

Applications d'une représentation de la mécanique quantique par des fonctions sur l'espace de phase *

P. Huguenin

Institut de Physique, Université de Neuchâtel — Suisse

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1090—1098 [1973]; eingegangen am 1 December 1972)

The Weyl-Wigner transformation enables us to construct a representation of quantum motion equations using functions in phase space. The states of the system are determined by the quasi-probability distribution in phase space and the motion is described by an orthogonal integral operator. This formalism is employed in the study of the classical meaning of the discrete symmetry groups, in the problem of defining the current probability and in the proving of the expression of cross section from the S-matrix.

1. Introduction

Déjà du temps de mes études, le professeur K. Bleuler¹ était préoccupé par les relations déroutantes entre les formalismes classique et quantique de la mécanique. Un moyen d'étude de ces relations se trouve dans l'isomorphisme de Weyl² et Wigner³. Cet isomorphisme conduit à la formulation de la mécanique quantique à l'aide de fonctions sur l'espace de phase. Ces fonctions sont les images des opérateurs de la mécanique quantique. L'image de la matrice densité donne lieu à la notion de quasi-probabilité. Baker⁴ a construit définitivement l'algorithme permettant de formuler directement les problèmes quantiques sur l'espace de phase.

Si ce formalisme a été appliqué à l'étude d'approximations classiques, la complexité de l'image du commutateur⁵ a nui à son succès. Le but de ce travail est de montrer que la notion de quasi-probabilité est féconde chaque fois que les détails du déroulement spatio-temporel d'un phénomène jouent un rôle. C'est le cas des notions de section efficace et de courant de probabilité, exemples traités ici en détail. En passant, je discute l'interprétation classique des nombres quantiques correspondants aux inversions de l'espace.

2. Espace de phase

J'utiliserai des notations apparentées à celles qu'utilise le professeur Bleuler¹ et son groupe de physique mathématique à Bonn. A chaque coordonnée q^k correspond une variable conjuguée p_k . Je

grouperai p et q sous forme de coordonnée de phase. Elle peut être condensée en notation matricielle.

$$x = (x^\mu) = \begin{pmatrix} q^1 \\ q^n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix}, \quad \partial = (\partial_\mu) = \begin{pmatrix} \partial \\ \partial p_n \\ \vdots \\ \partial \\ \partial q^1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Où n est le nombre de degrés de liberté du système.

La forme antisymétrique fondamentale sera définie de la façon suivante:

$$\tilde{x} A x' = -\tilde{x}' A x = \sum_{k=1}^n q^k p_k' - p_k q'^k. \quad (2.2)$$

Où le symbole \sim note l'opération de transposition et

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Nous avons alors

$$A \sim = -A = A^{-1}, \quad A^2 = -\mathbf{1}. \quad (2.4)$$

L'équation du mouvement s'écrit

$$\dot{x} = A \partial h(x). \quad (2.5)$$

Où $h(x)$ est la fonction de Hamilton. Le crochet de Poisson s'écrit

$$\{a, b\}_P = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial a}{\partial q^k} \frac{\partial b}{\partial p_k} - \frac{\partial a}{\partial p_k} \frac{\partial b}{\partial q^k} \right) = (\partial a) \sim A \partial b. \quad (2.6)$$

Nous rencontrerons l'expression suivante pour laquelle il est bon d'avoir une notation:

$$2(\tilde{x} A z + \tilde{y} A x + \tilde{z} A y) := (x, y, z). \quad (2.7)$$

Reprint requests to Prof. P. Huguenin, Institut de Physique de l'Université de Neuchâtel, Rue A.-L. Breguet 1, CH-2000 Neuchâtel (Suisse).

* Ce travail a été écrit en hommage à mon maître K. Bleuler, à l'occasion de son soixantième anniversaire.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition “no derivative works”). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

(x, y, z) est donc un nombre dépendant de 3 points de l'espace de phase. Ce nombre reste évidemment invariant pour les transformations linéaires inhomogènes symplectiques sur la forme Λ .

$$\begin{aligned}(x, y, z) &= (y, z, x) = -(x, z, y) = 2(y - z) \sim \Lambda(x - z) \\ (x + a, y + a, z + a) &= (x, y, z), \\ (x, y, 0) &= 2\tilde{y} \Lambda x.\end{aligned}\quad (2.8)$$

3. Espace de Hilbert

Nous noterons les opérateurs par des majuscules, les valeurs propres par des minuscules et les états propres par des «kets» de Dirac. Ainsi, par exemple:

$$Q = \int |q\rangle q \langle q| dq, \quad P = \int |p\rangle p \langle p| dp. \quad (3.1)$$

Les opérateurs P et Q satisfont les relations de commutations de Heisenberg et nous choisissons la représentation habituelle de Schroedinger pour laquelle

$$\langle q|P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \langle q| \quad (3.2)$$

et les états impropres de Dirac sont normés

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'), \quad \langle q|q'\rangle = \delta(q - q'). \quad (3.3)$$

Il reste une phase à fixer que nous choisissons de façon habituelle

$$(1/2\pi\hbar) \exp\{ipq/\hbar\} = \langle q|p\rangle. \quad (3.4)$$

La généralisation pour n degrés de liberté est bien entendu traditionnelle. Elle se fait par produit tensoriel des espaces pour un seul degré de liberté.

Les grandeurs physiques sont obtenues par prises de moyennes avec l'opérateur densité \mathcal{W} . Ainsi

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(A\mathcal{W}). \quad (3.5)$$

L'évolution temporelle est déterminée par une transformation unitaire U_t satisfaisant l'équation de Schroedinger

$$\partial U_t / \partial t = (-i/\hbar) H U_t, \quad U_0 = \mathbf{1}. \quad (3.6)$$

La valeur moyenne d'une observable dépend alors du temps

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_t &= \text{Tr}(A \mathcal{W}_t) = \text{Tr}(A U_t \mathcal{W}_0 U_t^\dagger) \\ &= \text{Tr}(A_t \mathcal{W}_0).\end{aligned}\quad (3.7)$$

Où

$$\mathcal{W}_t = U_t \mathcal{W}_0 U_t^\dagger, \quad A_t = U_t^\dagger A U_t. \quad (3.8)$$

La première relation correspond à la description de Schroedinger. La seconde à celle de Heisenberg. La

dérivée temporelle s'obtient à l'aide de (3.6)

$$\dot{\mathcal{W}}_t = (1/i\hbar) [H, \mathcal{W}_t], \quad \dot{A}_t = (1/i\hbar) [A_t, H]. \quad (3.9)$$

L'ensemble des opérateurs que nous considérerons se limite à ceux dont les éléments de matrice pris entre états impropres $|q\rangle$ sont des distributions tempérées

$$\langle q|A|q'\rangle \in S'. \quad (3.10)$$

4. Isomorphisme de Weyl et Wigner

Cet isomorphisme repose sur l'existence d'un ensemble d'opérateurs appelés ici $U(x)$ ayant une foule de propriétés remarquables. Il convient tout d'abord de les expliciter.

4.1. Définitions et propriétés de $U(x)$

Considérons un système à un seul degré de liberté et définissons

$$\begin{aligned}U(x) &:= (1/2\pi\hbar) \int dq' dp' \\ &\exp\{(i/\hbar) \cdot [(P - p) q' - (Q - q) p']\} \\ &= (1/2\pi\hbar) \int dx' \exp\{(i/\hbar) (X - x) \sim \Lambda x'\}.\end{aligned}\quad (4.1.1)$$

Où X est l'application de la notation condensée (2.1) aux opérateurs Q et P . Cet opérateur a été considérée tout d'abord par Weyl². En notation de Dirac, cet opérateur peut être écrit sous les formes suivantes

$$\begin{aligned}U(x) &= \int du |q + u/2\rangle \exp\{ip u/\hbar\} \langle q - u/2| \\ &= \int dv |p + v/2\rangle \exp\{-iv q/\hbar\} \langle p - v/2|.\end{aligned}\quad (4.1.2)$$

On vérifie* l'égalité des éléments de matrice de ces 3 formes différentes pris entre $\langle q_1|$ et $|q_2\rangle$. Pour n degrés de liberté, il suffit de prendre le produit tensoriel des espaces de Hilbert correspondants

$$U(x) = U(q^1, p_1) \otimes U(q^2, p_2) \otimes \dots \otimes U(q^n, p_n). \quad (4.1.3)$$

On vérifie les propriétés suivantes:

$$U(x) = U^+(x), \quad (a)$$

$$\text{Tr } U(x) = 1, \quad (b)$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n q U(x) = |p\rangle \langle p|, \quad (c)$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n p U(x) = |q\rangle \langle q|, \quad (d) \quad (4.1.4)$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dx U(x) = \mathbf{1}. \quad (e)$$

* Il est utile de rappeler ici l'identité $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$ qui est valable si $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$.

De plus

$$U^2(x) = 2^{2n} \mathbf{1}, \quad (a)$$

$$\text{Tr}(U(x) U(x')) = (2\pi\hbar)^n \delta(x-x'), \quad (b)$$

$$\text{Tr}(U(x) U(x') U(x'')) = 2^{2n} \exp\left\{-(i/\hbar)(x, x', x'')\right\} \quad (c)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(U(x_1) U(x_2) U(x_3) U(x_4)) &= 2^{2n} (2\pi\hbar)^n \quad (d) \\ &\cdot \delta^{2n}(x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \exp\left\{-(i/\hbar)(x_1, x_2, x_3)\right\} \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

où la notation (x, y, z) a été définie au paragraphe 2. Les opérateurs $U(x)$ sont donc hermitiens, bornés et linéairement indépendants. On voit que l'élément de volume approprié à l'espace de phase est

$$d\tau = d^n p d^n q / (2\pi\hbar)^n. \quad (4.1.6)$$

C'est l'élément de volume propre à la théorie cinétique des gaz.

4.2. Isomorphisme entre opérateurs sur l'espace de Hilbert et fonctions sur l'espace de phase

Appelons φ l'application faisant correspondre la fonction $\text{Tr}[A U(x)]$ à tout opérateur A

$$A \xrightarrow{\varphi} a \quad \text{où} \quad a(x) = \text{Tr}(A U(x)). \quad (4.2.1)$$

Cette application linéaire a été considérée par Wigner³. Elle associe une fonction réelle aux opérateurs hermitiens. Les observables de base P_k et Q^k ont les fonctions p_k , q^k pour image, ce qu'un calcul à partir de (4.1.2) montre immédiatement.

$$\mathbf{1} \xrightarrow{\varphi} 1, \quad P_k \xrightarrow{\varphi} p_k, \quad Q^k \xrightarrow{\varphi} q^k. \quad (4.2.2)$$

Cette application convient donc à la définition d'une image classique des observables quantiques. Le noyau de l'application se résume à un ensemble d'opérateurs pathologiques pour lesquels la transformée de Fourier de leurs éléments de matrices est identiquement nulle, c'est-à-dire dont les éléments de matrice sont nuls au sens des distributions. Relativement à l'espace (3.10) le noyau de l'application φ est nul.

On peut donc chercher l'application inverse. Considérons l'application φ^{-1}

$$a \xrightarrow{\varphi^{-1}} A = \int U(x) a(x) d\tau. \quad (4.2.3)$$

Cette application est inverse à droite de φ . En effet

$$a(x) \xrightarrow{\varphi_0 \varphi^{-1}} \text{Tr}[U(x) \int U(\bar{x}) a(\bar{x}) d\bar{\tau}] = a(x)$$

c'est une conséquence de (4.1.5b). $\varphi^{-1} \circ \varphi$ projette sur l'espace d'opérateurs (3.10) que nous considérons.

L'opération φ^{-1} faisant correspondre un opérateur à une fonction sur l'espace de phase peut-être considérée comme une quantification².

Grâce à l'opérateur $U(x)$ nous avons pu établir une correspondance bi-univoque entre opérateurs de la mécanique quantique et fonctions sur l'espace de phase. Cette correspondance est linéaire. Elle préserve donc les structures d'espace vectoriel des deux espaces fonctionnels. De plus, par (4.1.4b)

$$\text{Tr} A = \int a(x) d\tau. \quad (4.2.4)$$

Nous avons intentionnellement omis de discuter l'unicité des correspondances de ce genre. Pour les buts que nous nous sommes fixés, il suffit d'en choisir une et de s'y tenir. On sait que d'autres isomorphismes sont possibles mais celui de Weyl et Wigner est le plus simple. Cette simplicité se remarque le mieux sur les transformées de Fourier des observables classiques. Posons en effet

$$a(qp) = \int du dv a(u, v) \exp\{i(uq + vp)\}. \quad (4.2.5)$$

La relation (4.2.3) et la définition (4.1.1) nous donnent

$$A = \int du dv a(u, v) \exp\{i(uQ + vP)\}. \quad (4.2.6)$$

D'autres correspondances ont été utilisées. On en trouve une discussion approfondie dans l'article de Mehta⁶.

4.3. Image du produit d'opérateurs

Le produit de fonctions sur l'espace de phase ne pourra jamais correspondre au produit d'opérateurs puisque ce dernier n'est pas commutatif. Il est facile de définir un nouveau produit de fonctions correspondant au produit d'opérateurs:

$$a \circ b := \varphi[(\varphi^{-1} a)(\varphi^{-1} b)]. \quad (4.3.1)$$

Le calcul explicite livre:

$$\begin{aligned} [a \circ b](x) &= \text{Tr}[\int d\bar{\tau} d\bar{\tau}' a(\bar{x}) b(\bar{x}) (U(x) U(\bar{x}) U(\bar{\tau}))] \\ &= 2^{2n} \int d\bar{\tau} d\bar{\tau}' a(x + \bar{y}) b(x + \bar{y}) \\ &\quad \cdot \exp\left\{(+2i/\hbar) \bar{y} \sim A \bar{y}\right\}. \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Si l'un des facteurs au moins est un polynôme, alors, le calcul se simplifie et⁴

$$[a \circ b](x) = a(x) \exp\left\{(i\hbar/2) \bar{\partial}_\mu A^{\mu\nu} \bar{\partial}_\nu\right\} b(x). \quad (4.3.3)$$

Le crochet de Moyal⁵ s'obtient simplement en remplaçant l'exponentielle par le sinus

$$\frac{1}{i\hbar} [a \circ b - b \circ a](x) = \frac{2}{\hbar} a(x) \cdot \left[\sin \frac{\hbar}{2} \vec{\partial}_\mu A^{\mu\nu} \vec{\partial}_\nu \right] b(x) := \{a(x), b(x)\}_{\text{Moyal}}. \quad (4.3.4)$$

Le crochet ainsi défini se réduit au crochet de Poisson si l'un des deux facteurs est de degré inférieur ou égal à 2. Par construction il satisfait l'égalité de Jacobi⁷.

La trace du produit d'opérateurs se calcule facilement à partir de (4.2.4) et (4.3.2)

$$\begin{aligned} &= \int d\tau [a \circ b](x) \\ \text{Tr}(AB) &= \int d\tau a(x) b(x). \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

Le produit scalaire de Hilbert-Schmidt se calcule comme le produit scalaire des fonctions de carré sommable sur l'espace de phase.

4.4. Image de la matrice densité et quasi-probabilité sur l'espace de phase

L'isomorphisme de Weyl-Wigner nous conduit à regarder les fonctions sur l'espace de phase comme des éléments d'un espace fonctionnel. Dans certaines circonstances, la valeur d'une fonction sur l'espace de phase peut avoir un sens physique. C'est le cas pour l'image de la matrice densité.

Mettons en regard les propriétés de la matrice densité W avec celles de son image $w = \varphi(W)$

$$W = W^+ \Leftrightarrow w(x) = w^*(x), \quad (\text{a})$$

$$\text{Tr } W = 1 \Leftrightarrow \int d\tau w(x) = 1, \quad (\text{b})$$

$$\text{Tr } W^2 = \varepsilon^2 \leq 1 \Leftrightarrow \int d\tau w^2(x) = \varepsilon^2 \leq 1, \quad (\text{c}) \quad (4.4.1)$$

$$\langle q | W | q \rangle \geq 0 \Leftrightarrow \int d^n p w(x) \geq 0 \quad \forall q, \quad (\text{d})$$

$$\langle p | W | p \rangle \geq 0 \Leftrightarrow \int d^n q w(x) \geq 0 \quad \forall p. \quad (\text{e})$$

La condition (c) provient du fait que les valeurs propres de W sont plus petites ou égales à 1. Les conditions (d) et (e) proviennent de la positivité de W . Les conditions (4.4.1) sont nécessaires mais malheureusement pas suffisantes pour caractériser une matrice densité. Ces conditions nécessaires nous permettant tout de même d'interpréter $w(x)$.

En mécanique quantique on interprète

$$\langle q | W | q \rangle = \int (d^n p / (2\pi\hbar)^n) w(x) \quad (4.4.2)$$

comme la probabilité de trouver le système dans la configuration q . Cette grandeur est définie positive.

De même

$$\langle p | W | p \rangle = \int [d^n q / (2\pi\hbar)^n] w(x) \quad (4.4.3)$$

est la probabilité de trouver le système avec l'impulsion p . Cette grandeur est également définie positive. Il est donc naturel d'interpréter $w(p, q)$ comme une densité de quasi-probabilité sur l'espace de phase. Il faut dire quasi-probabilité parce que $w(x)$ peut être négatif dans certains petits domaines de l'espace de phase. Il faut noter ici l'unité de volume d'espace de phase $(2\pi\hbar)^n = h^n$ qui est bien celui de la théorie cinétique des gaz.

La quasi probabilité a certainement été écartée des considérations de biens des physiciens à cause de la difficulté d'interpréter des «probabilités négatives». Cette difficulté n'est en fait pas bien grave. La quasi-probabilité sert de base au calcul des probabilités physiques à l'aide d'une intégration sur une efficacité de détection. Les détecteurs physiquement possibles sont tels que

$$\text{Tr}(DW) = \int d(x) w(x) d\tau > 0. \quad (4.4.4)$$

Le refus de considérer des probabilités négatives rappelle les difficultés historiques liées à $\sqrt{-1}$ ou à l'acceptation d'une métrique indéfinie en théorie des champs.

5. Automorphismes

5.1. Définition et formules générales

Dans plusieurs contextes différents on rencontre des applications linéaires entre opérateurs de l'espace de Hilbert

$$W \xrightarrow{\Psi_{AB}} W' = A W B. \quad (5.1.1)$$

Souvent $A = B^{-1}$ et il s'agit alors d'automorphismes. Il est préférable d'en rester au cas le plus général de morphismes internes pour établir les formules générales. L'application Ψ_{AB} étant linéaire, on obtient une application linéaire entre les images de W et W' :

$$\begin{aligned} w' &= \varphi(w') = \varphi(A W B) \\ &= \varphi[(\varphi^{-1}(a))(\varphi^{-1}(w))(\varphi^{-1}(b))] . \end{aligned}$$

Ou bien explicitement à partir de (4.2.1) et (4.2.3)

$$w'(x) = \int \Psi_{AB}(x x') w(x') d\tau' \quad (5.1.2)$$

avec

$$\Psi_{AB}(x x') = \text{Tr}(U(x) A U(x') B). \quad (5.1.3)$$

$\Psi_{AB}(x x')$ est donc un noyau intégral qu'il faudra interpréter dans différentes circonstances. Il est donc utile d'étudier ses propriétés générales. On a :

$$\Psi_{AB}(x x') = \Psi_{BA}(x' x), \quad (a)$$

$$\text{Tr}(AB) = \int \Psi_{AB}(x x') d\tau d\tau', \quad (b)$$

$$[a \circ b](x) = \int \Psi_{AB}(x x') d\tau', \quad (c)$$

$$[b \circ a](x) = \int \Psi_{AB}(x' x) d\tau', \quad (d) \quad (5.1.4)$$

$$\Psi_{CABD}(x x') = \int \Psi_{CD}(x \bar{x}) \Psi_{AB}(\bar{x} x') d\bar{x}, \quad (e)$$

$$\int \Psi_{AA^{-1}}(x x') d\tau' = \int \Psi_{AA^{-1}}(x x') d\tau = 1. \quad (f)$$

La propriété (a) découle de (5.1.3) et de la cyclicité de la trace. Les relations (b), (c) et (d) proviennent de (4.1.4e). La relation (e) découle de la définition (5.1.1) et les relations (f) sont conséquences de (c) et (d).

On peut exprimer Ψ_{AB} à partir des images a et b des opérateurs A et B :

$$\Psi_{AB}(x x') = \int d\bar{\tau} d\bar{\tau}' a(\bar{x}) b(\bar{x}') \cdot \text{Tr}[U(x) U(\bar{x}) U(x') U(\bar{x}')]. \quad (5.1.5)$$

Cette expression peut être simplifiée en utilisant (4.1.5d) et (2.8)

$$\Psi_{AB}(x x') = 2^{2n} (2\pi\hbar)^n \cdot \int d\bar{\tau} a\left(\frac{1}{2}(x+x') + \bar{x}\right) b\left(\frac{1}{2}(x+x') - \bar{x}\right) \cdot \exp\left\{(2i/\hbar)[(x-x') \sim A\bar{x}]\right\}. \quad (5.1.6)$$

Il faut avertir le lecteur que le problème inverse consistant à trouver a et b à partir de Ψ_{AB} n'a pas toujours de solution. Par transformée de Fourier inverse, on trouve en effet

$$a(x) b(x') = \int \Psi_{AB}\left(\frac{x+x'+\bar{x}}{2}, \frac{x+x'-\bar{x}}{2}\right) \cdot \exp\left\{(i/\hbar)(x-x') \sim A\bar{x}\right\} d\bar{\tau}. \quad (5.1.7)$$

Cette expression ne factorise que pour une certaine classe de fonctions Ψ !

5.2. Transformations unitaires

On sait que les transformations unitaires jouent un rôle central en mécanique quantique par ce qu'elles laissent régles de commutations et produit scalaires invariants. A la transformation

$$W' = S W S^+, \quad S S^+ = 1 \quad (5.2.1)$$

correspond le noyau intégral

$$\Psi_{SS^+}(x x') = \text{Tr}(U(x) S U(x') S^+). \quad (5.2.2)$$

Par cyclicité de la trace, on montre en prenant le conjugué hermitien que Ψ est réel

$$\Psi_{SS^+}(x, x') = \Psi_{SS^+}^*(x, x'). \quad (5.2.3)$$

De plus

$$\int \Psi_{SS^+}(x x') d\tau = \int \Psi_{SS^+}(x x') d\tau' = 1. \quad (5.2.4)$$

Cette condition assure la conservation de la probabilité comme dans les chaînes de Markoff. Ici la situation est plus générale parce que $\Psi_{SS^+}(x x')$ n'est pas défini positif. Les mêmes remarques que celles du § 4.4 s'appliquent à Ψ qui est un noyau intégral de transformation de quasi-probabilité.

L'unitarité peut être exploitée à l'aide de (5.1.4e) ce qui donne une propriété d'orthogonalité pour Ψ :

$$\int \Psi_{SS^+}(x \bar{x}) \Psi_{SS^+}(x' \bar{x}') d\bar{x} = \Psi_{11}(x x') = (2\pi\hbar)^n \delta(x - x'). \quad (5.2.5)$$

Il est utile souvent de considérer des transformations infinitésimales

$$S = 1 + i\lambda H, \quad H = H^+. \quad (5.2.6)$$

Dans ce cas, Ψ_{SS^+} se développe au premier ordre en λ sous la forme

$$\Psi_{SS^+}(x x') = \Psi_{11} + \lambda \mathcal{H}(x x') \quad (5.2.7)$$

où

$$\mathcal{H}(x x') := i(\Psi_{H1} - \Psi_{1H}) = -i \text{Tr}\{[U(x), U(x')] H\}. \quad (5.2.8)$$

$\mathcal{H}(x x')$ a les propriétés suivantes:

$$\mathcal{H}(x x') = \mathcal{H}^*(x x'), \quad (a)$$

$$\mathcal{H}(x x') = \mathcal{H}(x' x), \quad (b) \quad (5.2.9)$$

$$\int \mathcal{H}(x x') d\tau = \int \mathcal{H}(x x') d\tau' = 0. \quad (c)$$

5.3. Equation du mouvement

Le mouvement est régi par une transformation unitaire U_t qui satisfait l'équation de Schroedinger (3.6)

$$dU_t/dt = -(i/\hbar) H U_t. \quad (5.3.1)$$

Si H est indépendant du temps, nous avons la solution formelle

$$U_t = \exp\{- (i/\hbar) H t\}$$

l'image de cet automorphisme sera $\Psi_{U_t U_t^+}(x x')$ que nous noterons

$$u_t(x x') = \text{Tr}(U(x) U_t U(x') U_t^+) \quad (5.3.2)$$

u_t est réelle et préserve la norme. C'est la quasi-probabilité de passer d'un point de l'espace de phase à un autre sous l'effet du mouvement. On peut calculer la dérivée de u_t relativement au temps à partir de (5.3.1). Le résultat s'exprime à partir des nota-

tions du paragraphe précédent

$$\partial u_t / \partial t = - (1/\hbar) \int \mathcal{H}(x \bar{x}) u_t(\bar{x} x') d\bar{x}. \quad (5.3.3)$$

Ce résultat peut-être utilisé pour développer une théorie de la diffusion sur l'espace de phase^{8,9} ou toute autre théorie de perturbations.

Les images des relations dynamiques (3.8) et (3.9) s'obtiennent facilement:

$$\begin{aligned} w_t(x) &= \int u_t(x \bar{x}) w_0(\bar{x}) d\bar{x}, \\ a_t(x) &= \int a_0(\bar{x}) u_t(\bar{x} x) d\bar{x}, \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

$$\begin{aligned} \dot{w}_t(x) &= (1/i\hbar) [h \circ w_t - w_t \circ h](x), \\ \dot{a}_t(x) &= (1/i\hbar) [a_t \circ h - h \circ a_t](x). \end{aligned} \quad (5.3.5)$$

Il est intéressant de calculer explicitement \dot{x}^μ à l'aide de (5.3.5) et (4.3.2). Le résultat est facile à calculer à cause de l'apparition de fonctions δ sous le signe intégral:

$$\dot{x}^\mu = A^{\mu\nu} \partial h / \partial x^\nu. \quad (5.3.6)$$

Ce résultat coïncide formellement avec l'équation (2.5).

5.4. Courant de probabilité

Dans le cadre de modèles, les physiciens sont souvent conduits à utiliser des potentiels non locaux. On rencontre alors la difficulté de donner l'expression du courant de probabilité. Le but de ce paragraphe est de mieux délimiter la difficulté.

Dans le cadre d'une interprétation naturelle du courant de probabilité au point q de l'espace on pose

$$j^k(q) = [1/(2\pi\hbar)^n] \int \dot{q}^k(qp) w(qp) d^n p. \quad (5.4.1)$$

En tenant compte de (5.3.6), on tire

$$\begin{aligned} j^k(q) &= \text{Tr}(J^k W), \\ J^k(q) &= \int d\bar{x} U(\bar{x}) \delta^n(q - \bar{q}) \partial h(\bar{x}) / \partial \bar{p}_k. \end{aligned} \quad (5.4.2)$$

L'expression du courant dépend explicitement de la fonction de Hamilton. Cette expression redonne bien la forme traditionnelle du courant pour une particule non relativiste dans un champ magnétique plongée dans un potentiel local.

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_0 - |\mathbf{q}\rangle (e/mc) \mathbf{A}(|\mathbf{q}\rangle), \quad (5.4.3)$$

$$\mathbf{J}_0 = \frac{2mi}{\hbar} [|\mathbf{q}\rangle (\nabla \langle \mathbf{q}|) - (\nabla |\mathbf{q}\rangle) \langle \mathbf{q}|].$$

L'expression (5.4.2) nous permet de contrôler l'équation de continuité. Introduisons l'opérateur de la densité de probabilité au point \mathbf{q} de l'espace:

$$D_{\bar{q}} = |\bar{q}\rangle \langle \bar{q}| \xrightarrow{\varphi} d_{\bar{q}} = \delta^n(q - \bar{q}). \quad (5.4.4)$$

De plus

$$J_{\bar{q}}^k = \int \frac{d^n \bar{p}}{(2\pi\hbar)^n} U(\bar{x}) \frac{\partial h(\bar{x})}{\partial \bar{p}} \xrightarrow{\varphi} j_{\bar{q}}^k = \nabla_p h d_{\bar{q}}. \quad (5.4.5)$$

Calculons $\text{div } \mathbf{j} + d$ dans l'espace de phase:

$$\begin{aligned} \nabla_{\bar{q}} j_{\bar{q}}^k &= \nabla_p h \nabla_{\bar{q}} d_{\bar{q}} = - \nabla_p h \nabla_q d_{\bar{q}} \\ d_{\bar{q}} &= (1/i\hbar) [d_{\bar{q}} \circ h - h \circ d_{\bar{q}}] \\ &= \{d_{\bar{q}}, h\}_P = \nabla_p h \nabla_q d_{\bar{q}}. \end{aligned}$$

L'égalité entre le crochet de Moyal et le crochet de Poisson utilisée ci-dessus est vraie si et seulement si h est de degré entier inférieur ou égal à 2. Dans ce cas, la probabilité habituelle satisfait l'équation de continuité avec l'opérateur (5.4.2) pour exprimer le courant.

Dans le cas de potentiels non locaux, il faut renoncer à l'équation de continuité ou redéfinir probabilité et courant.

6. Grandeurs classiques conservées liées à certaines symétries discrètes

Il est habituel d'omettre l'interprétation classique des nombres quantiques liés aux symétries discrètes. Weyl² pensait même que ces grandeurs n'ont pas d'analogue classique. Il est donc intéressant de se pencher sur cette question.

Nous nous limiterons à l'étude des transformations linéaires de l'espace de configuration qui sont racines de l'unité. (Parité, transposition de particules, etc.) Ces symétries sont définies par des opérateurs dont les éléments de matrices sont de la forme

$$\langle \bar{q} | S | q \rangle = \delta(q - \alpha \bar{q}). \quad (6.1)$$

Où α est une matrice orthogonale réelle de carré égal à 1:

$$\alpha \alpha^\sim = \alpha^\sim \alpha = \alpha^2 = \mathbf{1}. \quad (6.2)$$

On calcule sans peine l'image de S par φ au moyen des définitions (4.2.1) et (4.1.2)

$$\begin{aligned} S \xrightarrow{\varphi} s(x) &= \int d^n u \delta^n((1-\alpha)q + (1+\alpha)u/2) \\ &\quad \cdot \exp\{i p u / \hbar\}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Pour calculer plus avant, il faut faire usage des conditions (6.2) qui précisent que les matrices

$$P_{\pm} := \frac{1}{2} (\mathbf{1} \pm \alpha) \quad (6.4)$$

sont des projecteurs orthogonaux

$$P_{\pm}^2 = P_{\pm}, P_{\pm}^\sim = P_{\pm}, P_{+} + P_{-} = \mathbf{1}. \quad (6.5)$$

En introduisant cette notation

$$s(x) = \int d^n u \delta^n(2P_+ q - P - u) \exp\{i p u / \hbar\}.$$

En vertu de l'orthogonalité des projecteurs, la fonction δ ne contribue que si $P_+ q$ et $P_- u$ sont nuls séparément. Appelons n_{\pm} les *codimensions* des sous espaces D_{\pm} sur lesquels P_{\pm} projettent :

$$n_+ + n_- = n, \quad u_{\pm} = P_{\pm} u, \quad (6.6)$$

$$\begin{aligned} s(x) &= \delta^{n_+}(2P_- q) \int d^n u \delta^n(P_- u) \exp\{i p u / \hbar\} \\ &= \frac{1}{2^{n_+}} \delta^{n_+}(P_- q) \int \exp\{i p u_- / \hbar\} d^{n_+} u_- . \end{aligned} \quad (6.7)$$

Appliquons ce résultat à la parité II . Dans ce cas

$$\alpha = -1, \quad P_+ = 0, \quad P_- = 1, \quad n_+ = n, \quad n_- = 0, \quad (6.8)$$

$$\pi(x) = (\pi \hbar)^n \delta^{(n)}(q) \delta^{(n)}(p). \quad (6.9)$$

Ce résultat très simple s'interprète facilement :

La densité de quasi-probabilité de se trouver à l'origine de l'espace de phase est une constante du mouvement pour les systèmes invariants sous la parité. L'analogue classique de la parité relativement à un point est donc la probabilité de trouver le système en ce point avec l'impulsion nulle. Seuls les points d'équilibre (stable ou instable) donnent lieu à une probabilité constante.

Les valeurs propres de la parité valent ± 1 . Cela signifie que la répartition de quasi-probabilité doit satisfaire :

$$\pm 1 = \text{Tr}(II W) = (1/2^n) w_{\pm}(0). \quad (6.10)$$

La donnée de la parité impose la valeur de la quasi-probabilité en un point de l'espace de phase. On comprend ici qu'il est nécessaire d'admettre des valeurs négatives de $w(x)$ dans certains petits domaines de cet espace.

Appliquons maintenant le résultat (6.7) à l'échange II_{12} de deux coordonnées

$$\begin{aligned} \alpha &= \begin{pmatrix} 01 & 0 \\ 10 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} P_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 11 & 0 \\ 11 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} P_- = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ n_+ &= 1, \quad n_- = n - 1, \\ \pi_{12}(p, q) &= 2 \pi \hbar \delta(q^1 - q^2) \delta(p_1 - p_2). \end{aligned} \quad (6.11)$$

On peut interpréter (6.11) de façon analogue à (6.9). Si le système est symétrique vis à vis de l'échange de coordonnées, alors l'hyperplan $p_1 = p_2$, $q^1 = q^2$ est transformé en lui-même par le mouvement. La valeur de la quasi-probabilité intégrée sur cet hyper-plan doit valoir ± 1 s'il s'agit d'états propres de cette permutation. Ce résultat éclaire encore

une fois la nécessité d'admettre une quasi-probabilité que n'est pas définie positive, par exemple pour décrire des fermions.

Le signe de la quasi-probabilité doit être mis en relation avec les intégrales d'échanges. On conçoit que des effets dynamiques importants peuvent apparaître en relation avec la variation de l'énergie potentielle en fonction de l'impulsion due à la symétrie d'échange.

7. Section efficace et matrice S

L'expression de la section efficace à partir de la matrice S est bien connue. En revanche je n'en connais pas de démonstration à la fois simple et convaincante. Le formalisme indépendant du temps nécessite des manipulations douteuses de carré de distributions alors que celui des paquets d'ondes est compliqué et n'apprend rien.

Grâce au fait que le mouvement est libre dans la zone asymptotique, nous pouvons utiliser des images classiques dans cette zone. Nous y utiliserons la notion de détecteur dans l'espace de phase comme tout expérimentateur en possession d'un spectromètre!

7.1. Définition de la matrice S

En théorie de la diffusion, il faut séparer l'Hamiltonien en deux parties: L'énergie cinétique $H^{(0)}$ et l'interaction $H^{(1)}$ qui décroît suffisamment rapidement pour que les états asymptotiques tendent fortement vers les états gouvernés par H pour $t \rightarrow \pm \infty$.

$$H = H^{(0)} + H^{(1)}. \quad (7.1.1)$$

On construit les opérateurs d'évolution suivants :

$$U_t^0 = \exp\{- (i/\hbar) H^{(0)} t\}, \quad U_t = \exp\{- (i/\hbar) H t\}. \quad (7.1.2)$$

La matrice S est définie par la limite

$$S = \lim_{t \rightarrow \infty} U_t^{0+} U_{2t} U_t^{0+}. \quad (7.1.3)$$

Il convient d'assimiler la signification physique de l'expression précédente. U_t^{0+} fait reculer librement le système jusqu'au temps $-t$, U_{2t} fait avancer le système en présence d'interaction jusqu'au temps $+t$ et U_t^{0+} nous fait revenir au temps $t=0$. La matrice S compare donc deux situations au même instant $t=0$ qui évoluent sans interaction et dont l'une se situe avant et l'autre après le choc. La matrice S est unitaire et commute avec H^0 .

Pour tirer profit de l'intuition spatio-temporelle, considérons les automorphismes générés par U_t^0 , U_t et S dans l'espace de phase et appliquons les résultats du paragraphe 5.

$$u_t(x, x') = \Psi_{U_t U_t^+}(x, x') = \text{Tr}(U_t U(x) U_t^+ U(x')) \quad (7.1.4)$$

est la quasi-probabilité de sauter du point x au point x' sous l'effet du mouvement durant un temps t .

Spécifions maintenant notre problème et considérons la diffusion d'une particule par un objet (par exemple un potentiel) fixe. Cette situation est aussi celle de la diffusion de deux corps regardée dans le centre de masse. Dans ce cas

$$H^{(0)} = P^2/2m, U_t^0 = \exp\{- (i/\hbar) P^2 t/2m\} \quad (7.1.5)$$

et

$$u_t^0(x, x') = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \delta^3(\mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{p}t/m). \quad (7.1.6)$$

Ce résultat s'obtient sans difficulté par un calcul direct au moyen de la définition (4.1.2). Il est par ailleurs naturel vu le fait que les groupes de Lie, générés par les fonctions quadratiques en p et q , sont isomorphes en mécanique classique et quantique¹⁰.

Finalement

$$s(x, x') := \text{Tr}(S U(x) S^+ U(x')) \quad (7.1.7)$$

représente la quasi-probabilité de passer, sous l'effet de l'interaction, d'un point x de la trajectoire libre avant le choc, au point x' de la trajectoire libre après le choc.

Le noyau intégral $s(x, x')$ contient donc toute l'information concernant les mouvements libres avant et après le choc, y compris les temps de délai dus à l'interaction, ceci pour n'importe quelle situation initiale. Il faut insister sur la richesse de l'information contenue dans la matrice S , information bien plus considérable que simplement la donnée d'une section efficace.

7.2. Calcul de la section efficace

Choisissons une situation initiale pour laquelle la particule incidente se propage en direction z avec un paramètre d'impact \mathbf{b} perpendiculaire à l'axe z (Figure 1).

L'arrangement cible-détecteur définit un angle solide $d\Omega$ dans la direction duquel l'impulsion finale \mathbf{p}_f doit pointer. Ce détecteur n'enregistre pas le délai

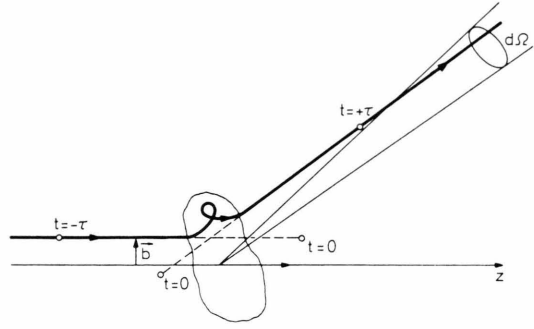


Fig. 1. Trajectoire classique dans un processus de diffusion. Le mouvement est précisé avant le choc par le paramètre d'impact b , après le choc par un détecteur symbolisé par l'angle solide $d\Omega$.

dû à l'interaction. Il n'est donc pas sensible à la position de la particule sur sa trajectoire. Vu les dimensions macroscopiques du système, il n'est pas sensible non plus au paramètre d'impact final. La probabilité d'atteindre le détecteur doit donc être intégrée sur tout l'espace d^3q_f . La section efficace différentielle sera alors la somme des quasi-probabilités d'avoir l'impulsion finale adéquate pour tous les paramètres d'impact possibles.

$$d\sigma = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^2b p_f^2 dp_f d\Omega d^3q_f \cdot s(\mathbf{p}_f \mathbf{q}_f, \mathbf{p}_i, \mathbf{b} + \mathbf{e}_3 z). \quad (7.2.1)$$

L'impulsion initiale est donc parallèle à l'axe z . Le facteur normalise l'espace de phase final. Cette expression est exacte, finie et définie positive. En introduisant la définition (7.1.7) de s à partir de la matrice S quantique et en remarquant que

$$\int d^3q_f U(x_f) = (2\pi\hbar)^3 |\mathbf{p}_f\rangle \langle \mathbf{p}_f| \quad (7.2.2)$$

on obtient en négligeant la variation de l'élément de matrice relativement à \mathbf{p}_f à l'intérieur du cône $d\Omega$:

$$d\sigma/d\Omega = \int d^2b p_f^2 dp_f \langle \mathbf{p}_f | S U(\mathbf{p}_i, \mathbf{b} + \mathbf{e}_3 z) S^+ | \mathbf{p}_f \rangle. \quad (7.2.3)$$

L'intégration sur d^2b introduit un facteur d'espace de phase $(2\pi\hbar)^2$ et un projecteur sur l'impulsion transversale nulle. En utilisant la définition

$$d\sigma/d\Omega = (2\pi\hbar)^2 \int p_f^2 dp_f du \cdot \exp\{-i z u/\hbar\} \langle (p_i - u/2) \mathbf{e}_3 | S^+ | \mathbf{p}_f \rangle \cdot \langle \mathbf{p}_f | S | (p_i + u/2) \mathbf{e}_3 \rangle \quad (7.2.4)$$

Cette formule est générale. La seule hypothèse réellement faite est que le mouvement libre est uniforme, qu'il conserve \mathbf{p} et qu'il va en direction de \mathbf{p} (masse positive).

On pose souvent :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_f | S | \mathbf{p}_i \rangle &= \langle \mathbf{p}_f | \mathbf{p}_i \rangle - 2\pi i \delta(E - E') \langle \mathbf{p}_f | T | \mathbf{p}_i \rangle \quad (7.2.5) \\ &= \langle \mathbf{p}_f | \mathbf{p}_i \rangle - 4\pi i m (p_i^2 - p_f^2) \langle \mathbf{p}_f | T | \mathbf{p}_i \rangle \\ &= \langle \mathbf{p}_f | \mathbf{p}_i \rangle - 2\pi i (m/p) \delta(p_i - p_f) \langle \mathbf{p}_f | T | \mathbf{p}_i \rangle. \end{aligned}$$

Sous cette forme, j'ai utilisé la relation cinétique non relativiste $E = p^2/2m$. Si \mathbf{p}_f n'est pas parallèle à \mathbf{p}_i , le terme $\langle \mathbf{p}_i | \mathbf{p}_f \rangle$ ne contribue pas. Il reste alors

$$1/\sigma/d\Omega = (2\pi)^4 \hbar^2 m^2 \int du dp_f |\langle \mathbf{p}_f | T | \mathbf{p}_i \rangle|^2 \exp\{-i z u/\hbar\} \cdot \delta(p_f - p_i - u/2) \delta(p_f - p_i + u/2).$$

L'intégration est immédiate et supprime la dépendance artificielle du point de départ z .

$$d\sigma/d\Omega = (2\pi)^4 \hbar^2 m^2 |\langle \mathbf{p}_f | T | \mathbf{p}_i \rangle|^2. \quad (7.2.6)$$

C'est bien le résultat traditionnel.

8. Conclusions

Le calcul quantique complet sur l'espace de phase est certainement possible mais se heurte à la difficulté de la définition compliquée du produit. Le

problème de la diagonalisation des opérateurs devient artificielle sur l'espace de phase. C'est une difficulté du même type qui intervient dans la caractérisation de la matrice densité ou dans celle du noyau intégral $\psi(x|x)$.

Néanmoins, en plus des approximations classiques que nous n'avons pas touchées ici, la puissance évocatrice du déroulement des processus physique dans l'espace de phase, peut être utilisée pleinement, à l'aide de l'isomorphisme de Weyl et Wigner. L'application à la théorie de la diffusion paraît particulièrement fructueuse par le fait que les dynamiques quantique et classique sont isomorphes pour les particules libres, c'est-à-dire dans le domaine asymptotique. La formule de la section efficace obtenue ici dans ce formalisme est un exemple de cette fécondité.

Remerciements

Je remercie W. Kundt qui m'a rendu attentif à l'existence de l'isomorphisme de Weyl et Wigner et avec qui j'ai eu plusieurs discussions éclairantes.

¹ K. Bleuler, Jahrbuch 1965, p. 73, Westdeutscher Verlag, Köln und Opladen. — M. Andrié et K. Bleuler, Commentationes Physico-Mathematicae **34**, 147, 165 [1969]; **36**, 43 [1969].

² H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Traduction anglaise, New York—Dover 1950.

³ E. P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 [1932].

⁴ G. A. Baker, Phys. Rev. **109**, 2198 [1958]. — W. Kundt, Canonical Quantization of Gauge Invariant Field Theories, Springer Tracts in Modern Physics **40**, 107 [1966].

⁵ J. E. Moyal, Proc. Cambridge Phil. Soc. **45**, 99 [1949].

⁶ C. L. Mehta, J. Math. Phys. **5**, 677 [1964].

⁷ T. F. Jordan et E. C. G. Sudarshan, Rev. Mod. Phys. **33**, 515 [1961].

⁸ H. Mori, I. Oppenheim et J. Ross dans Studies in Statistical Mechanics, J. de Boer et G. E. Uhlenbeck Editeurs, North-Holland Publishing Company, Amsterdam 1962.

⁹ K. Imre, E. Özizmir, M. Rosenbaum et P. F. Zweifel, J. Math. Phys. **8**, 1097 [1967]. — G. C. Summerfield et P. F. Zweifel, J. Math. Phys. **10**, 233 [1969].

¹⁰ J. P. Amiet, Nuovo Cim. **29**, 69 [1963].