Mécanique quantique et fonctions presque-périodiques

Jean BASS

Le champ d'application de la mécanique quantique est si vaste et ses succès sont si nombreux que personne ne peut refuser de la considérer comme digne de confiance, dans l'état actuel de nos connaissances. Elle repose pour une large part sur une structure mathématique relativement simple, quoique difficile à mettre en oeuvre dès que les situations se compliquent. Mais cette structure comporte quelques défauts. L'un d'eux, c'est que la manière dont elle s'introduit n'est pas très intuitive et se justifie surtout par ses conséquences. L'autre, c'est que les principes de la mécanique quantique semblent parfois conduire à des contradictions. Le mot contradictions est d'ailleurs discutable et n'a qu'une valeur relative. Il arrive un moment où la théorie, qui jusque là se développait en conformité avec les règles usuelles de la logique et des probabilités, s'en sépare et prend une orientation originale. On a voulu justifier cette nouvelle orientation en appliquant à la micro-physique des concepts logiques différents de ceux auxquels on était habitué. Mais cela a conduit à des conséquences inattendues, et la possibilité d'un retour partiel aux idées classiques n'est pas tout à fait abandonnée. On peut se proposer de chercher si, en conservant ce qui est sûr, on pourrait corriger ce qui est discutable. Le présent article n'est qu'une tentative, parmi bien d'autres, pour s'approcher de cet objectif. S'il n'aboutit à aucune conclusion solide, il constitue peut-être l'amorce de recherches plus concrètes.

Partant d'analogies de structure, on y montrera le rôle que semblent jouer implicitement en mécanique quantique les fonctions presque- périodiques, et plus généralement d'autres classes de fonctions qui ont la propriété d'être irrégulières et de donner naissance à des moyennes (on leur associe parfois les adjectifs turbulent, chaotique, pseudo-aléatoire, stochastique, ce dernier improprement).

L'élément de base de la mécanique quantique n'est pas vraiment un espace de Hilbert (abstrait ou L^2). C'est l'espace vectoriel $\mathcal{A}$ de tous les opérateurs (linéaires) sur un espace de Hilbert H. Il contient un sous-ensemble non vectoriel $\mathcal{N}$, celui de tous les opérateurs normaux (opérateurs qui commutent avec leur adjoint ($A^*A = AA^*$), parmi lesquels figurent les opérateurs unitaires ($A^* = A^{-1}$).

L'ensemble $\mathcal{N}$ contient des sous-espaces vectoriels $\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2, \ldots$ constitués par des ensembles d'opérateurs normaux qui commutent deux à deux et avec leurs adjoints.

On se restreindra à ceux de ces espaces qui contiennent l'opérateur unité I. Soit ψ un élément normé de H. A chaque $A \in \mathcal{N}$ on associe d'abord $A\psi \in H$. On appelle moyenne de A dans l'état ψ le produit scalaire

$$< A\psi, \psi > .$$

Si A n'est pas borné, ce produit scalaire n'existe peut-être pas pour tous les ψ de H.

Si A et B sont deux opérateurs normaux, leur produit AB (pris dans un ordre donné) n'est pas en général normal, sauf si A et B commutent. Alors AB a une moyenne

$$< AB\psi, \psi > = < B\psi, A^*\psi >$$

qui, représentant la moyenne du produit de deux grandeurs physiques, est indépendante de l'ordre des facteurs. En particulier la moyenne de A est celle du produit AI.

Supposons que, lorsque $\mathcal{V}$ contient deux opérateurs A et B, $\mathcal{V}$ contienne leur produit. Alors $\mathcal{V}$ a une structure d'algèbre et en même temps que A, contient A^n. Si $\mathcal{V}$ est complet, ou si on le complète, $\mathcal{V}$ contient $e^{i\lambda A}$. Si A est hermitien et λ réel, la moyenne

$$< e^{i\lambda A}\psi, \psi >$$

est, en fonction de λ, une fonction caractéristique au sens probabiliste. Si A et B commutent, c'est-à-dire appartiennent à un même espace $\mathcal{V}$, la moyenne de $e^{i(\lambda A + \mu B)}$ est de type positif en λ, μ. Si A et B ne commutent pas, cette moyenne existe, mais pas une fonction caractéristique en λ, μ, sauf peut-être pour certains ψ.

Or, parmi les opérateurs les plus usuels, on en rencontre souvent qui ne commutent pas (position et impulsion, par exemple). A ce stade, la théorie entre donc en contradiction avec les probabilités : il est impossible de définir une loi de probabilité pour le couple (A, B).

Cette circonstance, traduite d'une façon simplifiée par les inégalités de Heisenberg, a conduit à discuter la philosophie de la mécanique quantique et à construire une théorie fine de la mesure en physique. On en donne diverses interprétations destinées à la justifier. La source de ces difficultés se trouve évidemment dans le choix qui a été fait d'une définition de la valeur moyenne. On peut se demander si, en partant d'une définition plus naturelle, on réussirait à éviter les difficultés, où à en donner une justification plus satisfaisante. Il existe en effet des structures algébriques comparables à celles de la mécanique quantique, mais moins abstraites.

Prenons comme espace initial $\mathcal{A}'$ l'espace de Marcinkiewicz $\mathcal{M}^2$. C'est l'espace des fonctions $f(\tau)$ définies pour tout τ, à valeurs réelles ou complexes, telles que

$$\limsup_{T\to\infty} \frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} |f(\tau)|^2 d\tau < \infty.$$

$\mathcal{M}^2$ est un espace vectoriel. C'est même un espace de Banach de classe de fonctions, avec pour semi-norme la racine carrée de l'expression ci-dessus, qui ne dépend que des propriétés asymptotiques de f.

Appelons moyenne de f l'expression

$$Mf = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} f(\tau)d\tau.$$

Cette moyenne peut ne pas exister. Par exemple $f(\tau) = e^{i\log|\tau|}$ n'a pas de moyenne, car

$$\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} e^{i\log|\tau|}dt = \frac{e^{i\log T}}{1+i}$$

et cette fonction de T n'a aucune limite quand $T \to \infty$. Par contre $f(\tau) = \sin\omega\tau$ a une moyenne nulle.

L'ensemble $\mathcal{N}'$ des fonctions pour lesquelles $M|f|^2$ existe est un sous-ensemble non vectoriel de $\mathcal{M}^2$. Il est facile de donner des exemples de fonctions appartenant à $\mathcal{M}^2$ ou à $\mathcal{N}'$. $f(\tau) = \sin\tau$ et $f(\tau) = e^{i\log|\tau|}$ appartiennent à $\mathcal{N}'$ $f(\tau) = 1 + e^{i\log|\tau|}$ appartient à $\mathcal{M}^2$, mais non à $\mathcal{N}'$.

Les éléments de $\mathcal{N}'$ ont donc une moyenne quadratique. Ils n'ont pas nécessairement de moyenne (exemple de $e^{i\log|\tau|}$). En cela, $\mathcal{N}'$ diffère essentiellement des espaces de variables aléatoires de second ordre, pour lesquelles l'existence de $E|X|^2$ entraîne celle de EX.

L'ensemble $\mathcal{N}'$ contient des sous-espaces vectoriels $\mathcal{V}'_1, \mathcal{V}'_2, ...$ dont les éléments $f, g, ...$ ont la propriété que les produits $f\bar{g}$ ont des moyennes. Chaque espace $\mathcal{V}'$ est un espace préhilbertien avec le produit scalaire $M(f\bar{g})$. On supposera en outre que $\mathcal{V}'$ contient la fonction 1, de sorte que f a une moyenne, celle du produit $f \times 1$.

Soit f un élément réel d'un espace $\mathcal{V}'$ donné. Supposons que $\mathcal{V}'$ contienne les puissances de f. Si par exemple f est bornée, $\mathcal{V}'$ contient $e^{i\lambda f}$. Alors la moyenne $Me^{i\lambda f}$ existe et a les propriétés d'une fonction caractéristique au sens probabiliste. Un exemple d'espace $\mathcal{V}'$ est l'espace des fonctions presque-périodiques de H. Bohr. Si f est presque-périodique, $e^{i\lambda f}$ l'est aussi et toutes les moyennes existent. Par exemple,

$$Me^{i\lambda \sin \tau} = J_0(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{e^{i\lambda u}}{\sqrt{1-u^2}} du.$$

Mais bien entendu il existe des espaces $\mathcal{V}'$ dont les éléments ne sont pas des fonctions presque-périodiques.

Soit g une seconde fonction telle que $e^{i\mu g}$ ait une moyenne. Il peut arriver que f et g appartiennent à deux espaces $\mathcal{V}'$ distincts, et non à leur intersection. Alors la fonction $e^{i(\lambda f+\mu g)}$ n'a pas de moyenne. Elle ne définit pas une fonction caractéristique. Comme en mécanique quantique, on rencontre donc une difficulté lorsqu'il s'agit d'attribuer à un couple une loi de probabilité. Cependant les deux cas ne sont pas exactement identifiables. En mécanique quantique, la moyenne existe mais n'a pas les propriétés de positivité voulues. Avec les moyennes temporelles, la limite qui devrait définir la moyenne n'existe pas.

Pour rétablir le parallélisme des deux théories, on peut procéder de la façon suivante. Soit P une application de $\mathcal{M}^2$ sur un espace $\mathcal{V}'$ choisi. Nous définissons donc un opérateur linéaire P qui, à $f \in \mathcal{M}^2$, fait correspondre $Pf \in \mathcal{V}'$. La fonction $M(Pf)$ a une moyenne, même si f n'en a pas.

Mais il faut aussi envisager le cas où f a déjà une moyenne, et plus précisément appartient à $\mathcal{V}'$. Alors la "projection" P est inutile. Cela signifie que $Pf = f$. Donc, dans le cas général, il faut que, pour tout $f \in \mathcal{M}^2$,

$$P(Pf) = Pf$$

donc

$$P^2 = P.$$

Si par exemple $e^{i(\lambda f+\mu g)}$ n'a pas de moyenne, $Pe^{i(\lambda f+\mu g)}$ a une moyenne fonction de λ, μ. Mais, comme P n'a pas a priori de propriétés de positivité, cette moyenne n'est pas nécessairement une fonction de type positif. On rejoint ainsi, à propos des moyennes temporelles, des circonstances qu'on avait rencontrées en mécanique quantique, et dont l'interprétation n'était pas évidente.

Voici un exemple de construction d'un opérateur P. Posons

$$(Pf)(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} p(\tau, s) f(s) ds.$$

Si pour fixer les idées f est bornée, on demande que p soit, comme fonction de s, une fonction intégrable, et, comme fonction de τ, une fonction moyennable. p

est donc définie sur le produit de deux espaces très dissemblables. La propriété $P^2 = P$ s'exprime par

$$\int_{-\infty}^{\infty} a(\tau, u) a(u, s) du = a(\tau, s).$$

Supposons que $\mathcal{V}'$ soit un sous-espace de l'espace des fonctions presque-périodiques, formé de fonctions ayant leur spectre dans un ensemble donné $\{\omega_k\}$. Posons donc

$$a(\tau, s) = \sum_k a_k(s) e^{i\omega_k \tau}$$

avec $\sum |a_k(s)| < \infty$ pour chaque s, et $a_k(s) \in L^2$ pour chaque k. Si $\hat{a}_k$ est la transformée de Fourier de a_k, on voit que l'on a

$$\hat{a}_k(\omega_l) = \delta_{kl}.$$

On construit facilement une famille de fonctions satisfaisant à cette condition. Supposons que la suite $\{\omega_k\}$ ne soit pas dense sur R. Soit $\phi(\omega)$ une fonction continue nulle pour $|\omega| > 1$ et égale à 1 pour $\omega = 0$. Posons

$$\hat{a}_k(\omega) = \phi\big[r_k(\omega - \omega_k)\big] \begin{cases} = 1 & \text{si } \omega = \omega_k \\ = 0 & \text{si } |\omega - \omega_k| > \frac{1}{r_k} \end{cases}$$

On peut choisir r_k de telle sorte que l'intervalle $\left[\omega_k - \frac{1}{r_k}, \omega_k + \frac{1}{r_k}\right]$ ne contienne que ω_k comme point du spectre. On a alors bien

$$\hat{a}_k(\omega_k) = 1 \quad , \quad \hat{a}_k(\omega_l) = 0 \quad \text{si} \quad l \neq k.$$

On calcule ensuite a_k par transformation de Fourier :

$$\begin{aligned} a_k(s) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \phi\left[r_k(\omega - \omega_k)\right] e^{-i\omega s} d\omega \\ &= \frac{e^{-i\omega_k s}}{2\pi r_k} \int_{-1}^{1} \phi(x) e^{-ixs/r_k} dx. \end{aligned}$$

Si ϕ est suffisamment régulière, $a_k \in L^1$, et si r_k augmente suffisamment vite, $\sum |a_k(s)|$ est majoré par une quantité finie (indépendante de s).

On a donc associé à tout espace $\mathcal{V}'$ un opérateur P qui transforme Pf en une fonction moyennable. La moyenne $M(Pf)$ est prise par rapport à une variable τ qui joue le rôle d'un temps local. Imaginons maintenant une famille $\mathcal{V}'_t$ d'espaces

$\mathcal{V}'$ dépendant d'un paramètre t, que nous pouvons appeler le temps global, ou macroscopique. Alors la moyenne $M(Pf)$ devient une fonction de t. On est ainsi conduit à séparer deux échelles de temps : une échelle microscopique qui sert à construire les moyennes, et une échelle d'évolution macroscopique. On retrouve, d'une façon peut-être plus concrète, la possibilité de définir des moyennes qui cependant évoluent dans le temps, ce que peuvent faire la mécanique quantique et le calcul des probabilités, avec d'autres procédés de définition des moyennes.

Beaucoup d'opérateurs P répondent aux conditions imposées. Dans l'état actuel de la théorie, on ignore s'il en existe un qui soit le meilleur et qui permette une confrontation quantitative entre la théorie des moyennes temporelles et la mécanique quantique. L'évolution des moyennes temporelles dépend de l'évolution d'une famille d'espaces de fonctions presque-périodiques, ou plus généralement d'espaces de fonctions dites stationnaires. Il est remarquable que, sous une autre forme, l'évolution de la grandeur ψ qui sert à calculer les moyennes en mécanique quantique dépende aussi de fonctions de ce type.

L'évolution de ψ est régie par l'équation de Schrödinger. Ecrivons-la en prenant pour H un espace L^2 et, pour fixer les idées, limitons-nous à une particule se déplaçant sur une droite :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{h}{2im}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{V}{ih}\psi = 0,$$

où V est une fonction de x seul.

On résout cette équation par séparation des variables. Si l'on pose

$$\psi(x,t) = \chi(x)e^{i\frac{E}{h}t},$$

on trouve que

$$\frac{d^2\chi}{dt^2} + \frac{2m}{h^2}(E-V)\chi = 0.$$

La discussion de cette équation est bien connue. Pour que χ puisse être normé, il faut que E appartienne à un ensemble de valeurs propres. Si cet ensemble est dénombrable, il y a "quantification". C'est en cela que le discontinu apparaît en physique. A chaque E_k correspond un χ_k normé. Les fonctions propres χ_k forment un système orthonormé sur $[-\infty, +\infty[$. La solution générale, non stationnaire, de l'équation de Schrödinger est alors

$$\psi(x,t) = \sum_k c_k\chi_k(x)e^{i\frac{E_k t}{h}},$$

les coefficients c_k dépendant de la donnée initiale $\psi(x,0)$ et satisfaisant à la condition $\sum |c_k|^2 = 1$.

Il est remarquable que, pour chaque x, ψ soit une fonction presque-périodique de t. L'évolution temporelle de ψ présente donc des analogies avec celle de l'opérateur de projection P introduit ci-dessus. Bien entendu, le spectre peut, totalement ou en partie, être continu. De même les espaces $\mathcal{V}'$ peuvent avoir comme éléments des fonctions ayant un spectre continu.. Alors $\psi(x,t)$ n'est plus presque-périodique, mais pseudo-aléatoire (ou turbulente).

Au lieu de représenter ψ par séparation des variables, on peut faire apparaître le module et l'argument (phase) du nombre complexe ψ. On pose donc

$$\psi = re^{\frac{i}{h}\phi}.$$

On trouve que

$$\frac{\partial(r^2)}{\partial t} + \frac{1}{m}\frac{\partial(r^2)}{\partial x}\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{1}{m}r^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = 0$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + V - \frac{h^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2 r}{\partial x^2} = 0$$

On sait que ces équations suggèrent de considérer r^2 comme une densité (d'un fluide non classique - ses tensions n'ont pas la forme que revêtent celles d'un fluide hydrodynamique). De même $\frac{1}{m}\partial\phi/\partial x$ apparaît comme un champ de vitesse. Les trajectoires de ce champ sont solutions de l'équation différentielle

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}\frac{\partial\phi}{\partial x},$$

ou

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i}{2im}\left(\frac{1}{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{1}{\bar{\psi}}\frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x}\right).$$

Si ψ est une fonction presque-périodique de la forme indiquée ci-dessus, on a

$$\frac{dx}{dt} = \frac{h}{2im}\left[\frac{\sum c_k\chi_k' e^{\frac{i}{h}E_k t}}{\sum c_k\chi_k e^{\frac{i}{h}E_k t}} - \frac{\sum \bar{c}_k\chi_k' e^{-\frac{i}{h}E_k t}}{\sum \bar{c}_k\chi_k e^{-\frac{i}{h}E_k t}}\right]$$

ou encore

$$\frac{dx}{dt} = \frac{h}{2im}\left[\frac{\sum c_k\bar{c}_l(\chi_k'\chi_l - \chi_k\chi_l')e^{\frac{i}{h}(E_k-E_l)t}}{\sum c_k\bar{c}_l\chi_k\chi_l e^{\frac{i}{h}(E_k-E_l)t}}\right]$$

Le second membre de cette équation est le quotient de deux fonctions presque-périodiques ayant pour fréquences les différences $E_k - E_l$, et dépendant par ailleurs de x. Dans le cas général, les fréquences E_k ne sont pas en progression arithmétique et il n'y a pas périodicité (l'oscillateur harmonique est une exception beaucoup trop particulière). Si la fonction ψ ne s'annule pas, ce second membre est lui-même presque-périodique. Quoi qu'il en soit, il semble qu'on ne possède actuellement aucun renseignement sur la nature des solutions de l'équation différentielle $dx/dt = \partial\phi/\partial x$, sur leur irrégularité et sur leur spectre. On peut seulement s'attendre à ce que la forme des trajectoires se prête à des calculs de valeurs moyennes, ce qui rejoint le point de vue développé au début relatif à la structure des espaces $\mathcal{M}^2$, $\mathcal{N}^2$, $\mathcal{V}'$ et à son identité de forme avec les espaces d'opérateurs utilisés en mécanique quantique.

Références

[1] 4 J. Bass, *Lois de probabilité, équations hydrodynamiques et mécanique quantique* (revue scientifique, no. 3299, 1948).

[2] J. Bass, *Fonctions de corrélation, fonctions pseudo-aléatoires et applications* (Masson, 1984).

[3] L. de Broglie, *Les incertitudes d'Heisenberg et l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique* (Gauthier-Villars, 1982) avec une préface de G. Lochak.

[4] Ch. Dewdney, Thèse (Birkbeck college, Londres, 1981).

(Manuscrit reçu le 3O Juin 1986)