

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

Charles-Michel Marle
Université Pierre et Marie Curie
Paris, France

Octobre 2003

Résumé

Après un rappel des origines de la Mécanique quantique, nous indiquons comment l'interprétation des prévisions de cette théorie et le processus de mesure, en mettant en jeu à la fois des systèmes classiques et des systèmes quantiques, rendent nécessaire l'emploi d'un procédé de quantification (c'est-à-dire d'une méthode permettant d'associer, à chaque système classique, un système quantique). Nous présentons brièvement le procédé de quantification utilisé dès l'origine, la *quantification canonique formelle*. Ce procédé, satisfaisant lorsqu'on l'applique à des systèmes assez simples, conduit à des difficultés et des ambiguïtés dans les cas plus complexes. La *quantification géométrique*, due essentiellement à B. Kostant [6] et J.-M. Souriau [11] est une des approches envisagées pour construire un procédé de quantification sur des bases mathématiques rigoureuses. La présentation que nous ferons de cette théorie est destinée à servir d'introduction aux exposés plus approfondis qu'en feront ses créateurs, les Professeurs B. Kostant et J.-M. Souriau.

1 Origines de la mécanique quantique

Vers la fin du XIX^{ème} siècle, on pensait que l'évolution des systèmes physiques pouvait être décrite dans le cadre de la mécanique classique. Cependant, certains faits restaient mal compris. Ils allaient conduire à remettre en question cette croyance, et à modifier en profondeur les concepts de base de la physique.

1.1 La révolution relativiste

Pour I. Newton l'espace, comme le temps, avait un caractère absolu ; un objet matériel était dit *au repos* si sa place, dans cet espace absolu, ne dépendait pas du temps, et *en mouvement* dans le cas contraire. Les notions de mouvement et de repos avaient donc un caractère absolu.

Vers la fin du XIX^{ème} siècle, on savait que les lois de la mécanique s'expriment par les mêmes équations dans tout repère galiléen, que ce repère soit fixe par rapport à l'espace absolu, ou en translation uniforme par rapport à cet espace. On savait donc qu'aucune mesure mettant en jeu des phénomènes mécaniques ne permet de voir si un repère galiléen est fixe ou en translation uniforme dans l'espace absolu. Les progrès de l'astronomie ayant montré que les étoiles lointaines, autrefois considérées comme fixes, sont en mouvement les unes par rapport aux autres, on en était venu à douter de l'existence d'un espace absolu, et à admettre que parmi les repères galiléens, aucun n'est privilégié par rapport aux autres.

Cependant, les lois de l'électromagnétisme, découvertes par J.C. Maxwell (1864), s'expriment par des équations dont la forme n'est pas invariante par changement de repère galiléen (du moins lorsqu'on utilise, pour ces changements de repère, les formules de transformation usuelles en mécanique classique) : la propagation d'ondes décrite par ces équations se fait de manière isotrope (avec la même vitesse dans toutes les directions) uniquement par rapport à certains repères privilégiés, ceux qui sont fixes par rapport à l'hypothétique milieu (appelé *éther*) qui leur sert de support. L'espace absolu postulé par Newton, dont les mécaniciens avaient eu tant de mal à se débarrasser, ressurgissait ! Il semblait donc possible de mettre en évidence expérimentalement, au moyen de mesures mettant en jeu des ondes électromagnétiques, le mouvement d'un repère quelconque (par exemple lié à la Terre) par rapport à l'éther.

Les expériences faites par A.A. Michelson et E.W. Morley vers 1880 n'ont pas permis de mettre en évidence ce mouvement. H.A. Lorentz (1904) et H. Poincaré (1905) ont alors découvert l'invariance des équations de Maxwell par un groupe de transformations autre que le groupe de Galilée. Ce groupe, que Poincaré a appelé *groupe de Lorentz*, est formé de transformations affectant non seulement les coordonnées d'espace, mais aussi la coordonnée "temps". A. Einstein (1905) a clairement vu que le concept de temps absolu devait être abandonné, tout comme celui d'espace absolu, et a jeté les bases de la théorie de la Relativité.

La révolution relativiste a modifié en profondeur les concepts de base (temps et espace) utilisés pour la description du monde physique. Mais c'est d'une autre révolution, tout aussi importante, dont nous allons parler dans

la suite de cet exposé.

1.2 La révolution quantique

En appliquant les principes de la mécanique statistique classique au rayonnement du corps noir, J.W.S. Rayleigh a établi, vers 1900, des formules donnant la densité d'énergie rayonnée, à une température donnée, en fonction de la fréquence. Ces formules sont en bon accord avec l'expérience pour les plus petites fréquences, mais non pour les plus grandes. De plus, elles conduisent à une densité totale d'énergie infinie [8]. A l'inverse, en raisonnant toujours dans le cadre de la mécanique statistique classique, W. Wien a établi (1896) une formule donnant la densité d'énergie rayonnée en fonction de la température et de la fréquence correcte pour les hautes fréquences, mais non pour les plus petites. Une hypothèse nouvelle, tout à fait révolutionnaire, fut proposée par M. Planck en 1900 : pour chaque fréquence ν , la valeur de l'énergie du rayonnement de fréquence ν ne peut être qu'un multiple entier de $h\nu$ (h étant une constante universelle aujourd'hui appelée constante de Planck). Cette hypothèse nouvelle lui permit d'établir une formule donnant la densité d'énergie rayonnée en fonction de la température et de la fréquence, conduisant à une densité d'énergie totale finie, en excellent accord avec l'expérience pour toutes les fréquences.

L'idée de M. Planck, selon laquelle certaines grandeurs physiques ne peuvent varier que par *quanta*, de manière discrète, allait être appliquée avec succès à bien d'autres phénomènes physiques. Par exemple, une formule, découverte par P.L. Dulong et A.T. Petit (1819), permettait le calcul de la chaleur spécifique des solides. Cette formule donnait des résultats satisfaisants aux températures élevées, mais manquait de précision aux températures plus basses. L'emploi de règles de quantification a conduit à une formule modifiée en bien meilleur accord avec l'expérience à toutes températures (A. Einstein et P. Debye, 1906). Autre succès de la quantification : A. Einstein montre (1905) qu'elle fournit une explication satisfaisante de l'effet photoélectrique, découvert en 1902 par J.J. Thomson et P. Lenard.

Grâce à de délicates expériences, E. Rutherford découvre, en 1911, la structure de l'atome : un noyau doté d'une charge électrique positive, autour duquel gravitent des électrons chargés négativement. La découverte de l'électron, la mesure de sa masse et de sa charge, sont dues à J.J. Thomson (1897). La découverte de Rutherford soulève de nouvelles questions : pourquoi, dans un atome, les charges en mouvement ne perdent-elles pas leur énergie en émettant un rayonnement ? Et comment expliquer les spectres d'émission des atomes ?

En 1913, N. Bohr montre que l'idée, initialement due à M. Planck, de "quantifier" les échanges d'énergie, permet de répondre à ces questions. Il admet que dans l'atome d'hydrogène, l'électron gravite autour du noyau en étant soumis aux forces électrostatiques, selon les lois de la Mécanique classique, sans rayonner, en gardant une énergie constante. Il admet aussi :

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

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

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

2 Principes de la Mécanique quantique

Malgré ces succès, l'emploi de "règles de quantification" dans le cadre de la Mécanique classique restait peu satisfaisant. En 1925, indépendamment l'un de l'autre, W. Heisenberg et E. Schrödinger ont formulé deux théories quantiques plus systématiques, en apparence différentes mais qui se sont révélées équivalentes. Sur cette base, grâce aux efforts de ces deux savants, de P. Dirac, J. von Neumann, N. Bohr, M. Born et d'autres, une nouvelle Mécanique a été créée : la *Mécanique quantique* [3, 4, 7].

Cette nouvelle Mécanique

- admet la Mécanique classique comme cas limite, pour les systèmes de grande dimension et de grande masse,
- conduit à des règles de quantification précises, non imposées *a priori*, mais conséquences de la théorie,
- "explique" pourquoi la matière et le rayonnement électromagnétique peuvent, ainsi que l'avait découvert L. de Broglie (1924) se comporter tantôt comme des particules et tantôt comme des ondes.

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

2.1 Etats et observables classiques et quantiques

2.1.1 Mécanique classique

En Mécanique classique, on utilise, pour représenter un système, un *espace des phases* qui est une variété symplectique (M, ω) . Un *état* du système est représenté par un point z de l'espace des phases. Une *observable* est une fonction f , à valeurs réelles, définie sur l'espace des phases. La valeur prise par l'observable f lorsque l'état du système est le point z est tout simplement $f(z)$. L'évolution de l'état du système au cours du temps obéit à une équation différentielle, l'*équation de Hamilton*, entièrement déterminée par la donnée d'une observable particulière E , le *hamiltonien classique* ou *énergie* du système. Plus précisément, la structure symplectique de l'espace des phases permet d'associer au hamiltonien classique E un champ de vecteurs X_E sur M , appelé *champ hamiltonien associé à E* , défini par

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

L'équation différentielle de Hamilton s'écrit alors

$$\frac{dz(t)}{dt} = X_E(z(t)).$$

En coordonnées locales canoniques $(x^1, \dots, x^n, p_1, \dots, p_n)$, telles que la forme symplectique ω ait pour expression locale

$$\omega = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dx^i,$$

l'équation de Hamilton s'explique selon

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

Soit $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ une observable classique, et $t \mapsto z(t) = (x^i(t), p_i(t))$ une solution de l'équation de Hamilton. La dérivée par rapport au temps de la valeur $f(z(t))$ de l'observable f , lorsque l'état $z(t)$ du système varie en obéissant à l'équation différentielle de Hamilton, est

$$\frac{df(z(t))}{dt} = \langle df, X_E \rangle(z(t)) = \{E, f\}(z(t)), \quad (*)$$

où nous avons noté $\{E, f\}$ le crochet de Poisson des observables E et f . Rappelons qu'en coordonnées locales canoniques, le crochet de Poisson a pour expression

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

Afin de faciliter la comparaison de l'équation d'évolution d'une observable classique (*) avec l'équation d'évolution d'une observable quantique établie plus loin, nous allons mettre cette équation sous une forme plus commode, en faisant intervenir le *flot réduit* Φ_t du champ de vecteurs X_E . Nous pouvons alors écrire

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

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

2.1.2 Mécanique statistique classique

Afin de décrire des systèmes dont l'état, à un instant donné, n'est pas connu avec une précision parfaite, les physiciens ont été amenés à développer la *Mécanique statistique classique*. Cette théorie utilise le même espace des phases que la Mécanique classique ; mais un *état* du système est maintenant une mesure de probabilité μ sur l'espace des phases. Lorsque cette mesure est une mesure de Dirac δ_z , concentrée en un point z de l'espace des phases, on retrouve comme cas particulier la situation considérée en Mécanique classique. Une *observable* est, comme précédemment, une fonction f , à valeurs réelles, définie sur l'espace des phases. La valeur prise par l'observable f lorsque l'état du système est la mesure de probabilité μ est une variable aléatoire réelle dont la loi de probabilité est la mesure image $f_*\mu$. L'évolution de l'état du système au cours du temps est, comme précédemment, décrite par l'équation différentielle de Hamilton, entièrement déterminée par la donnée du hamiltonien classique (ou énergie) du système.

2.1.3 Mécanique quantique

En Mécanique quantique, comme en Mécanique classique, on utilise encore les notions d'*état* et d'*observable*. Comme en Mécanique statistique classique, lorsque le système est dans un état donné, la valeur prise par une observable est encore une variable aléatoire. Mais sa loi de probabilité n'est plus la mesure image, par une fonction représentant l'observable définie sur un espace des phases, d'une mesure représentant l'état du système. Alors qu'en Mécanique classique l'ingrédient de base est une variété symplectique (l'espace des phases), en Mécanique quantique cet ingrédient de base est un *espace de Hilbert complexe* \mathcal{H} . Un *état pur* du système est un sous-espace vectoriel de dimension 1 de \mathcal{H} ; un *représentant* de cet état est un élément non nul Ψ de ce sous-espace vectoriel, qu'on peut toujours choisir de norme 1. Une *observable* est un opérateur auto-adjoint A , pas nécessairement borné, sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} .

Le *théorème spectral* ([9], chapitre VIII) permet d'associer à chaque opérateur auto-adjoint A sur \mathcal{H} une *mesure à valeurs projections* P^A sur la tribu de Borel de \mathbb{R} qui associe, à chaque partie borélienne B de \mathbb{R} , un opérateur de projection dans \mathcal{H} noté P_B^A .

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

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

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

L'évolution de l'état du système au cours du temps est déterminée par la donnée d'un opérateur autoadjoint H , le *hamiltonien quantique* du système. Deux schémas équivalents (qui, du point de vue historique, correspondent aux deux versions de la théorie quantique découvertes, respectivement, par Schrödinger et par Heisenberg) peuvent être utilisés pour décrire cette évolution : le *schéma de Schrödinger* et le *schéma de Heisenberg*.

Dans le *schéma de Schrödinger*, l'élément de \mathcal{H} qui représente l'état du système, noté Ψ_t , dépend du temps t , tandis que les observables qui représentent les diverses propriétés physiques du système sont indépendants du temps. La valeur de Ψ_t est donnée par la formule

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

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

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

Dans le *schéma de Heisenberg*, l'état du système est représenté par un élément fixe Ψ_0 de \mathcal{H} , ne dépendant pas du temps, tandis que les observables correspondant aux grandeurs physiques du système dépendent du temps. Si A_0 est l'opérateur autoadjoint représentant une grandeur physique donnée à l'instant 0, l'opérateur qui représente cette même grandeur physique à l'instant t est

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

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

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

3 Quantification d'un système classique

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

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

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

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

3.1 La quantification canonique formelle

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

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

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

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

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

– à l'observable classique x^i l'opérateur

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

– à l'observable classique p_i l'opérateur

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

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

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

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

$$E = \hbar H.$$

Les applications de la quantification canonique formelle à des systèmes physiques ont conduit à de nombreux succès. Cependant, on peut se poser, à propos de ce procédé, diverses questions [8]. Par exemple :

- Pourquoi employer des coordonnées cartésiennes orthonormées, plutôt que des coordonnées curvilignes plus générales? Peut-on mettre le procédé de quantification canonique formelle sous une forme plus intrinsèque?
- Comment trouver l'expression de l'énergie quantique dans des cas plus généraux, par exemple lorsque l'énergie classique comporte des termes de la forme $p_i x^i$? Si l'on transforme ces termes en remplaçant p_i par l'opérateur P_i et x^i par l'opérateur de multiplication par x^i , dans quel ordre doit-on placer ces deux opérateurs, qui ne commutent pas?

La théorie de la *quantification géométrique* tente de répondre à ces questions.

3.2 La quantification géométrique

La théorie de la *quantification géométrique* a été développée principalement par B. Kostant [6] et J.-M. Souriau [11], pour des motivations autant mathématiques que physiques. On distingue en général deux étapes.

Première étape : la *préquantification*. Une variété symplectique (M, ω) étant donnée, cette étape consiste à construire un espace fibré (appelé *fibré préquantique*) ayant pour base la variété M , et à associer à chaque fonction différentiable sur M un opérateur sur l'espace des sections du fibré ainsi construit. Lorsqu'on munit l'espace des fonctions différentiables sur M du crochet de Poisson, et l'espace des sections du fibré préquantique d'une loi de composition convenable, cette correspondance est un homomorphisme d'algèbres de Lie. Cette construction n'est possible que lorsque la variété symplectique (M, ω) vérifie certaines conditions, qui seront précisées plus loin ; on dit alors que (M, ω) est *préquantifiable*.

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

3.2.1 La préquantification

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

B. Kostant [6] étudie l'existence d'un *fibré en droites complexes* $\pi : L \rightarrow M$ de base M , muni d'une *structure hermitienne* $(u, v) \mapsto \langle u|v \rangle$ et d'une *connexion* pour laquelle cette structure hermitienne est invariante, dont la courbure est égale à ω .

J.-M. Souriau [11] étudie l'existence d'un *fibré en cercles* $\varpi : U \rightarrow M$, de base M , et d'une *1-forme de contact* α sur U telle que $d\alpha = \varpi^*\omega$.

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

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

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

B. Kostant et J.-M. Souriau montrent que le problème qu'ils étudient (existence d'un fibré en droites complexes, ou d'un fibré en cercles, vérifiant

les propriétés indiquées) a une solution si et seulement si la *classe de cohomologie* $[\omega]$ de la forme symplectique ω est *entière*. Ce théorème est attribué à A. Weil par B. Kostant ([6] p. 133) ainsi que par D.J. Simms et N.M. Woodhouse ([10] p. 36). Lorsque cette condition est satisfaite, on dit que (M, ω) est *préquantifiable*.

B. Kostant et J.-M. Souriau montrent que si (M, ω) est préquantifiable, l'ensemble des classes d'isomorphisme de fibrés solutions du problème est un espace homogène principal du groupe $\Pi_1^*(M)$ (groupe des caractères du groupe fondamental $\Pi_1(M)$).

Supposons donc (M, ω) préquantifiable. Une fois choisi un fibré en droites complexes $\pi : L \rightarrow M$, muni d'une connexion et d'une structure hermitienne ayant les propriétés voulues, on peut associer, à chaque fonction $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$, un unique champ de vecteurs $\eta(f)$ sur L^* , déterminé par les deux propriétés :

- le champ de vecteurs $\eta(f)$ sur L^* est projetable par $\pi|_{L^*}$ sur M , et a pour projection le champ de vecteurs hamiltonien X_f associé à la fonction f , ce qui s'exprime par

$$(\pi|_{L^*})_*(\eta(f)) = X_f, \quad \text{avec} \quad i(X_f)\omega = -df;$$

- en notant α la 1-forme de connexion sur L^* , le champ de vecteurs $\eta(f)$ vérifie

$$i(\eta(f))\alpha = f \circ \pi|_{L^*}.$$

On vérifie que pour toute fonction $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$, le champ de vecteurs $\eta(f)$ a les propriétés suivantes :

- il est invariant par l'action de $\mathbb{C}^* = \mathbb{C} - \{0\}$ sur L^* par multiplication ;
- il vérifie

$$\mathcal{L}(\eta(f))\alpha = 0;$$

- si nous notons $P : L^* \rightarrow \mathbb{R}$ la fonction “carré de la norme”, $P(u) = \langle u|u \rangle$, le champ de vecteurs $\eta(f)$ vérifie

$$\mathcal{L}(\eta(f))P = 0.$$

Ces trois propriétés expriment le fait que pour tout $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$, $\eta(f)$ est un automorphisme infinitésimal de L^* considéré comme \mathbb{C}^* -fibré principal muni de la connexion de 1-forme α et de la structure hermitienne invariante $(u, v) \mapsto \langle u|v \rangle$.

On remarque de plus que le champ de vecteurs $\eta(f)$ est tangent à l'espace total du fibré en cercles $\varpi : U \rightarrow M$, identifié à l'ensemble des éléments u de L tels que $\langle u|u \rangle = 1$. Dans le formalisme de Souriau $\eta(f)$, considéré

comme champ de vecteurs sur la variété U munie de la 1-forme de contact α , n'est autre que le champ de vecteurs hamiltonien ayant pour hamiltonien de contact la fonction $f \circ \varpi$.

L'application $f \mapsto \eta(f)$ est linéaire, injective, définie sur $C^\infty(M, \mathbb{R})$ et à valeurs dans l'espace des automorphismes infinitésimaux de L^* si on se place dans le formalisme de Kostant, ou dans celui des automorphismes infinitésimaux de contact de U si on se place dans le formalisme de Souriau.

À toute fonction $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$, on a donc associé le champ de vecteurs $\eta(f)$; mais on peut aussi faire correspondre à $\eta(f)$ un opérateur $\delta(f)$ agissant sur l'espace des sections différentiables du fibré $\pi : L \rightarrow M$. Pour cela, nous remarquons qu'à une section s de ce fibré, on peut associer la fonction $\tilde{s} : L^* \rightarrow \mathbb{C}$ telle que, pour tout $l \in L^*$,

$$s(\pi(l)) = (\tilde{s}(l))l,$$

ce qu'on écrit aussi, avec un léger abus d'écriture,

$$\tilde{s}(l) = \frac{s(\pi(l))}{l}, \quad l \in L^*.$$

L'application $s \mapsto \tilde{s}$ est injective et a pour image l'ensemble des fonctions complexes $\varphi : L^* \rightarrow \mathbb{C}$ homogènes de degré -1 , ce qui signifie qu'elles vérifient, pour tout $l \in L^*$ et tout $z \in \mathbb{C}^*$,

$$\varphi(zl) = \frac{\varphi(l)}{z}.$$

Soit alors $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$, s une section différentiable de (L, π, M) et $\tilde{s} : L^* \rightarrow \mathbb{C}$ la fonction associée à s . La dérivée de Lie $\mathcal{L}(\eta(f))\tilde{s}$ est une fonction sur L^* homogène de degré -1 . Il existe donc une unique section de (L, π, M) , que nous noterons $\delta(f)s$, telle que $\mathcal{L}(\eta(f))\tilde{s}$ soit la fonction sur L^* qui lui est associée. Nous avons ainsi associé, à toute fonction $f \in C^\infty(M, \mathbb{R})$, un opérateur $\delta(f)$ sur l'espace des sections différentiables de (L, π, M) . Cet opérateur peut s'exprimer au moyen de la dérivée covariante; le calcul montre qu'il a pour expression

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

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

Dans le formalisme de Souriau, $\delta(f)$ opère sur l'espace des fonctions définies sur l'espace total U du fibré en cercles, à valeurs complexes, qui sont les restrictions à U (identifié à l'espace des éléments u de L^* de norme

1, c'est-à-dire vérifiant $\langle u|u \rangle = 1$) de fonctions homogènes de degré -1 sur L^* .

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

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

La variété symplectique (M, ω) , de dimension $2n$, est munie d'une forme élément de volume ω^n , naturellement associée à sa forme symplectique ω . En utilisant cette forme, on peut munir l'espace des sections différentiables et à support compact du fibré L d'une structure préhilbertienne, en posant

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_M \langle \varphi(z) | \psi(z) \rangle d\omega^n(z),$$

puis considérer l'espace de Hilbert obtenu en le complétant.

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

3.2.2 Applications physiques de la préquantification

Espace des phases et variété des mouvements Supposons qu'on ait un système mécanique classique ayant pour espace des phases une variété symplectique (M, ω) , dont l'énergie $E \in C^\infty(M, \mathbb{R})$ ne dépend pas du temps. Le plus souvent, la variété symplectique M est le fibré cotangent T^*N à la variété de configuration N du système. Muni de sa forme symplectique canonique, T^*N est préquantifiable (puisque sa forme symplectique est exacte, donc de classe de cohomologie nulle). On peut lui appliquer la construction décrite dans le paragraphe précédent.

Cependant il est de beaucoup préférable d'utiliser pour base du fibré préquantique, comme le propose J.-M. Souriau [11], non pas l'espace des phases du système classique, mais sa *variété des mouvements*. C'est l'ensemble des solutions de l'équation de Hamilton, pour toutes les données de Cauchy possibles. Ainsi que l'a montré Souriau, cet ensemble est bien muni d'une structure de variété différentiable (pas toujours séparée) et d'une structure symplectique. En appliquant le théorème de Cauchy-Lipschitz, on

montre aisément que chaque point de cette variété possède un voisinage difféomorphe, par un difféomorphisme symplectique, à l'espace des phases du système. L'emploi de la variété des mouvements permet de mettre en évidence l'action du groupe des translations temporelles et, pour les systèmes autonomes classiques (non relativistes), l'action du groupe de Galilée.

Bosons et fermions De nombreux systèmes classiques, notamment ceux qui représentent une particule élémentaire libre (avec ou sans spin) ont pour variété des mouvements une variété simplement connexe, dont le groupe fondamental est trivial. Lorsqu'elles sont préquantifiables, ces variétés des mouvements le sont de manière unique, à un isomorphisme près. Il n'en est pas de même des systèmes classiques représentant un nombre $N > 1$ de particules indiscernables sans interaction. Le groupe fondamental de la variété des mouvements d'un tel système s'identifie au groupe symétrique \mathcal{S}_N des permutations d'un ensemble à N éléments, et le groupe des caractères correspondant a exactement deux éléments : le caractère trivial (constant égal à 1) et le caractère qui associe à chaque permutation 1 ou -1 selon que cette permutation est le produit d'un nombre pair ou d'un nombre impair de transpositions. Lorsqu'elle est préquantifiable, une telle variété des mouvements possède exactement deux préquantifications distinctes, non équivalentes [11] qui, du point de vue physique, correspondent aux quantifications de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac, respectivement. Les particules correspondantes sont appelées dans le premier cas des *bosons*, et dans le second des *fermions*.

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

3.2.3 Limites de la préquantification

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

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

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

au moyen de la préquantification n'est pas irréductible.

3.2.4 La quantification

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

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

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

Pour définir une loi de composition sur l'espace des sections à support compact du fibré préquantique réduit, on ne peut plus utiliser, comme ci-dessus, l'intégration relativement à la forme élément de volume ω^n sur M . En effet, une section à support compact du fibré préquantique réduit s'identifie à une section du fibré préquantique de base M , covariante constante le long des feuilles de la polarisation; une telle section n'est en général plus à support compact. C'est donc sur la variété N , et non sur M , que l'on doit intégrer. Comme la variété N n'est pas munie d'une forme élément de volume naturelle, on est conduit à considérer le produit tensoriel du fibré préquantique réduit et du fibré des demi-densités sur N . L'espace des sections à support compact de ce produit tensoriel possède une structure préhilbertienne naturelle. Par complétion, on obtient un espace de Hilbert. La correspondance δ devient alors une représentation d'une sous-algèbre de l'algèbre de Lie $C^\infty(M, \mathbb{R})$ dans cet espace de Hilbert. Il reste à s'assurer que cette représentation est irréductible.

Appliquée à \mathbb{R}^{2n} avec la polarisation verticale (dont les feuilles sont les sous-variétés $x^j = \text{Constante}$, $1 \leq j \leq n$), cette méthode permet de retrouver les formules données par la quantification canonique formelle pour les opérateurs correspondant aux x^j et p_j .

Malheureusement, les fonctions f telles que $\delta(f)$ soit compatible avec

la polarisation verticale sont les polynômes de degré au plus 1 en les p_j , à coefficients fonctions de x^1, \dots, x^n . Les hamiltoniens usuels sont, pour la plupart, quadratiques en les p_j , donc ne peuvent pas être quantifiés par ce procédé!

On est donc conduit à transporter la polarisation au moyen du flot des champs de vecteurs $\delta(f)$. On doit alors définir des isomorphismes entre les espaces de Hilbert construits avec deux polarisations différentes, dont une au moins varie au cours du temps. Pour la variété \mathbb{R}^{2n} (coordonnées $x^j, p_j, 1 \leq j \leq n$) munie de sa forme symplectique naturelle et de ses deux polarisations verticale (dont les feuilles sont les sous-espaces $x^j = \text{constante}$) et horizontale (dont les feuilles sont les sous-espaces $p_j = \text{constante}$), cet isomorphisme n'est autre que la transformation de Fourier. A la traversée des valeurs du temps t pour lesquelles les deux polarisations considérées ne sont pas transverses, des ambiguïtés apparaissent dans les formules définissant cet isomorphisme. Pour s'en affranchir, on doit alors remplacer les demi-densités par des *demi-formes*. Le lecteur trouvera un exposé complet de ces questions dans les ouvrages [1, 2, 10, 12].

3.3 Quantification géométrique et groupes de symétrie

Soit (M, ω) une variété symplectique, G un groupe de Lie et $\Phi : G \times M \rightarrow M$ une action à gauche du groupe de Lie G sur la variété M . Pour tout $g \in G$, on note $\Phi_g : M \rightarrow M$ le difféomorphisme $z \mapsto \Phi_g(z) = \Phi(g, z)$. Soit \mathcal{G} l'algèbre de Lie du groupe G . Pour tout élément X de \mathcal{G} , on appelle *champ fondamental associé à X* et on note X_M le champ de vecteurs sur M défini par

$$X_M(z) = \left. \frac{d}{dt} \Phi(\exp(-tX), z) \right|_{t=0}, \quad z \in M.$$

On rappelle que l'application $X \mapsto X_M$ est un homomorphisme d'algèbres de Lie.

L'action Φ est dite *symplectique* si, pour tout $g \in G$, Φ_g est un difféomorphisme symplectique, c'est-à-dire vérifie

$$\Phi_g^* \omega = \omega.$$

Elle est dite *hamiltonienne* si elle est symplectique et si en outre, pour tout $X \in \mathcal{G}$, le champ de vecteurs X_M est hamiltonien. Lorsque c'est le cas, il existe une application $J : M \rightarrow \mathcal{G}^*$, à valeurs dans le dual \mathcal{G}^* de \mathcal{G} , telle que, pour tout $X \in \mathcal{G}$, le champ fondamental X_M admette pour hamiltonien la fonction $\langle J, X \rangle : M \rightarrow \mathbb{R}, z \mapsto \langle J(z), X \rangle$. On a alors, pour tout $X \in \mathcal{G}$,

$$i(X_M)\omega = -d\langle J, X \rangle.$$

On dit que J , qui est déterminée à addition d'une application localement constante de M dans \mathcal{G}^* près, est une *application moment* pour l'action hamiltonienne Φ . Lorsqu'en utilisant le fait qu'elle n'est déterminée qu'à addition d'une application localement constante près, on peut choisir cette application de manière telle que $X \mapsto \langle J, X \rangle$ soit un homomorphisme d'algèbres de Lie (de l'algèbre de Lie \mathcal{G} dans l'algèbre de Lie $C^\infty(M, \mathbb{R})$ munie du crochet de Poisson pour loi de composition), on dit que l'action Φ est *fortement hamiltonienne*.

Supposons donc que le groupe de Lie G agisse, par une action fortement hamiltonienne Φ , sur la variété symplectique (M, ω) , et que le moment $J : M \rightarrow \mathcal{G}^*$ de cette action soit choisi de manière telle que l'application $X \mapsto \langle J, X \rangle$ soit un homomorphisme de l'algèbre de Lie \mathcal{G} dans l'algèbre de Lie $C^\infty(M, \mathbb{R})$ (munie du crochet de Poisson pour loi de composition). Supposons, de plus, que la variété symplectique (M, ω) soit préquantifiable et soit $\pi : L \rightarrow M$ un fibré préquantique ayant pour base cette variété. A chaque élément X de \mathcal{G} , on fait correspondre l'observable classique $\langle J, X \rangle$, puis le champ de vecteurs $\eta(\langle J, X \rangle)$ sur L^* , et aussi l'opérateur $\delta(\langle J, X \rangle)$ sur l'espace des sections de $\pi : L \rightarrow M$. On montre aisément que les champs de vecteurs $\eta(\langle J, X \rangle)$ sont complets; en les intégrant, on obtient une action $\Psi : G \times L^* \rightarrow L^*$ du groupe de Lie G sur L^* , telle que la projection $\pi|_{L^*}$ soit équivariante (relativement aux actions Ψ et Φ du groupe G , respectivement sur L^* et sur M). De même, δ s'intègre en une représentation unitaire du groupe G dans l'espace des sections de carré intégrable de $\pi : L \rightarrow M$. Cette représentation n'est en général pas irréductible, mais en utilisant une polarisation convenable, on peut souvent en extraire des représentations unitaires irréductibles du groupe G . Pour cette raison, la quantification géométrique joue un rôle très important dans la théorie des représentations. Ces aspects de la théorie ont été particulièrement développés par B. Kostant.

Lorsque l'action du groupe G sur (M, ω) est hamiltonienne, mais pas fortement hamiltonienne, on peut encore appliquer les constructions décrites ci-dessus en remplaçant le groupe G par une de ses extensions centrales.

Lorsque l'action du groupe G sur M est transitive et que la variété M est connexe, on montre aisément que l'application moment J a pour image une orbite coadjointe \mathcal{O} du groupe G et que de plus $J : M \rightarrow \mathcal{O}$ est une application de revêtement. On sait aussi [5, 6, 11] que l'orbite \mathcal{O} possède une structure symplectique naturelle et que le moment J est une application symplectique de M sur \mathcal{O} . Ce résultat, qui montre que tout espace homogène fortement hamiltonien d'un groupe de Lie G est un revêtement d'une orbite coadjointe de G , a été utilisé, notamment par J.-M. Souriau [11] pour construire des modèles, classiques et quantiques, de divers systèmes

mécaniques, et notamment de particules élémentaires. Il permet même de traiter non seulement les particules “classiques”, non relativistes (le groupe G étant alors le groupe de Galilée) mais aussi les particules relativistes (ce groupe étant alors le groupe de Poincaré). De manière très remarquable, cette construction permet d’obtenir des modèles quantiques des particules réellement observées, avec leurs grandeurs caractéristiques (masse et spin et, dans le cas des particules de masse nulle, hélicité).

Références

- [1] S. Bates and A. Weinstein, *Lectures on Geometric Quantization*, Berkeley Mathematics Lecture Notes 8, Amer. Math. Soc., Providence, 1997.
- [2] R. J. Blattner, Quantization and Representation Theory, in *Harmonic Analysis on Homogeneous Spaces*, Proceedings of Symposia in Pure Mathematics 26, American Mathematical Society, Providence, 1973.
- [3] P. A. M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics*, Belfer graduate School of Science, Yeshiva University, New York, 1964.
- [4] W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory*, Dover, New York 1949 (first published by the University of Chicago Press, 1930).
- [5] A. Kirillov, *Éléments de la théorie des représentations*, Éditions Mir, Moscou, 1974.
- [6] B. Kostant, *Quantization and Unitary Representations, part 1, Prequantization*, Lecture Notes in Mathematics 170 (1970), 87–208.
- [7] L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique quantique*, Éditions Mir, Moscou, 1967.
- [8] G. W. Mackey, *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1963.
- [9] M. Reed and B. Simon, *Functional Analysis*, vol. I, Academic Press, New York, 1972.
- [10] D. J. Simms and N. M. J. Woodhouse, *Lectures on Geometric Quantization*, Lecture Notes in Physics 53, Springer, Berlin 1976.
- [11] J.-M. Souriau, *Structure des systèmes dynamiques*, Dunod, Paris, 1970.
- [12] N. Woodhouse, *Geometric Quantization*, Clarendon Press, Oxford, 1980.