde et pour le spectre de valeurs propres, donnant toutes les corrections à la méthode B K W) . Ces calculs sont formels : il resterait à voir en quoi nos séries entières en $\hbar$ (la constante de Planck : $\hbar \approx 10^{-27}$erg x sec) représentent effectivement les solutions cherchées, il est probable que ce sont leurs développements asymptotiques et nous les appellerons ainsi. Dans la pratique, les termes dominants constituent souvent à eux seuls une bonne approximation (dite semi-classique car elle est canoniquement associée à la solution classique) ; le physicien explique cela par la "petitesse de $\hbar$" , ce qui justifie l'intérêt de ces méthodes.

La quantité de travaux se rattachant à ces questions est si énorme que nous ne pouvons ici rendre justice à tous les auteurs. Historiquement, la mécanique quantique a d'ailleurs été semi-classique (atome de Bohr, 1913 ; théorie de Sommerfeld, 1919) avant de trouver sa formulation actuelle. Nous pouvons schématiquement répartir ces travaux en trois classes, explorées parallèlement par des mathématiciens et des physiciens : description de propriétés quantiques statistiques ou en moyenne (A) , description de solutions quantiques individuelles (B) , développements à partir de solutions linéarisées au voisinage d'un état d'équilibre (C) , d'où le tableau fig. 1 . Beaucoup de ces travaux se limitent aux termes semi-classiques ou ne donnent pas les corrections ultérieures de manière constructive.

Pour une vue d'ensemble, voir [1] ou bien les références citées dans [2] ; nous préparons également un article plus détaillé [3] .

Les obstacles que rencontrent ces développements, surtout ceux du type B (singularités sur les caustiques [4]) en rendent la régularisation "après coup" très difficile, surtout pour les termes d'ordres supérieurs. Selon nous, ils sont dus à la différence profonde de nature entre les formalismes quantique et classique ; il convient de surmonter ces obstacles au départ de l'étude, et ce sera souvent possible en déduisant de la structure axiomatique du problème, la formulation la plus appropriée pour la résoudre.

2. Le principe de correspondance et la microlocalité.

2.1. - Le principe de correspondance.

Il énonce schématiquement que la mécanique quantique contient la mécanique classique comme cas limite quand $\hbar \to 0^+$. D'où l'idée de reconstruire la mécanique quantique en apportant des corrections à la mécanique classique , en séries de puissances de $\hbar$. Bien que $\hbar$ soit une constante universelle, il est alors plus naturel de le voir comme un paramètre variable $(\hbar > 0)$ pouvant tendre vers 0 ; chaque valeur de $\hbar$ définit une mécanique quantique, et les corrections aux grandeurs classiques sont des séries entières asymptotiques pour $\hbar \to 0^+$ aux grandeurs quantiques.

Comme dans tout calcul asymptotique, les termes rapidement décroissants $(= o(\hbar^n)\ \forall n > 0)$ échappent à l'observation ; nous les appellerons "$o(\hbar^\infty)$" ou négligeables bien qu'ils soient primordiaux dans certains problèmes (comme l'effet tunnel) que nous ne pouvons donc pas aborder par ces méthodes.*

---

* A moins qu'on leur adjoigne des méthodes de fonctions analytiques, en laissant $\hbar$ devenir complexe [5]

2.2. Choix de la représentation quantique.

Le principe de correspondance, et la continuité qu'il implique quand $\hbar \to 0$, n'ont rien d'évident (contrairement par exemple à la limite $c \to \infty$ de la mécanique relativiste) , et cela à cause de la différence radicale d'aspect entre les axiomatiques classique et quantique usuelles. Il va falloir forcer la limite classique à apparaître par un choix adéquat de représentation de la théorie quantique ; il est important de voir que de tels choix différents font apparaître des limites différentes les unes des autres [4] , dont peu sont intéressantes. Nous travaillerons avec deux choix :

- la représentation de BARGMANN-FOCK, pour les problèmes de type (C), qui donne à la limite $\hbar \to 0$ le problème linéarisé (oscillateur harmonique, "champ libre", limite de couplage faible ...) ;

- la représentation de WIGNER, pour les problèmes de type (A), qui donne à la limite $\hbar \to 0$ la mécanique classique en formulation hamiltonienne sur un espace de phase (limite des "grands nombres quantiques") .

Il ne sera question que du deuxième cas jusqu'à nouvel ordre. Nous pourrons traiter certains problèmes du type (B) en les ramenant soit au type (A) pour les développements B K W , soit au type (C) pour les développements par états cohérents, soit à des combinaisons des deux types, mais nous insisterons sur le type (A) .

2.3. La microlocalité.

Les opérations permettant de construire les développements quantiques à partir des solutions classiques s'avèrent être locales sur l'espace de phase classique à tout ordre fini en $\hbar$, on dit : microlocales. Une solution quantique exacte ne peut pas être microlocale à cause du principe d'incertitude qui l'étale, suivant chaque degré de liberté, sur une aire $\gtrsim \frac{\hbar}{2}$; mais son coefficient de $\hbar^n$ peut être microlocal pour tout n malgré cela, à condition que l'ordre des dérivations intervenant dans son calcul ne reste pas borné quand $n \to +\infty$.

La microlocalité simplifie beaucoup notre tâche ; nous l'exploiterons surtout par le biais de la notion de support essentiel attaché à un état quantique.

2.4. Problèmes bien posés. Empiriquement, le problème de développer une grandeur quantique en puissances de $\hbar$ peut être dit "bien posé" si :

- on peut définir de manière unique la quantité classique correspondante, et la calculer sous forme fermée (résolution explicite du problème classique)

- on peut calculer explicitement, à partir du terme classique, tous les termes du développement sous une forme unique et non singulière (dans une bonne représentation).

Nous ne chercherons pas ici à voir si le développement obtenu est bien asymptotique à l'objet quantique posé au départ. Des contre-exemples paradoxaux dans des problèmes avec dégénérescences [6] suggèrent qu'il faut avoir a priori unicité de l'objet quantique. Et si le développement obtenu est lui-même unique, cela doit probablement suffire.

3. Calcul symbolique.

Nous ne considérerons que des systèmes dynamiques définis sous un espace de configuration $\mathcal{Q}$ affine de dimension finie : $\mathcal{Q} = \mathbb{R}^\ell$. Les dérivées partielles s'écriront :

$$\frac{\partial^{\alpha_1,+\ldots+\alpha_\ell}}{\partial q_1^{\alpha_1}\ldots\partial q_\ell^{\alpha_\ell}} f(q) = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial q^\alpha} = \partial_q^\alpha f \ .$$

3.1. Mécanique classique (rappels) [2, 4, 7, 8]. Si le dual de $\mathcal{Q}$ est $\mathcal{P} = \mathcal{Q}^*$, l'espace de phase est $M = \mathcal{Q} \oplus \mathcal{P}$, muni de la forme canonique (symplectique) $\omega = \sum_{i=1}^{\ell} dp_i \wedge dq^i$; on notera $x = (q,p)$ les points de M. Les observables sont les fonctions $C^\infty : M \to \mathbb{R}$, elles forment une algèbre de Lie $\mathcal{G}_{cl}$ pour les crochets de Poisson : $\{f,g\} = \sum_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\partial f}{\partial q^i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q^i}\right)$. L'observable d'énergie $H(x)$ (le hamiltonien) définit le champ de vecteurs $X_H = (\nabla_p H, -\nabla_q H)$ et le flot de celui-ci : U_t^H, flot hamiltonien ou opérateur d'évolution du mouvement classique.

Chaque point $x \in M$ représente une configuration (instantanée) possible, ou <u>état pur</u> [8] d'un système dynamique. Généralisation : un <u>état</u> est une loi de probabilité d'occurrence de ces configurations, c'est-à-dire une mesure positive μ sur M : ou bien normalisée par $\int_M \mu = 1$, ou bien modulo la relation d'équivalence $\mu = c\mu'$ (c : scalaire > 0) . La valeur moyenne d'une observable f bornée, dans un état normalisé μ , vaut :

$$< \mu, f >_{cl} = \int_M f \mu \qquad (3.1)$$

Les états forment un espace convexe pour l'opération de <u>mélange</u> : $(\mu_1, \mu_2) \to \alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2$ $(0 \leq \alpha \leq 1)$; les points extrémaux sont les états purs. Un état μ est <u>stationnaire</u> si $U_t^{H*}\mu \equiv \mu (\forall t)$.

3.2. <u>Mécanique quantique (rappels)</u> [4, 8, 9, 10] . Elle se formule sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\Omega, d^\ell q)$ dont les éléments sont notés <u>fonctions d'onde</u> $\psi(q)$ ou <u>vecteurs d'état</u> $|\psi>$. Les observables sont les opérateurs autoadjoints sur $\mathcal{H}$; les états sont les opérateurs positifs ρ sur $\mathcal{H}$; habituellement on les prend à trace et on les normalise à : $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$ ("matrices densité") , auquel cas la valeur moyenne d'une observable A dans cet état ρ vaut :

$$< \rho, A >_{qu} = \mathrm{Tr}\,\rho\, A \ . \qquad (3.2)$$

Ici, nous n'imposerons aucune condition de trace sur les ρ mais nous dirons que deux opérateurs ρ_1 et ρ_2 définissent le même état si $\rho_1 = c\rho_2$ (c : scalaire > 0) .

Les états forment un espace convexe pour l'opération de mélange : $\rho_1, \rho_2) \to \alpha\rho_1 + (1-\alpha)\rho_2$ $(0 \leq \alpha \leq 1)$: les points extrémaux sont les <u>états purs</u>, de la forme $\rho = |\psi><\psi| = \psi \otimes \psi^+$ (projecteurs de rang 1) . Ne pas confondre le mélange avec la superposition quantique ou addition des vecteurs d'état.

L'opérateur hamiltonien $\hat{H}$ définit les équations du mouvement des états :

$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H},\rho]_-$ et pour les vecteurs : $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$ (Schrödinger) .

Les états (resp. vecteurs d'état) stationnaires satisfont aux équations :

$$[\hat{H},\rho]_- = 0 \quad \text{et} \quad \hat{H}\psi = E\psi \quad \text{(Schrödinger)} .$$

3.3. Quantification de Weyl. C'est une règle formelle associant une observable quantique $\hat{f}$ à une observable classique f, ceci pour toute valeur $\hbar > 0$ fixée. L'opérateur $\hat{f}$ a son noyau (hermitien) défini par [11]

$$\hat{f}(q,q';\hbar) = \langle q|\hat{f}|q'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\ell}} \int_{\mathcal{P}} f(\tfrac{q+q'}{2},p) e^{\frac{ip(q-q')}{\hbar}} d^{\ell}p \qquad (3.3)$$

On vérifie que : $(\hat{q}\psi)(q) = q\psi(q)$; $(\hat{p}\psi)(q) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial q}$;

$\widehat{T(p) + V(q)} = T(\hat{p}) + V(\hat{q})$

Si f est C^{∞} à croissance lente ($f \in \mathcal{O}_M(M)$ [12]), $\hat{f}$ est un opérateur pseudodifférentiel, son noyau est une distribution sur $\mathcal{D} \times \mathcal{D}$ [13,14] .

3.4. Transformation de Wigner. C'est la transformation de Fourier inverse de (3.3) qui associe à un opérateur sur $\mathcal{H}$, de noyau $A(q,q')$, une fonction scalaire sur M, le symbole de Wigner $A_w(x)$, qui est également fonction de $\hbar$ en général [15] :

$$A_w(q,p;\hbar) = \int_{\mathcal{Q}} A(q - \tfrac{r}{2}, q + \tfrac{r}{2};\hbar)\, e^{\frac{ipr}{\hbar}} d^{\ell}r \qquad (3.4)$$

(en fait A est une fonction de $\hbar > 0$ à valeurs opérateurs sur $\mathcal{H}$: $A(\hbar)$) .

Par définition : $\widehat{(A_w)} = A$ et, pour $a \in \mathcal{G}_{cl}$: $(\hat{a})_w = a$, donc (3.4) exprime un "équivalent classique" de l'opérateur A. Cf. les définitions des symboles dans [13, 14] .

3.5. Observables admissibles. Par analogie avec la définition des opérateurs pseudodifférentiels [13, 14] mais en respectant la symétrie entre q et p, nous dirons que l'application $\hbar \in]0,\alpha] \to A(\hbar)$ (à valeurs opérateurs sur $\mathcal{H}$) définit un opérateur admissible si $\hbar \to A_w(x;\hbar) \in \mathcal{O}_M(M,C)$ (fonctions C^{∞} à croissance lente,

à valeurs complexes) est C^∞ par rapport à $\hbar$, et admet une série de Taylor :

$$A_w(x;\hbar) \sim \sum_0^\infty A_n(x)\hbar^n \qquad (3.5)$$

où $A_n \in \mathcal{O}_n(M,\mathbb{C})$ avec si $\|x\| \to \infty$: $\partial^\alpha A_n(x) = \mathcal{O}(\|x\|^{m-|\alpha|-2n})$ pour une valeur minimale de m appelée l'ordre de l'opérateur. La série (3.5) est asymptotique ; le terme dominant, ou <u>symbole principal</u> $A_o(x)$, représente la limite classique de A.

Les opérateurs admissibles forment une algèbre multiplicative $\mathcal{G}$, comme le montre la règle du produit de Groenewold [15] (qui est un "théorème de Wick") :

$$(AB)_w(x) = \sum_0^\infty \frac{1}{n!}(i\hbar)^n \left[\left(\frac{\partial^2}{\partial q_1 \partial p_2} - \frac{\partial^2}{\partial q_2 \partial p_1} \right)^n A_w(x_1) B_w(x_2) \right]_{x_1 = x_2 = x} \qquad (3.6)$$

$$= A_w(x)\left(\exp \frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}\right) B_w(x) \quad \text{ou} \quad \overleftrightarrow{\Lambda} = \overleftarrow{\partial_q}\overrightarrow{\partial_p} - \overleftarrow{\partial_p}\overrightarrow{\partial_q}$$

D'où : $\left(\frac{1}{2}[A,B]_-\right)_w = iA_w\left(\sin \frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2}\right)B_w \quad \left(= \frac{i\hbar}{2}\{A_o,B_o\} + \mathcal{O}(\hbar^2)\right)$ (3.7)

et (3.7) implique que si a ou $b (\in \mathcal{G}_{cl})$ est un polynôme de degré ≤ 2 en x :

$$[\hat{a},\hat{b}]_- \equiv i\hbar \widehat{\{a,b\}} \qquad (3.8)\ .$$

Si $A(\hbar)$ est de plus auto-adjoint, nous l'appellerons <u>observable admissible</u> : alors A_w et les A_n sont réels.

3.6. <u>Le groupe métaplectique</u>. Il se trouve que la quantification (3.3) est <u>covariante</u> par rapport aux transformations canoniques <u>affines</u> de M, qui forment le groupe symplectique (inhomogène) $G = iSp(\ell)$ [7], c'est-à-dire : il existe une représentation (projective) de G par des opérateurs unitaires sur $\mathcal{H}$: $U \longrightarrow \mathcal{U}$, $\mathcal{U}$ réalisant l'équivalence unitaire entre la quantification dans M et dans UM :

$$\mathcal{U}^+ \hat{a}\, \mathcal{U} = \widehat{(a \circ U)} \Leftrightarrow (\mathcal{U}^+ A\, \mathcal{U})_w(x) = A_w(U.x) \qquad (3.9)$$

Pour que (3.9) ne soit pas formel, il suffit par exemple d'exiger que A soit de Hilbert-Schmidt ($\Leftrightarrow A_w \in L^2(M, d^{2\ell}x)$)

Au sens de la dynamique classique, le groupe homogène $S_p(\ell)$ est engendré par les hamiltoniens $b(x)$ quadratiques en x : $\forall U \in S_p(\ell)\ \exists\, t \in \mathbb{R}, \exists\, b(x)$: $U = U_b^t$ (cf. § 3.1) , alors

$\mathcal{U} = e^{-\frac{it\hat{b}}{\hbar}} = \mathcal{U}_{\hat{b}}^t$ (au niveau des algèbres de Lie, les relations (3.9) se réduisent à (3.8)) . Le groupe engendré par les $\mathcal{U}_{\hat{b}}^t$ est le <u>groupe métaplectique</u> (homogène) : $M_p(\ell)$. On montre [4,13,16] que c'est un revêtement connexe à <u>2 feuillets</u> de $S_p(\ell)$,chaque $U \in S_p(\ell)$ ayant deux images possibles $\pm\,\mathcal{U}$ sans possibilité d'éliminer l'ambiguité (une certaine analogie avec le revêtement $SU(2) \longrightarrow SO(3)$) .

On montre aussi que, génériquement, $\mathcal{U}$ est un opérateur intégral à noyau de type gaussien [13] .

Pour les applications à 1 dimension ($\ell = 1$) on peut se restreindre aux "groupes de l'oscillateur harmonique" en prenant $b = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$. Le "groupe classique" est : $G_b = \{U_b^\theta$ = rotation d'angle $\theta\}_{\theta \in [0,2\pi[}$ avec $U_b^{2\pi} = U_b^0 = id$. Le "groupe quantique" est

$$G_{\hat{b}} = \{\mathcal{U}_{\hat{b}}^\theta = e^{\frac{-i\theta}{\hbar}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2)}\}\ \theta \in [0,4\pi[\ ,$$

la "période" étant <u>doublée</u> car on vérifie que ([x] = partie entière de x) :

$$\left.\begin{array}{l} \mathcal{U}_{\hat{b}}^\theta(q,q') = \dfrac{e^{\frac{-i\pi}{4}\left[\frac{\theta}{\pi}\right]}}{(2\pi\hbar|\sin\theta|)^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{i}{2\hbar\sin\theta}(\cos\theta\,(q^2+q'^2) - 2qq')} \quad \text{si} \quad \theta \not\equiv 0 \ [\text{mod } \pi] \\ \text{(ainsi } \mathcal{U}^{\pi/2} \text{ est le noyau d'une transformation de Fourier)} \\ \text{et :} \quad \mathcal{U}_0 = -\mathcal{U}_{2\pi} = \mathcal{U}_{4\pi} = \ldots = 1\ ;\ (\mathcal{U}_\pi\psi)(q) = -(\mathcal{U}_{3\pi}\psi)(q) = \ldots = -i\psi(-q)\ (\forall \psi \in \mathcal{H}) \end{array}\right\} (3.10)$$

3.7. <u>Fonctionnelles admissibles</u>. Partant de l'unitarité de la transformation de Fourier dans (3.4) , on voit que si A_w et $B_w \in L^2(M, d^{2\ell}x)$:

$$\langle B, A\rangle_{qu} = \mathrm{Tr}\, B^+ A \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^\ell}\int B_w^*(x) A_w(x)\, d^{2\ell}x = \frac{1}{(2\pi\hbar)^\ell}\langle B_w, A_w\rangle_{cl}$$

Il est connu qu'avec la restriction $A_w \in \mathcal{S}(M)$, la formule s'étend aux fonctionnelles $B_w \in \mathcal{S}'(M)$ (sur lesquelles les transformations de Fourier sont définies) . Si on utilise comme symbole de Wigner d'une fonctionnelle : $B^W = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\ell}} B_w$, on aura :

$$< B,A >_{qu} \equiv < B^W, A_w >_{cl} \qquad (3.11)$$

Nous dirons que B est une fonctionnelle admissible de spectre Σ_B (où Σ_B est un fermé de $[0,\infty[$ contenant 0 comme point limite) si $B^W(x;\hbar)$ est défini comme une application : $\hbar \in \Sigma_B \longrightarrow B^W(x;\hbar) \in \mathcal{S}'(M,C)$ qui soit $\underline{C^\infty \text{ en } \hbar = 0}$, ce qui assure que la série de Taylor de B^W est son développement asymptotique dans $\mathcal{S}'$:

$$B^W \underset{\hbar \to 0}{\sim} \sum_{n=o}^{+\infty} B_n \hbar^n \quad (B_n \in \mathcal{S}'(M,C)) \qquad (3.12)$$

$$\Leftrightarrow \forall A \in \mathcal{G} : A_w \sim \sum_{o}^{\infty} A_n \hbar^n \text{ , si } A_w(\hbar) \in \mathcal{S} \ (\forall \hbar) \text{ et } A_n \in \mathcal{S} \ (\forall n) :$$

$$< B, A >_{qu} \equiv < B^W, A_w >_{cl} \sim \sum_{n=o}^{\infty} \left(\sum_{m=o}^{\infty} < B_m , A_{n-m} >_{cl} \right) \qquad (3.13)$$

Il est important de voir que $\underline{\text{certaines}}$ opérations du calcul symbolique s'étendent aux fonctionnelles admissibles (dont l'ensemble sera noté $\mathcal{G}'$) :

- $\underline{\text{covariance métaplectique}}$: à cause de la forme du noyau de $\mathcal{U} \in \mathcal{G}$ générique, on montre, comme pour la transformation de Fourier qui n'est qu'un cas particulier, que $\mathcal{U}$ restreint à $\mathcal{S}(\mathcal{D})$ est un isomorphisme continu de $\mathcal{S}$, donc s'étend à un isomorphisme continu $\mathcal{S}' \longrightarrow \mathcal{S}'$ par dualité quantique. Donc de (3.9) on tire :

$$(\mathcal{U}^+ B \mathcal{U})^W (x) = B^W(U.x) \qquad (3.14)$$

- $\underline{\text{multiplication}}$: si $A \in \mathcal{G}$, $B \in \mathcal{G}'$, alors $AB \in \mathcal{G}'$ et (3.6) s'étend :

$$(AB)^W \sim A_w (\exp \frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}) B^W \qquad (3.15)$$

les deux membres étant définis .

Par contre si A et B sont tous deux dans $\mathcal{S}'$ (par exemple sont de Hilbert-Schmidt) , leur produit opérateur peut être dans $\mathcal{S}'$ sans être développable par la formule (3.15), celle-ci faisant intervenir des produits non définis de distributions. Ce type de singularité est celui qu'on rencontre sur les caustiques.

Si $\rho \in \mathcal{S}'$ et si de plus $\rho(\hbar)$ est un opérateur positif $\forall \hbar \in \Sigma_\rho$ nous dirons que c'est modulo multiplication par des scalaires (qui peuvent être fonctions de $\hbar$) , un état admissible. Nécessairement, le terme ρ_o dans (3.12) est une mesure positive (un état classique) et les ρ_o sont réels. Exemple : le projecteur sur le fondamental de l'oscillateur harmonique à 1 dimension (hamiltonien $-\frac{\hbar^2\Delta+q^2}{2}$) satisfait : $\Sigma_\rho = [0,\infty[$ et :

$$\rho^W(q,p;\hbar) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\frac{q^2+p^2}{\hbar}} \sim \sum_{n=o}^{\infty} \frac{(\Delta_p+\Delta_q)^n}{2^{2n} n!} \delta(q)\,\delta(p)\,\hbar^n \qquad (3.16)$$

4. Supports essentiels et états asymptotiques.

Le support essentiel est une entité géométrique douée de propriétés classiques qu'on peut associer à une fonctionnelle asymptotique grâce à la microlocalité. C'est une notion voisine de celle de front d'onde d'une distribution [14] .

4.1. Définitions et exemples. Soit $\rho \in \mathcal{S}'$, et $\Omega \subset M$ un ouvert. Nous dirons que ρ est négligeable sur Ω , ou $\rho_{|\Omega} \sim 0$ si $\forall \varphi \in C_o^\infty(\Omega)(\varphi \in C^\infty(M)$ à support compact, dans Ω) :

$$<\rho(\hbar), \varphi>_{cl} = o(\hbar^\infty) :$$

Le support essentiel de ρ est le plus grand fermé $ES(\rho) \subset M$ tel que $\rho_{|M-ES(\rho)} \sim 0$ ou encore : $ES(\rho) = \overline{\bigcup_o^\infty \text{Supp}\ \rho_n}$, les ρ_n définis par (3.12) .

Nous nous intéresserons spécialement aux supports essentiels de certains états purs ($\rho = |\psi><\psi|$) que nous supposerons admissibles .

Exemples :

a) pour l'état défini par (3.16) : $ES(\rho) = \{0\}$.

b) si $\rho = |\psi><\psi|$, que $\psi \in \mathcal{S}'$ et admet des développements BKW à la Maslov (dans des cartes locales : $\psi(q) \sim \sum_{j \in J} \left[\sum_{n=0}^{\infty} a_n^j(q)(i\hbar)^n \right] e^{\frac{iS_j(q)}{\hbar}}$) alors $\rho \in \mathcal{S}'$ et $ES(\rho) = \bigcup_j \{x \in M \mid q \in \overline{\bigcup_{n=0}^{\infty} \text{Supp } a_n^j}$, $p = \frac{\partial S_j}{\partial q}\}$: c'est une (partie de) "variété lagrangienne" [2, 4, 13] . Cela se voit en évaluant $(|\psi><\psi|)^W$ par la méthode des phases stationnaires [2,13] .

Au sens des distributions, qui est celui que nous considérons : $\rho_{|\Omega} \sim 0$ peut venir de ce que $|\rho(x)|$ est négligeable sur Ω (exemple a) mais aussi de ce que $\rho(x)$, sans être négligeable, a des oscillations rapides et alors le résultat découle de la méthode des phases stationnaires (exemple b) .

Soit $\mathcal{S}'_\infty$ l'ensemble des $\rho \in \mathcal{S}'$ partout négligeables ($ES(\rho) = \emptyset$) . Nous appellerons fonctionnelles asymptotiques les éléments de l'ensemble quotient $\tilde{\mathcal{S}}' = \mathcal{S}'/\mathcal{S}'_\infty$, qui est un espace vectoriel . Il est évident que si $\rho \in \mathcal{S}'$, $ES(\rho)$ ne dépend que de la classe $\tilde{\rho}$ de ρ dans $\tilde{\mathcal{S}}'$, et que $\tilde{\rho}$ est caractérisé par le développement (3.12) .

4.2. Théorème de superposition. Soient des états purs $\rho_1 = |\psi_1><\psi_1|$, $\rho_2 = |\psi_2><\psi_2|$ et $\rho = |\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2><\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2)$. Si ρ_1, ρ_2 et $|\psi_1><\psi_2| \in \mathcal{S}'$, alors

(i) $\tilde{\rho} \in \tilde{\mathcal{S}}'$, $ES(\tilde{\rho}) \subsetneq ES(\rho_1) \cup ES(\rho_2)$

(ii) $ES(|\psi_1><\psi_2|) = ES(|\psi_2><\psi_1|) \subseteq ES(\rho_1) \cap ES(\rho_2)$ ce qui implique qu'à l'extérieur de cet ensemble : $\tilde{\rho} = |\lambda_1|^2 \tilde{\rho}_1 + |\lambda_2|^2 \tilde{\rho}_2$.

Démonstration dans [3] .

4.3. Etats stationnaires asymptotiques. On s'intéresse à l'équation de Schrödinger

$$(H - E)\,\psi_E = 0 \qquad (4.1)$$

où $H \in \mathcal{G}$, $H \underset{w}{\sim} \sum_0^\infty H_n \hbar^n$; $\psi_E \in \mathcal{H}$ est un <u>vecteur d'état lié</u> d'énergie E (constante réelle) .

L'état correspondant, le projecteur $\rho_E = |\psi_E><\psi_E|$, est solution du système :

$$(H - E)\rho_E = \rho_E(H - E) = 0 \qquad (4.2)$$

Le problème de résoudre (4.1) en puissances de $\hbar$ peut se formuler comme la recherche des coefficients ρ_n^E dans : $\rho_E^w \sim \sum_0^\infty \rho_n^E \hbar^n$, c'est-à-dire comme le calcul de $\tilde{\rho}_E$. Mais de (4.2) on tire le système d'équations "asymptotiques" satisfaites par $\tilde{\rho}_E$:

$$(H - E)\tilde{\rho}_E = \tilde{\rho}_E(H - E) = 0 \quad (\text{dans } \mathcal{G}') \qquad (4.3)$$

Nous pourrons parfois calculer directement les solutions $\tilde{\rho}_E$ de (4.3), nous les appellerons <u>solutions asymptotiques</u> ; nous montrerons comment elles généralisent les solutions asymptotiques de [13] . Cette notion présente des analogies avec la notion de "quasi-modes" qui apparaît dans [6,17] . Mais nous soulignons que les solutions asymptotiques peuvent ne pas exister, ou exister mais n'avoir aucun rapport avec le vrai projecteur ρ_E . D'abord, en général ρ_E ne sera pas un état admissible si l'on adopte la définition naturelle :

$$\rho_E(\hbar) : \hbar \in \Sigma_\rho \longrightarrow \rho_E(\hbar) = |\psi_E><\psi_E| \ , \ \Sigma_\rho = \{\hbar > 0 \,|\, E \text{ valeur propre de } H(\hbar)\} \ .$$

La difficulté vient des (quasi -) dégénérescences possibles, faisant que $\rho_E(\hbar)$ prend des formes très différentes pour des valeurs de $\hbar$ très voisines, d'où irrégularité quand $\hbar \longrightarrow 0$. On peut au plus espérer alors que des <u>sous-familles</u> : $\hbar \in \Sigma_\rho^{(\alpha)} \subset \Sigma_\rho \longrightarrow \rho_E(\hbar) = |\psi_E><\psi_E|$ définissent des états admissibles $\rho_E^{(\alpha)}$ pouvant dépendre de la sous-famille choisie) , dont les classes sont solutions de (4.3) . Dans certains cas nous construirons ces sous-familles, l'idéal à atteindre étant que : $\bigcup_\alpha \Sigma_\rho^{(\alpha)} = \Sigma_\rho$.

Une conjecture raisonnable, mais que nous ne savons pas prouver, est nécessaire : si un problème quantique possède une solution unique : $\hbar \in \Sigma_\rho \longrightarrow \rho(\hbar)$, et si par ailleurs nous avons existence et unicité de la solution asymptotique correspondante $\tilde{\rho} \in \tilde{\mathcal{G}}'$, alors $\rho \in \mathcal{G}'$, et sa classe dans $\tilde{\mathcal{G}}'$ est $\tilde{\rho}$. Cette hypothèse, possible précisément quand toutes les dégénérescences ont été levées, donne tout son sens au calcul asymptotique.

4.4. Théorème de régularité. Si : $(H - E)\tilde{\rho} = 0$ $(H \in G, \rho \in \tilde{\mathcal{G}}', E \in \mathbb{R})$, alors :

(i) $ES(\tilde{\rho}) \subseteq H_o^{-1}(E) = \{x \in M | H_o(x) = E\}$

(ii) si de plus le flot $U^t_{H_o}$ est régulier en tout point de $H_o^{-1}(E)$, alors $Es(\rho)$ est invariant par ce flot, c'est donc une union (fermée) d'orbites classiques.

Démonstration dans [3] , voir aussi théorèmes analogues dans [12,17] .

Pour avoir des problèmes bien posés, nous exigeons que $ES(\tilde{\rho})$ soit une sous-variété de M (compacte, pour les problèmes d'états liés) .

4.5. Théorème d'unicité. Nous dirons qu'un fermé invariant de M est minimal s'il contient une orbite dense ; il est donc connexe. Alors, si $\tilde{\rho}(= \sum_n \rho_n \hbar^n)$ est solution de (4.3) , si $ES(\tilde{\rho})$ est une sous-variété minimale donnée, et si les ρ_n sont des densités (multipolaires) à coefficients continus sur $ES(\tilde{\rho})$, $\tilde{\rho}$ est déterminé à une constante multiplicative près .

On le montre par récurrence [3] en utilisant les équations de transport satisfaites par les coefficients. Ce théorème suggère qu'un support essentiel minimal est un bon analogue asymptotique d'un sous-espace propre à une dimension ; l'analogue asymptotique de l'orthogonalité de deux sous-espaces est que les deux supports essentiels soient disjoints (th.(4.2), [17]) .

4.6. Un problème asymptotique bien posé. Un problème quantique stationnaire est résolu lorsqu'on a construit une base orthonormée d'états propres pour H .

L'analogue asymptotique est de décomposer M en union disjointe de sous-variétés invariantes minimales, puis de calculer sur chaque sous-variété l'état asymptotique satisfaisant au théorème (4.5). Quand la procédure est possible, elle conduit à des résultats uniques. Mais les fermés minimaux peuvent ne pas être des sous-variétés, ou bien l'état $\tilde{\rho}$ du théorème (4.5) peut ne pas exister ou ne pas être explicitement calculable . Dans ces cas nous pensons que la méthode n'a pas d'intérêt, c'est pourquoi nous exclurons ces situations par des conditions a priori, et nous ne garderons que des problèmes bien posés, où l'existence de $\tilde{\rho}$ est garantie par un algorithme permettant son calcul.

5. Développement en gradients de la résolvante.

Heuristiquement : on résout (4.3) grâce à la formule (vraie si le spectre de H est simple) : $\rho_E = -$ Résidu $_{z=E} G(z)$, où $G(z) = \frac{1}{H-z}$ est la résolvante, dont on va développer le symbole en puissances de $\hbar$. Pour simplifier l'écriture, on se limite au cas le plus courant : $H = \hat{H}_o$ ($H_n \equiv 0$ pour $n \geq 1$ dans (3.5)) , avec $H_o \in \mathcal{O}_M(M,R)$.

5.1. Calcul . L'équation de la résolvante est : $(H-z)\,G(z) = G(z)(H-z) = 1$

On fixe $z \in C - R$. On en déduit les équations satisfaites par $G_w(x;z)$ d'après (3.6) et (3.7) :

$$(H_o - z)\cos\frac{\hbar\overleftrightarrow{\Lambda}}{2}\,G_w(x;z) = 1 \qquad (5.1)$$

$$(H_o - z)\sin\frac{\hbar\overleftrightarrow{\Lambda}}{2}\,G_w(x;z) = 0 \qquad (5.2)$$

Ecrivons explicitement : $H_o e^{\frac{i\hbar\overleftrightarrow{\Lambda}}{2}} = \sum_{k=o}^{\infty} (i\hbar)^k \mathcal{D}_k(q,p,\partial_q,\partial_p)$; $\mathcal{D}_k$ est un opérateur différentiel homogène de degré k calculable par récurrence :

$$\mathcal{D}_o = H_o;\ \mathcal{D}_k = \frac{1}{2k}\left(\frac{\partial \mathcal{D}_{k-1}}{\partial q}\cdot\partial_p - \frac{\partial \mathcal{D}_{k-1}}{\partial p}\cdot\partial_q\right),\ \text{en particulier}\ \mathcal{D}_1 = -\tfrac{1}{2}\frac{d}{dt}\ .$$

Si $G_w(x;z) \sim \sum_o^{\infty} G_n(x;z)(i\hbar)^n$ est le développement cherché, (5.1) implique:

$G_o(x;z) = \frac{1}{H_o(x)-z}$, $G_1(z) \equiv 0$ et par récurrence : $\underline{G_{2n+1}(z) \equiv 0}$. Il est remarquable que le système (5.1, 5.2) se sépare alors par parité, que (5.1) permet à lui seul le calcul des $G_{2n}(x;z)$ par récurrence :

$$G_2 = -G_o \cdot \mathfrak{D}_2(G_o) \; ; \; \ldots \; G_{2n} = -G_o \cdot \Big(\sum_{k=1}^{n} \mathfrak{D}_{2k}(G_{2(n-k)}) \ldots \qquad (5.3)$$

et que (5.2) donne des <u>identités</u> (en nombre infini) satisfaites par les solutions (5.3) :

$$\sum_{k=o}^{n} \mathfrak{D}_{2k+1}\,(G_{2(n-k)}) \equiv 0 \quad n = 0, 1, 2 \ldots \qquad (5.4)$$

Pour $n \geq 1$, G_{2n} possède la structure générale :

$$G_{2n}(x;z) = \frac{G_{n,2}(x)}{(H_o(x)-z)^3} + \frac{G_{n,3}(x)}{(H_o(x)-z)^4} + \ldots + \frac{G_{n,3n}(x)}{(H_o(x)-z)^{3n+1}} \qquad (5.5)$$

où $G_{n,k}(x)$ est un polynôme construit sur les dérivées partielles au point x de H_o à des ordres $\leq 2n$. Ainsi : $H_p = \partial H/\partial p$, etc...) :

$$G_2(x;z) = \tfrac{1}{4}\left[\frac{H_{qq}H_{pp} - H_{qp}^2}{(H_o - z)^3} - \frac{H_{qq}H_p^2 - 2H_{qp}H_qH_p + H_{pp}H_q^2}{(H_o - z)^4} \right] \qquad (5.6)$$

Ce genre de calcul se fait dans la méthode de Thomas-Fermi en physique nucléaire [18] . Comme $(H_o - z)$ ne s'annule jamais si $x \in M$ et $z \in C - R$, il s'agit en fait d'un calcul analogue à celui de la <u>paramétrix</u> d'un opérateur elliptique [14] , et en raisonnant comme dans [14] , on montre que $G(x;z)$ existe en tant qu'opérateur admissible et possède bien le développement donné par (5.5.) :

$$G_w \sim \sum_{n=o}^{\infty} G_{2n}(-h^2)^n$$

5.2. <u>Valeur au bord de la résolvante</u>. La discontinuité de $G(z)$ à travers l'axe réel des z est une distribution sur R à valeurs opérateurs positifs, définie (fig. 2) par :

$$E \in R \longrightarrow \delta(H - E) = \frac{1}{2\pi i}\left[G(E + i0) - G(E - i0) \right] = (2\pi h)^{-\ell} \rho(E)$$

Le même calcul sur le développement asymptotique (5.7) donne avec (5.5):

$$\rho(E)^{W} = \delta(H-E)_{W} \sim \sum_{n=o}^{\infty} \rho_{2n}(x;E)(-\hbar^2)^n \quad \text{avec :} \quad (5.8)$$

$$\rho_o(x,E) = \delta(H_o(x)-E); \rho_{2n}(x;E) = \sum_{r=2}^{3n} \frac{(-1)^r}{r!} G_{n,r}(x) \times \delta^{(r)}(H_o(x)-E) \in \mathcal{S}'(M) \quad (5.9)$$

où les $\delta^{(n)}(H_o(x)-E)$ sont les distributions multipolaires sur la couche d'énergie $H_o^{-1}(E)$ [19] ; pour $r = 0$ c'est la distribution microcanonique. Donc $\widetilde{\rho(E)} \in \mathcal{S}'$ et nous avons son développement (5.8) .

Par ailleurs $\rho(E)$ est solution de (4.2) donc $\widetilde{\rho(E)}$ <u>est une solution asymptotique de (4.3)</u>, avec $ES(\widetilde{\rho(E)}) = H_o^{-1}(E)$. Mais on ne peut pas utiliser ce résultat directement, pour écrire par exemple : $|\psi_E><\psi_E| \sim$ Cte. $\rho(E)$, car en général $H_o^{-1}(E)$ n'est pas un fermé invariant minimal donc $\widetilde{\rho}(E)$ n'est pas unique. La relation de $\widetilde{\rho}(E)$ aux projecteurs individuels $|\psi_E><\psi_E|$ se déduit de l'intégrale de Cauchy (fig.2) :

$$\sum_{\substack{E_1<E<E_2 \\ E \in \text{spectre } \hat{H}(\hbar)}} |\psi_E><\psi_E| = \frac{1}{2\pi i} \oint_\gamma \frac{dz}{H-z} = \int_{E_1}^{E_2} \rho(E)dE \times (2\pi\hbar)^{-\ell}$$

Quand $\hbar \longrightarrow 0$, le nombre de termes au premier membre est de l'ordre de $(2\pi\hbar)^{-\ell} \int_{E_1<H_o<E_2} d^{2\ell}x$ (théorème de Weyl) . Posant $E_2 = E + \Delta E$, $E_1 = E - \Delta E$, et $\Delta E \longrightarrow 0$ <u>après</u> $\hbar \longrightarrow 0$ on trouve :

$$\widetilde{\rho(E)} = C(\hbar) \times \lim_{\Delta E \to o} \left[\widetilde{\frac{(2\pi\hbar)^{\ell}}{\Delta E} \sum_{E'} |\psi_{E'}><\psi_{E'}|} \right]^{\sim} \quad \begin{matrix} |E'-E|<\Delta E \\ E' \in \text{spectre } \hat{H}(\hbar) \end{matrix} \qquad (C(\hbar) = \text{scalaire})$$

donc [20] : $\widetilde{\rho(E)}$ est une moyenne (un lissage) des projecteurs "proches de E" : $\widetilde{\rho(E)}$ ne pourra représenter des projecteurs individuels $|\psi_{E'}><\psi_{E'}|$ que si ceux-ci (ou des sous-familles de ceux-ci) ne dépendent pas "trop violemment" de E' . Comme nous voulons représenter des états individuels, ce qui précède justifie les précautions que nous devrons prendre.

6. Etats propres asymptotiques des systèmes "contrôlables" .

6.1. Définition générale. Soit un système quantique de hamiltonien $H \in \mathcal{G}$. Nous le dirons "k - contrôlable" (pour un entier $k : 1 \leq k \leq \ell$) dans un ouvert $D \subset \mathbb{R}^k$ si :

(i) il existe k observables admissibles $F_1 = H, F_2, \ldots, F_k \in \mathcal{G}$, commutant deux à deux ($[F_j, F_j,] \equiv 0$), fonctionnellement indépendantes ; notation $F = (F_1, \ldots, F_k)$.

(Il est important d'exclure les observables $\notin \mathcal{G}$ du genre symétries discrètes, qui sont sources d'ennuis [6] . Soient $F_{1o} = H_o, \ldots, F_{ko}$ les limites classiques, F_o l'application : $x \in M \xrightarrow{F_o} (F_{1o}(x), \ldots F_{ko}(x)) \in \mathbb{R}^k$ et D un ouvert dans l'ensemble image $F_o(M)$) .

(ii) si $E = (E_1, \ldots, E_k) \in D$ et si $\hbar \in \Sigma_\rho = \{\hbar > 0 | E \in \text{spectre } F(\hbar)\}$ (il s'agit du spectre conjoint dans $\mathbb{R}^k$ des k observables) , le projecteur spectral $\rho(E;\hbar)$ est de rang 1 et $\hbar \in \Sigma_\rho \longrightarrow \rho(E,\hbar)$ définit un état admissible.

(iii) si $E \in D$, $F_o^{-1}(E)$ est une sous-variété compacte plongée dans M , de codim = k , sur laquelle les différentielles $d(F_1)_o, \ldots, d(F_k)_o$ sont indépendantes en tout point ; on sait que $F_o^{-1}(E)$ est invariant par le flot $U^t_{H_o}$, on suppose de plus qu'il est minimal, donc connexe .

(Comme les F_{jo} commutent deux à deux pour $\{\ ,\ \}$ une condition plus faible est suffisante : qu'il existe une observable de la forme $\Phi_o(F_{1o}, \ldots, F_{ko})$ telle que $F_o^{-1}(E)$, qui est invariant par le flot $U^t_{\Phi o}$, soit minimal pour ce flot).

6.2. Traitement pour $k = 1$. La définition générale du § 6.1 devient :

(i) $H(\hbar) \in \mathcal{G}$;

(ii) le spectre de H est simple et $|\psi_E><\psi_E| \in \mathcal{G}'$ $(E \in D \subset R)$

(iii) la couche d'énergie $H_o^{-1}(E)$ est régulière, compacte, minimale (exemple : système ergodique, ou bien à 1 dimension avec couche d'énergie connexe) .

Dans ce cas: $|\psi_E><\psi_E| \sim C(\hbar) \times \rho(E)$ où $\rho(E)$ est donné par (5.8) et (5.9).

En effet $|\psi_E><\psi_E|$ est solution de (4.2), a nécessairement comme support essentiel $H_o^{-1}(E)$, est donc unique d'après le théorème 4.5, donc est déterminé par (5.8) et (5.9).

On notera que la représentation obtenue, bien qu'à coefficients distributions, est parfaitement "régulière". Elle permet le calcul de toutes les valeurs moyennes $\frac{\mathrm{Tr}\,\rho A}{\mathrm{Tr}\,\rho}$ pour $A \in \mathcal{G}$ grâce à la formule (3.13).

On peut vouloir reconstruire la fonction d'onde $\psi_E(q)$ (non normalisée). Or :

$$\rho^W(q,p;E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^\ell} \int_{\mathcal{Q}} \psi_E(q-\tfrac{r}{2})\, \psi_E^*(q+\tfrac{r}{2})\, e^{\frac{ip\cdot r}{\hbar}}\, d^\ell r \qquad (6.1)$$

d'où :

$$|\psi_E(q_o)|^2 = \int_{\mathbb{R}^\ell} \rho^W(q_o,p;E)\, d^\ell p = <\rho^W(E),\ \delta(q-q_o)>_{cl} \qquad (6.2)$$

Mais quand on développe ρ^W dans $\mathcal{G}'$, on "tue" ses oscillations rapides et (6.2) donne un "lissage" de $|\psi_E(q)|^2$ (en pointillé sur la fig. 3). De plus, en certains points q_o, (6.2) peut donner un résultat infini, quand les distributions ρ_{2n} dans (5.9) ne sont pas multipliables par $\delta(q-q_o)$ (cf. § 3.7).

C'est la singularité bien connue de "point tournant" ; on voit qu'elle n'apparaît que lorsqu'on tente de projeter sur $\mathcal{Q}$ la représentation (5.8) [2,4,13].

A ces remarques près, (6.2) nous donne le module. Il resterait à reconstruire la phase de l'onde ($\Leftrightarrow$ reconstituer les oscillations rapides) et à calculer les valeurs propres, ces deux problèmes étant très liés. Nous les résoudrons pour $\ell = 1$ au § 7. Par contre, si $\ell > k$, aucune solution ne semble en vue, comme si les lissages inhérents au passage $\mathcal{G}' \longrightarrow \tilde{\mathcal{G}}' = \tilde{\mathcal{G}}'/\mathcal{G}'_\infty$ avaient effacé irrémédiablement une partie de l'"information quantique". On peut s'attendre [21] à ce que la phase de l'onde, et la distribution des valeurs propres, soient très "irrégulières" quand $\hbar \to 0$, auquel cas leur détermination "en puissances de $\hbar$" n'est pas un problème bien posé.

6.3. Traitement pour $1 < k \leq \ell$. On introduit la "résolvante conjointe" : $G(z_1,\ldots,z_k) = \frac{1}{F_1 - z_1} \times \ldots \times \frac{1}{F_k - z_k}$, qui se calcule explicitement par les formules (5.8), (5.9) et la formule de multiplication (3.6) ; d'où l'on tire sa valeur au bord ($E \in \mathbb{R}^k$)

$$\delta(F-E) = \delta(F_1-E_1)\ldots\delta(F_k-E_k) = \frac{1}{(2\pi i)^k}\left(\frac{1}{F_1-E_1-i0} - \frac{1}{F_1-E_1+i0}\right)\ldots\left(\frac{1}{F_k-E_k-i0} - \frac{1}{F_k-E_k+i0}\right)$$

Comme au § 6.2, on déduit des hypothèses que le projecteur $|\psi_E><\psi_E|$ sur le vecteur propre conjoint des F_j pour les valeurs propres E_j (qui résout le système : $(F_j - E_j)\,\psi_E = 0$, $j = 1,\ldots,k$) vaut :

$$|\psi_E><\psi_E| \sim C(\hbar) \times \rho(E) = C(\hbar) \times (2\pi\hbar)^{\ell}\,\delta(F - E) \qquad (6.3)$$

Les mêmes remarques qu'au § 6.2 s'appliquent : calcul de $|\psi_E(q)|^2$ par la formule (6.2) , impossibilité probable de calculer la phase et le spectre si $k < \ell$.

7. Développement B K W pour les systèmes complètement intégrables.

Nous dirons qu'un système quantique ℓ-contrôlable est complètement intégrable (sa limite classique est complètement intégrable au sens...classique) . Pour un tel système, un opérateur explicite (non linéaire) permet de "projeter" le développement (5.8) de l'état sur un développement B K W (dont l'existence est postulée a priori) pour la fonction d'onde. On obtient ainsi la phase de l'onde et le spectre conjoint des opérateurs $F_1,\ldots,F_\ell$.

7.1. Rappel des résultats semiclassiques. $F_o^{-1}(E)$ est une sous-variété lagrangienne [4] ($\Leftrightarrow$ de rang ℓ et isotrope pour $\omega = \sum_1^{\ell} dp_i \wedge dq^i$), compacte, c'est donc un tore T^ℓ plongé dans M [7] . On peut calculer des coordonnées canoniques d'angle-action qui linéarisent tous les flots $U^t_{F_{jo}}$; il existera donc des combinaisons $\sum_{j=1}^{\ell} C_j F_{jo}$ dont les orbites seront denses dans $F_o^{-1}(E)$: la minimalité est automatiquement satisfaite.

La méthode BKW-Maslov donne, dans l'approximation semi-classique et dans une carte locale [4, 13, 2] , les solutions du système

$$\{(F_j - E_j)\psi_E = 0\}_{j=1,\dots,\ell}$$

admettant $F_o^{-1}(E)$ tout entier comme support essentiel : ce sont des sommes finies de la forme :

$$\psi_E^{s.cl}(q) = \sum_{p_r | F(q,pr) = E} \left|\frac{D(p)}{D(F)}(q,p_r)\right|^{\frac{1}{2}} i^{-n(q;p_r)} e^{\frac{iS_o(q;pr)}{\hbar}} \qquad (7.1)$$

où n est l'indice de Maslov (à valeurs entières) et où les phases sont reliées au support essentiel par la paramétrisation (locale) :

$$(q,p) \in F_o^{-1}(E) \Leftrightarrow \exists\, r : p = \frac{\partial S_o}{\partial q}(q;p_r)$$

Nous avons vu dans [2] que : $|\psi_E^{s.cl}><\psi_E^{s.cl}|^W = \delta(F_o - E) + \mathcal{O}(\hbar)$, ce qui suggère que (7.1) est le bon début du développement, s'il existe, de $\psi_E(q)$. Supposons donc que $\psi_E(q)$ est localement somme de développements BKW que nous écrirons en séparant le module et l'argument de l'onde :

$$\psi_E^{BKW}(q) = \sum_r \left[a_r\, e^{\frac{iS_r}{\hbar}} \right] ; \quad a_r(q;\hbar) \sim \sum_{s=o}^{\infty} a_{rs}(q)\hbar^s : \text{réel}; \qquad S_r(q,\hbar) \sim \sum_{s=o}^{\infty} S_{rs}(q)\hbar^s : \text{réel} \qquad (7.2)$$

Nous allons calculer les a_r et S_r (et montrer qu'ils sont pairs en $\hbar$ comme on peut s'y attendre) à partir de $\tilde{\rho}$, qui est connu. Nous le faisons pour $\ell = 1$ et $H(\hbar) = \hat{H}_o$, les autres cas ne présentant que des difficultés d'écriture supplémentaires.

7.2. L'opérateur canonique $\tilde{\rho} \xrightarrow{\Pi_2} \psi^{BKW}(q)(\ell = 1)$. Nous partons de (5.8) ou :

$$\tilde{\rho}_E^W = \delta(H_o - E) + \sum_{n=1}^{\infty} (-\hbar^2)^n \Big(\sum_{r=2}^{3n} \Big(\frac{(-1)^r}{r!} G_{n,r}\, \delta^{(r)}(H_o - E) \Big) \qquad (7.3)$$

où par hypothèse $ES(\tilde{\rho}_E) = H_o^{-1}(E)$ est une orbite fermée régulière simple, connexe.

On s'attend d'après (6.2) à ce que : $\tilde{\rho}(q,p) \to \psi^{BKW}(q)$ soit local en q et introduise des singularités aux points tournants qui sont les projections sur $\mathcal{Q}$ des "points verticaux" $x \in H_o^{-1}(E)$ (vérifiant $\frac{\partial H_o}{\partial p}(x) = 0$) ; notons $P_{\mathcal{Q}}$ la projection : $x = (q,p) \in M \to q \in \mathcal{Q}$. On prendra donc, comme domaine dans M de l'opérateur $\tilde{\rho} \to \psi^{BKW}$, l'ensemble $P_{\mathcal{Q}}^{-1}(\Omega)$ où $\Omega = \{\mathcal{Q}$ privé d'un ouvert contenant les points tournants$\}$ (fig.4) - On pourra alors séparer asymptotiquement d'après le théorème (4.2) les contributions à ψ^{BKW} des différentes composantes connexes, ou "branches" B_r de $P_{\mathcal{Q}}^{-1}(\Omega) \cap H_o^{-1}(E)$, chacune devant contribuer un terme $(a_r e^{iS_r/\hbar}$ dans (7.2). Aux points $q \in \Omega$ tels que $P_{\mathcal{Q}}^{-1}(q) \cap H_o^{-1}(E) = \emptyset$, $\psi(q)$ sera négligeable donc $\psi^{BKW} = 0$.

Nous fixons donc une branche B : $\frac{\partial H_o}{\partial p}$ sera de signe constant sur B , mettons $\geq c > 0$ (ex. branche supérieure fig. 4) . Sur B , p s'exprime comme fonction univoque régulière de q et de E : $p = p_E(q)$, et nous cherchons l'onde $\psi_E^{BKW} = a e^{\frac{iS}{\hbar}}$ associée.

Nous commençons par réordonner (7.3) par ordre de dérivation r croissant :

$$\tilde{\rho}_E^W = \sum_{r=o}^{\infty} (\tfrac{-1}{r!})^r \, \mathcal{C}_r(x,\hbar) \, \delta^{(r)}(H_o(x) - E) \qquad (7.4)$$

avec : $\mathcal{C}_o \equiv I$, $\mathcal{C}_1 \equiv 0$, et si $r \geq 2$: $\mathcal{C}_r \sim \sum_{k \geq \frac{r}{3}} (-\hbar^2)^k G_{k,r}$ (7.5)

Ensuite nous remarquons que les distributions multipolaires $\delta^{(r)}(H_o - E)$ peuvent s'exprimer à l'aide des $\delta^{(r')}(F(x))$ où $r' \leq r$, si F est toute fonction régulière telle que $F^{-1}(0) = H_o^{-1}(E)$: c'est un simple changement de variable sur les distributions [19] . Si nous prenons sur B la fonction $F(x) = p - p_E(q)$, et si nous gardons q comme variable indépendante, on voit que :

$$\tilde{\rho}_E^W(x)\,|B = \sum_{s=o}^{\infty} \alpha_s(q,E;\hbar) \, \delta^{(s)}(p - p_E(q)) \qquad (7.6)$$

où

$$\alpha_s(q,E,\hbar) = \int_{\mathbb{R}} d^{\ell}p\,\tilde{\rho}_E^W(q,p,\hbar)\,\frac{(p-p_E(q))^s}{s!} \quad \text{si} \quad q \in P_{\mathcal{D}}(B)\ .$$

$= 0$ sinon, donc $\alpha_s \in \mathcal{E}'(\Omega,\mathbb{R})$ et son développement se calcule grâce à (7.4), q et E étant prises comme variables indépendantes :

$$\tilde{\alpha}_s(q,E;\hbar)_{|B} = \sum_{r=o}^{\infty} \frac{1}{r!}\Big[\frac{\partial^r}{\partial E^r}\Big(\frac{(p-p_E(q))^s}{s!}\cdot\Big[\Big(\frac{\partial H_o}{\partial p}\Big)^{-1} \times \mathcal{C}_r\Big](q,p_E(q))\Big]_{p\,=\,p_E(q)} \tag{7.7}$$

Si on travaille à l'ordre $\hbar^{2n}$ la somme s'arrête à $r = 3n$.

Pour obtenir le développement BKW il suffit de substituer $\psi_E^{BKW} = a(q,\hbar)\,e^{\frac{iS}{\hbar}(q,\hbar)}$ (non normalisée) dans (6.1) et d'<u>identifier terme à terme</u> avec (7.6). En calcul symbolique sur $\mathcal{E}'$, nous pouvons transformer (6.1) comme suit:

$$\tilde{\rho}_E^W(q,p,\hbar) = \frac{1}{(2\pi\hbar)}\int_{\mathbb{R}} a(q-\tfrac{r}{2})\,a(q+\tfrac{r}{2})\,e^{\frac{i}{\hbar}[S(q-\frac{r}{2})-S(q+\frac{r}{2})+pr]}\,dr$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)}\int_{\mathbb{R}} \exp[\log a(q-\tfrac{r}{2}) + \log a(q+\tfrac{r}{2}) - \tfrac{i}{\hbar}\,\Sigma(q,r)]\,e^{\frac{i}{\hbar}(p-p_E(q)).r}\,dr \tag{7.8}$$

où $\Sigma(q,r) = S(q+\frac{r}{2}) - S(q-\frac{r}{2}) - p_E(q).r = \mathcal{O}(h^2)$ et est fonction impaire de r.

Donc (7.8) peut se développer régulièrement en puissance de $\hbar$ sous la forme :

$$\tilde{\rho}_E^W(q,p;\hbar) = \exp[\log(a+\tfrac{i\hbar}{2}\tfrac{\partial}{\partial p}) + \log(a-\tfrac{i\hbar}{2}\tfrac{\partial}{\partial p}) + \tfrac{i}{\hbar}\,\Sigma(q,i\hbar\tfrac{\partial}{\partial p})]\,\delta(p-p_E(q)) \tag{7.9}$$

$$= \exp\Big[\sum_{k=0}^{\infty}\Big(\frac{i\hbar}{2}\Big)^{2k}\Big(\frac{2}{(2k)!}\,\frac{\partial^{2k}(\log a)}{\partial q^{2k}}\Big(\frac{\partial}{\partial p}\Big)^{2k} - \frac{1}{(2k+1)!}\,\frac{\partial^{2k+1}S}{\partial q^{2k+1}}\Big(\frac{\partial}{\partial p}\Big)^{2k+1}\Big)$$

$$+ p_E(q)\,\frac{\partial}{\partial p}\Big]\,\delta(p-p_E(q)) \tag{7.10}$$

et on identifie ordre par ordre avec (7.6) :

$$(s = 0) : a(q,\hbar)^2 = \alpha_o(q,\hbar) \Rightarrow a(q,\hbar) = \alpha_o(q,\hbar)^{\frac{1}{2}} \tag{7.11}$$

(conformément à (6.2))

$$(s = 1) : a(q,\hbar)^2(-\frac{\partial S}{\partial q}(q,\hbar) + p_E(q)) = \alpha_1(q,\hbar) \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial q}(q,\hbar) = p_E(q) - \frac{\alpha_1}{\alpha_o}(q,\hbar) \tag{7.12}$$

d'où, si $\beta_o = \alpha_o\, p_E - \alpha_1$: $\psi_E(q,\hbar) = \alpha_o^{\frac{1}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\int^q \frac{\beta_o}{\alpha_o}\, dq + C)}$ (7.13)

la phase globale C étant indéterminée. Donc le calcul est terminé.

Pour $s \geq 2$, en substituant (7.11) et (7.I2) dans (7.10) on obtient des <u>contraintes</u> ou identités qui <u>doivent</u> être satisfaites par les α_s (nous l'avons vérifié aux plus bas ordres) :

$$(s = 2) : \alpha_2 = -\frac{\hbar^2}{8}\,\alpha_o\,\frac{\partial^2}{\partial q^2}(\log \alpha_o) + \frac{\alpha_1^2}{2\alpha_o}$$

$$(s = 3) : \alpha_3 = \frac{\hbar^2}{24} \times \alpha_o\,\frac{\partial^2}{\partial q^2}(\frac{\beta_o}{\alpha_o}) - \frac{\hbar^2}{8}\,\alpha_1\,\frac{\partial^2}{\partial q^2}(\log \alpha_o) + \frac{\alpha_1^3}{6\alpha_o^2} \qquad \text{etc...}$$

<u>Remarque</u> : la formule générale pour $\beta_o = p_E\,\alpha_o - \alpha_1$, tirée de (7.7) :

$$\beta_o(q,\hbar) = \sum_{r=o}^{\infty} \frac{1}{r!}\,[\,\frac{\partial^r}{\partial E^r}(p((\frac{\partial H_o}{\partial p})^{-1}\, \mathcal{C}_r)(q,p_E)]_{p = p_E(q)} \tag{7.14}$$

se réduit dans le cas $H_o = \frac{p^2}{2} + V(q)$ à : $\beta_o \equiv 1$

donc :
$$\psi_E(q,\hbar) = \alpha_o^{\frac{1}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\int^q \frac{dq}{\alpha_o} + C)}$$

forme qui se trouve par d'autres méthodes utilisant l'équation de continuité $a(q,\hbar)^2 \,.\, \nabla S\,(q,\hbar) = \text{Cte}$ [10] . La méthode que nous donnons ici a l'avantage de ne pas exiger une forme particulière pour H_o .

7.3. <u>Le recollement des phases</u>. Il semblerait que le théorème (4.2) interdise le calcul de la phase relative entre les contributions à ψ^{BKW} de deux branches disjointes.

Pourtant c'est faisable pour un système complètement intégrable, le support essentiel étant connexe. Nous l'illustrons sur un cas d'espèce à 1 dimension en utilisant le groupe de l'oscillateur harmonique; le cas général se traite en utilisant le groupe métaplectique inhomogène.

Nous supposons que $\psi(=\psi_E)$ a un support essentiel d'équation régulière en coordonnées polaires (r,θ) dans le plan (q,p) : $r = f(\theta)$. Nous savons calculer $\psi^{\pm}_{BKW}$, contribution de la branche $\begin{pmatrix}\text{supérieure}\\ \text{inférieure}\end{pmatrix}$, à une phase près. Nous faisons maintenant "tourner" ψ_E par le groupe de l'oscillateur harmonique :

$$\psi^\theta = \mathcal{U}^\theta_{\hat{b}}\psi \quad (\text{cf. } (3.10) : \hat{b} = \tfrac{1}{2}(\hat{q}^2+\hat{p}^2)) \ .$$

La méthode BKW dépendant du temps (θ étant le temps) nous dit [2] :

$$i\hbar\frac{\partial\psi^{\theta+}_{BKW}}{\partial\theta} = \hat{b}\psi^{\theta+}_{BKW} \text{ et } \psi^{\theta+}_{BKW} = a^\theta_+ e^{\frac{iS^\theta_+}{\hbar}} \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial S^\theta}{\partial\theta}+\frac{1}{2}\left(\dfrac{\partial S^\theta}{\partial q}\right)^2+\dfrac{q^2}{2} = \dfrac{\hbar^2}{2}\dfrac{\dfrac{\partial^2 a^\theta}{\partial q^2}}{a^\theta} \\ \dfrac{\partial a^\theta}{\partial\theta}+\dfrac{\partial S^\theta}{\partial q}\cdot\dfrac{\partial a^\theta}{\partial q}+\frac{1}{2}\dfrac{\partial^2 S^\theta}{\partial q^2}\cdot a^\theta = 0 \end{cases} \quad (7.15)$$

en omettant les indices + .

Nous n'utiliserons que la première équation : (7.15) .

Mais nous avons un moyen de calculer ψ^θ_{BKW} . En effet (3.14) nous dit que:

$$|\psi^\theta><\psi^\theta|^W(x) = |\psi><\psi|^W(U_{-\theta}.x) \quad (U_\theta = \text{rotation d'angle } \theta \text{ dans } M)$$

et c'est aussi le projecteur sur l'état d'énergie E du hamiltonien $\mathcal{U}^\theta H \mathcal{U}^{-\theta} = \widehat{H^\theta_o} = H^\theta$ où $H^\theta_o(x) = H_o(U_{-\theta}.x)$. Donc on peut calculer α^θ_o et β^θ_o en remplaçant H_o par H^θ_o dans (7.7) et (7.14) et on obtient :

$$\psi^{\theta+}_{BKW} = \sqrt{\alpha^\theta_o}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\int_o^q \frac{\beta^\theta_o}{\alpha^\theta_o}dq + S^\theta_+(q=0)\right)}$$

où seul $S^\theta_+(q=0)$ est indéterminé. Mais (7.15) implique :

$$S^\theta_+(q=0) - S^o_+(q=0) = \int_o^\theta \frac{\partial S^\theta}{\partial\theta}(q=0)\,d\theta = -\frac{1}{2}\int_o^\theta d\theta\left[\left(\frac{\beta^\theta_o}{\alpha^\theta_o}\right)^2 - \hbar^2\frac{\dfrac{\partial^2\sqrt{\alpha^\theta_o}}{\partial q^2}}{\sqrt{\alpha^\theta_o}}\right]_{q=0} \quad (7.16)$$

De (3.10) on déduit : $(\mathcal{U}^{\pi}\psi^{+}_{BKW})(q) = \psi^{\pi+}_{BKW}(q) = -\, i\psi^{-}_{BKW}(-q)$

(la rotation U_{π} transporte la branche supérieure sur la branche inférieure).

Faisant $q = 0$:

$$S_{+}(q=0) = S_{-}(q=0) + \tfrac{1}{2}\int_{o}^{\pi} d\theta \left[\left(\frac{\beta_o^\theta}{\alpha_o^\theta}\right)^2 - \hbar^2 \frac{\dfrac{\partial^2\sqrt{\alpha_o^\theta}}{\partial q^2}}{\sqrt{\alpha_o^\theta}}\right]_{q=0} - \frac{\pi\hbar}{2} \qquad (7.17)$$

et cette formule est un développement asymptotique régulier du déphasage puisque $q = 0$ n'est jamais un point tournant $(\forall\ \theta)$ d'après les hypothèses.

7.4. La règle de Bohr - Sommerfeld. Sous les mêmes conditions qu'au § 7.3 (l'extension au cas général se faisant de la même manière) nous allons calculer asymptotiquement le spectre de notre hamiltonien à 1 dimension.

Il suffit de faire deux fois la procédure (7.3) ou encore d'appliquer $\mathcal{U}^{2\pi}$.

D'après (3.10) : $\mathcal{U}^{2\pi}\psi^{+}_{BKW}(q) = -\,\psi^{+}_{BKW}(q)$; faisant $q = 0$ et utilisant (7.16) :

$$(S^{o}_{+}(q=0) - S^{2\pi}_{+}(q=0)) = \tfrac{1}{2}\int_{o}^{2\pi} d\theta \left[\left(\frac{\beta_o^\theta}{\alpha_o^\theta}\right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2\sqrt{\alpha_o^\theta}/\partial q^2}{\sqrt{\alpha_o^\theta}}\right]_{q=0} = (2n+1)\pi\hbar \quad (n \in \mathbb{Z}) \qquad (7.17)$$

Le premier membre est une fonction réguliere $\mathcal{S}(E,\hbar)$.

Pour H_o = oscillateur harmonique, (7.15) se résout trivialement et (7.17) donne :

$$\mathcal{S}(E,\hbar) = \oint_{H_o^{-1}(E)} pdq = (2n+1)\,\pi\hbar \quad \text{(d'où le spectre exact [4])} .$$

Dans le cas général la fonction $\mathcal{S}(E,\hbar)$ a un développement pair en $\hbar$, et : $\mathcal{S}(E,\hbar) = \oint_{H_o^{-1}(E)} pdq + \mathcal{O}(\hbar^2)$, tous les termes étant calculables (mais les calculs sont très compliqués) par notre méthode .

L'avantage de notre méthode est que (7.17) s'interprête directement en termes du spectre quantique. Si l'on suppose que tous les états liés de $H(\hbar) = \hat{H}_o$ sont développables BKW , alors toute valeur propre E satisfait l'équation (7.17) (si E n'est pas valeur propre, les solutions $\psi_E(q)$ ne sont pas tempérées et le raisonnement conduisant à (7.17) cesse d'être valable) .

Par conséquent le spectre est simple, l'espacement de deux valeurs propres successives étant au moins de l'ordre de $2\pi\hbar\, T(E)$ où $T(E) = \frac{d}{dE}\oint_{H_o^{-1}(E)} pdq =$ = période > 0 ; donc, d'après Maslov [4] pour E_n solution de : $S(E_n,\hbar) = (2n+1)\pi\hbar$, il existe une valeur propre λ_n de H telle que $|\lambda_n - E_n| = \mathcal{O}(\hbar^2)$; mais λ_n satisfait (7.17) donc $\lambda_n \equiv E_n$, et E_n est valeur propre : la relation (7.17) caractérise les valeurs propres.

Pour un système complètement intégrable à ℓ dimensions, on obtiendrait ℓ régles du type (7.17) caractérisant le spectre conjoint des ℓ observables $F_1,\ldots,F_\ell$.

7.5. Sujet de méditation.

THEOREME. - Quand un problème est soluble, cela doit être un oscillateur harmonique.

8. Une application de la représentation de Bargmann - Fock.

Nous prenons ici $\ell = 1$, mais la méthode exposée ici se généralise à un nombre quelconque de dimensions. A une dimension, la méthode BKW du § 7 s'applique lorsque le support essentiel $H_o^{-1}(E)$ est une orbite fermée régulière (connexe). Mais il y a un cas singulier important : la valeur $E = \min\{H_o(x)\}$, pour laquelle cette orbite se réduit à un point fixe stable. Génériquement, à une transformation canonique affine près, on a : $H_o(x) = \frac{1}{2}(p^2+q^2) + \mathcal{O}(|x|^3)$ et $E = 0$. Pour ce cas, la méthode du §7 n'est pas adaptée ; le mieux est de faire un développement autour des petites oscillations linéarisées (problème du type (C) : traitement détaillé dans [3]) .

8.1. Changement d'échelle. L'application : $\psi \in \mathcal{H} \xrightarrow{U} (U\psi)(q) = \hbar^{-\frac{1}{4}} \psi(\hbar^{-\frac{1}{2}} q)$ réalise l'équivalence unitaire entre le hamiltonien quantique $H = \hat{H}_o$ et un opérateur $\hbar H'(\hbar)$. Si H_o admet le développement de Taylor autour de $x = 0$:

$$H_o(x) \sim \tfrac{1}{2}(p^2+q^2) + \sum_{|\alpha|=3}^{\infty} h_\alpha x^\alpha \qquad (8.1)$$

alors formellement : $$H'(\hbar) \sim \tfrac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right) + \sum_{n=3}^{\infty} H_n \hbar^{n/2}$$

où les H_n sont des opérateurs différentiels calculables à partir de (8.1) . La "limite classique" ($\hbar \to 0$) de H' est un oscillateur harmonique quantique $H'(0)$ [22] .

8.2. Représentation de Bargmann - Segal. Soit $\{e_n\}$ la base orthonormée standard des fonctions propres de l'oscillateur harmonique $H'(0)$ ([9.10]) . L'application

$$\psi \in \mathcal{H} \xrightarrow{V} \psi(z) = \sum_{0}^{\infty} \langle e_n, \psi \rangle \frac{z^n}{(n!)^{\frac{1}{2}}}$$

réalise une isométrie entre $\mathcal{H}$ et un espace L^2 de fonctions entières de la variable z . Dans cette représentation [23,24] les opérateurs standard de création et d'annihilation agissant sur les"fonctions d'onde" $\psi(z)$ ont la forme :

$$a^+ = V\left(\frac{-\frac{id}{dq}+iq}{\sqrt{2}}\right) V^+ = z \; ; \; a = V\left(\frac{\frac{id}{dq}-iq}{\sqrt{2}}\right) V^+ = \frac{d}{dz}$$

(le fait que a^+ est diagonal rattache cette méthode aux traitements par les "états cohérents")

Nous allons tout simplement exprimer H' dans la représentation de Bargmann-Segal et résoudre directement l'équation de Schrödinger : $(H'\psi(z) = E\psi(z)$ en puissances de $\sqrt{\hbar}$, dans le cas particulier (le cas général se traitant de même) de l'oscillateur anharmonique :

$$H_o = \tfrac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{v}{4} q^4$$

$$H' = \tfrac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right) + \frac{v\hbar}{4} q^4$$

(on va ici faire $\hbar = 1$ et développer en puissances de v : simple question d'écriture) .

8.3. Solution du problème.

Dans la représentation de Bargmann, avec les substitutions additionnelles : $E = h+\frac{1}{2}$ (et $\psi(z) = e^{\frac{z^2}{2}} \varphi(z)$ qui simplifie l'écriture [24]) l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$z \frac{d\varphi}{dz} + z^2\varphi + \frac{v}{16} \frac{d^4\varphi}{dz^4} = h\varphi \qquad (8.2)$$

On pourrait résoudre cette équation par des méthodes perturbatives linéaires [24]. Ici nous voulons être fidèles à "l'esprit BKW" . Nous posons donc : $\varphi(z) = e^{\int^z w(z')dz'}$ (on encore : $u(z) = w(z) + z = \frac{d\psi/dz}{\psi}$) : l'équation (8.2) devient :

$$w(z) = \frac{h}{z} - z - \frac{v}{16z} \frac{d^3w}{dz^3} + 3(\frac{dw}{dz})^2 + 4w \frac{d^2w}{dz^2} + 6 \frac{dw}{dz} w^2 + w^4 = F\{w(z)\} \qquad (8.3)$$

On doit pouvoir résoudre cette équation par des méthodes non-linéaires puissantes ; ici nous voulons seulement $w(z)$ en série <u>formelle</u> de v ; la procédure élémentaire d'itération : $w_{n+1} = F\{w_n\}$ est alors convergente. La fig. 5 montre le résultat obtenu à l'ordre 4 pour $u(z)$, par calcul sur ordinateur (nous remercions J.M. DROUFFE (Saclay) de son assistance) . Nous pensons que les singularités en z de cette expression ne se retrouvent pas dans $w(z)$ (en quelque sorte: $z = 0$ et $z = \infty$ sont les "points tournants" dans cette représentation) .

La règle de Bohr-Sommerfeld consiste simplement à exprimer l'<u>analyticité</u> de $\psi(z)$ en $z = 0$: si α est un contour positif entourant le point $z = 0$:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{\alpha} \frac{\psi'}{\psi} dz = \operatorname*{Res}_{z=o} u(z) = n \quad (n \in \mathbb{N}) \qquad (8.4)$$

Le résidu est une fonction $R(h,v)$ qu'on obtient en puissances de v :

$$R(h,v) = h - v(\frac{3}{16} + \frac{3h}{8} + \frac{3h^2}{8}) + v^2(\frac{15}{64} + \frac{95h}{128} + \frac{105h^2}{128} + \frac{35h^3}{64}) + \ldots \qquad (8.5)$$

De (8.4) et (8.5) on tire les niveaux de $(H' - \frac{1}{2})$:

$$h_n = n + \frac{3v}{16}(1 + 2n + 2n^2) - \frac{v^2}{128}(21 + 59n + 51n^2 + 34n^3) + \ldots$$

en accord avec la théorie des perturbations linéaires (les niveaux de $H = \hat{H}_o$ sont les $\hbar(h_n + \frac{1}{2})$) . Nous ne comprenons pas très bien pourquoi les singularités en $\frac{1}{z^{2k+1}}$ de $u(z)$ se laissent éliminer si facilement, mais il semble bien qu'en dehors d'un voisinage de $z = 0$ (et de $z = \infty$) nous avons obtenu un développement régulier de $\psi(z)$ permettant le calcul des valeurs propres à tout ordre.

8.4. Systèmes quasiséparables: à plusieurs dimensions, si H_o possède un point fixe elliptique stable en $x = 0$ (on dit que H_o est quasiséparable) , nous savons généraliser la méthode : le calcul explicite des fonctions d'onde et valeurs propres reste possible (mais il est plus compliqué) [3] .

9. Conclusion.

Pour faire l'asymptotique des états stationnaires, il faut d'abord déterminer les supports minimaux, dont la forme est donnée par la solution classique du problème. Sous l'hypothèse que ces supports sont des variétés régulières qu'on sait calculer, ce qu'on peut faire ensuite dépend fondamentalement de leur structure et de leur dimension k . En général on peut seulement développer l'état (§ 6) . Si $k = \ell$ et que le support est une variété lagrangienne on peut calculer la fonction d'onde et le spectre (§ 7) . Si $k < \ell$ et que le support est une sous-variété d'une variété lagrangienne (problèmes traités dans [2] et à la conférence d'Aix [16]) on peut faire la même chose en combinant les méthodes des § 7 et 8 .

Nous remercions le Prof. R. BALIAN (Saclay) d'avoir guidé ce travail, et les Profs. Y. COLIN DE VERDIERE, V. GUILLEMIN, B. KOSTANT, J. LASCOUX, S. STERNBERG et d'autres collègues pour de fructueuses discussions.

A	Propriétés statistiques ou en moyenne	Mécanique statistique quantique en représentation de Wigner - Mouvements collectifs : méthode de Thomas-Fermi	Equation de la chaleur Formules de trace
		Répartition asymptotique des valeurs propres	
B	Description de solutions individuelles	Méthode BKW Première mécanique quantique Règles de Bohr-Sommerfeld Maslov	Fronts d'onde, Microfonctions Opérateurs intégraux de Fourier Quantification
C	Linéarisation et itération	Théories des perturbations Méthodes de champ moyen Fluctuations quantique autour de points fixes	Systèmes dynamiques au voisinage de points fixes

Fig. 1

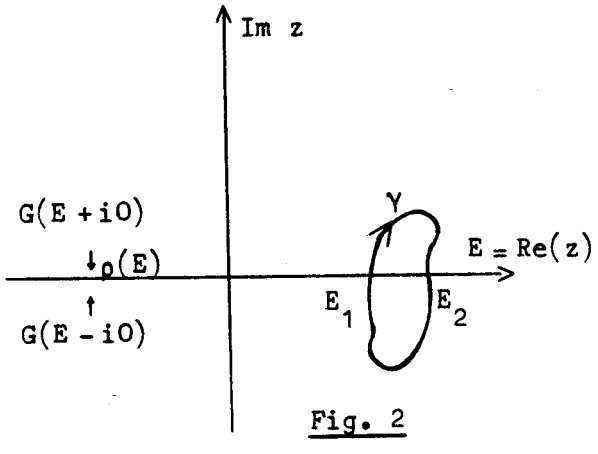

Fig. 2

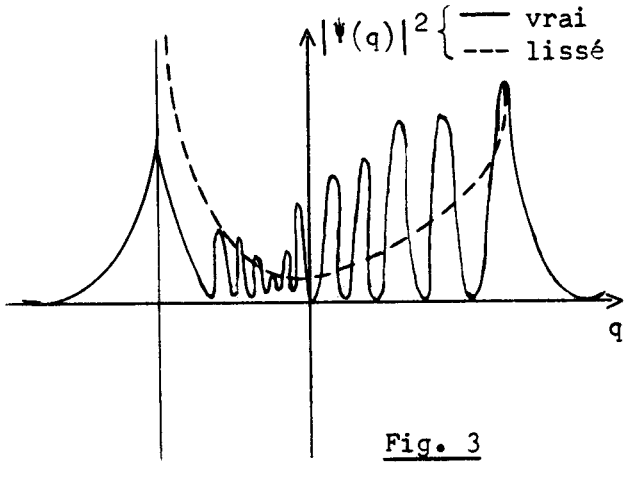

Fig. 3

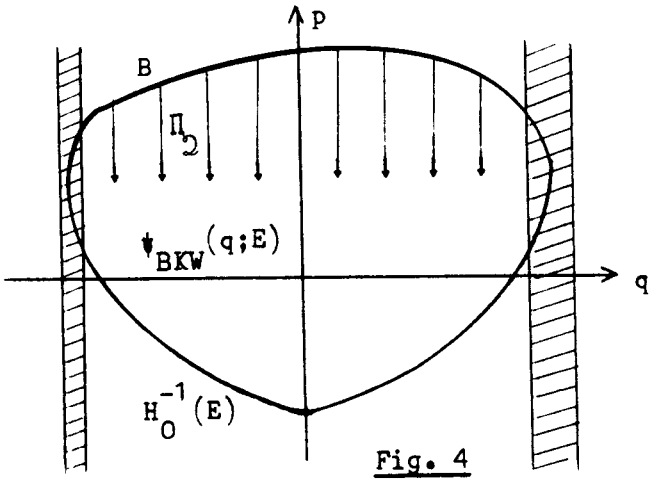

Fig. 4

Fig. 5

REFERENCES SOMMAIRES

[1] M. BERRY et K. MOUNT — Rep. Prog. Phys. 35 (1972), 315.

[2] A. VOROS — Prétirage Saclay D.A.T. 74/57, soumis à Ann. Inst. Poincaré.

[3] A. VOROS — A paraître.

[4] J.B. KELLER — Ann. Phys. 4 (1958), 180 ;
V. MASLOV — Théorie des Perturbations, avec articles d'ARNOLD et BOUSLAIEV (Dunod, 1972) ;
J.P. ECKMANN et R. SENEOR — Arch. Rat. Mech. (A paraître).

[5] R. BALIAN et C. BLOCH — Ann. Phys. (1974), 514.

[6] V. ARNOLD — Funct. Anal. (russe) 6 (1972), 12.

[7] R. ABRAHAM et J. MARSDEN — Foundations of Mechanics (Benjamin, 1967) ;
L. LANDAU et E. LIFSCHITZ — Mécanique (Mir, Moscou) ;
V. ARNOLD et A. AVEZ — Problèmes Ergodiques de la Mécanique Classique (Gauthier-Villars, 1967).

[8] G. MACKEY — Mathematical Foundations of Quantum Mechanics (Benjamin, 1963).

[9] L. LANDAU et E. LIFSCHITZ — Mécanique Quantique (Mir, Moscou).

[10] A. MESSIAH — Mécanique Quantique (Dunod, 1965).

[11] H. WEYL et H. ROBERTSON — Theory of Groups and Quantum Mechanics (Dover).

[12] L. SCHWARTZ — Distributions (Hermann, 1967).

[13] J. LERAY — Séminaire Collège de France (1972-1974), et Conférences : RCP 25, vol. 18 (Strasbourg), Opérateurs Intégraux de Fourier (Nice, 1974) Géométrie Symplectique (Aix-en-Provence 1974).

[14] L. HÖRMANDER et J. DUISTERMAAT — Acta Math. 127 (1971), 79 et 128 (1972), 183 ;
J. DUISTERMAAT — Fourier Integral Operators (Courant Ins. Press, 1973)
Lecture Notes In Mathematics n° 287 : Hyperfunctions (Springer).

[15] E. WIGNER — Phys. Rev. 40 (1932), 749 ;
H. GROENEWOLD — Physica 12 (1946), 405 ;
K. IMRE et al. — J. Math. Phys. 8 (1967), 1097 ;
A. GROSSMANN, G. LOUPIAS et E.M. STEIN — Ann. Inst. Four. 18 (1969), 343 .

[16] I. SEGAL — Mat. Fys. Medd. Danske 31 (1959), 1 ;
D. SHALE — Trans. AMS 103 (1962), 149 ;
A. WEIL — Acta Math. 111 (1964), 143
Conférence de Géométrie Symplectique (Aix-en-Provence, 1974) : en particulier V. GUILLEMIN, B. KOSTANT, S. STERNBERG, A. WEINSTEIN, A. VOROS.

[17] Y. COLIN DE VERDIERE — Quasi-Modes... (Prétirage Maths. Univ. Paris 6).

[18] G. BARAFF et S. BOROWITZ — Phys. Rev. 121 (1961), 1704.

[19] I. GELFAND et F. CHILOV — Distributions (Dunod).

[20] R. BALIAN et C. BLOCH — Ann. Phys. 60 (1970), 401 ; 63 (1971), 592 ; 64 (1971), 271 ; 69 (1972), 76.

[21] I. PERCIVAL — J. Phys. (Letters) B 6 (1973), L 229.

[22] K. HEPP — Comm. Math. Phys. 35 (1974), 265.

[23] V. BARGMANN, I. SEGAL — Comm. Pure Appl. Math. 14 (1961), 187 ; Illinois J. Math. 6 (1962), 500.

[24] C. BENDER et T.T. WU — Phys. Rev. 184 (1969), 1231.