# Représentation conjointe position-impulsion relative au principe de correspondance antinormal : son inversion et son équation d'évolution Partie I*

G. Mourgues†, M.R. Feix‡, P. Bertrand, B. Izrar¶

RÉSUMÉ. La partie I de cet article relative aux dynamiques de la particule libre et de l'approximation soudaine, traite l'équation de Liouville quantique à laquelle obéit la fonction de Wigner lissée $\tilde{f}$, par une double gaussienne de variances $\sigma_q$ et $\sigma_p$ (telles que $\sigma_q\ \sigma_p = \hbar/2$). Cette transformée de Wigner ainsi régularisée est une particularisation de la transformée généralisée de Cohen relative au principe de correspondance antinormal. Nous mettons en évidence deux classes de conditions initiales pour cette équation de Liouville en $\tilde{f}$. Un formalisme intermédiaire dit "formalisme en $G$" est développé. Il soulève la difficulté de l'inversion d'une distribution $\tilde{f}$ donnée, et montre que l'inversion n'est possible que pour l'une des classes précédentes. La partie II montre l'importance du choix de la condition initiale à prendre pour les équations d'évolution en $\tilde{f}$, en mettant en évidence la divergence des solutions pour des équations a priori analogues. Une situation identique est signalée concernant l'équation de Schroedinger et l'équation de Liouville Quantique à laquelle obéit la distribution de Wigner $f_w$. Ce même formalisme en $G$ propose une méthode simple de résolution de l'équation d'évolution en $\tilde{f}$, correctement initialisée, et permet de traiter le problème de l'obtention de la limite classique dont nous précisons

---

* Travail présenté au séminaire de la Fondation Louis de Broglie le 7 Décembre 1987

† I.U.T. Montluçon (Université Blaise Pascal) B.P. 408, 03107 Montluçon Cedex

‡ P.M.M.S./C.N.R.S. 3A avenue de la Recherche Scientifique 45071 Orléans Cedex 2

¶ Université de Nancy I, Laboratoire de Physique Théorique, B.P. 239, 54506 Vandœuvre les Nancy Cedex

deux significations possibles selon la classe de la condition initiale choisie.

## 1. Introduction : la transformée de Wigner lissée

La transformée de Wigner généralisée par Cohen [1] associée à la fonction d'onde $\psi(q)$

$$f_c^\psi(q,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{\mathbf{R}^3} \Omega(u,v) e^{-\frac{i}{\hbar}(up+vq-bv)} \psi^\star(b-\frac{u}{2})\psi(b+\frac{u}{2}) du dv db \tag{1.1}$$

avec

$$\Omega(0,0) = 1 \quad , \quad \Omega^\star(u,v) = \Omega(-u,-v)$$

et $\Omega$ indéfiniment différentiable sans pôle ni zéro permet de calculer les valeurs moyennes d'opérateurs par une simple intégration dans l'espace des phases (nous nous limitons aux cas purs) par

$$< B >_\psi = < \psi \mid B \mid \psi > = \int_{\mathbf{R}^2} b(q,p) f_c^\psi(q,p) dp dq \tag{1.2}$$

où $b(q,p)$ est l'analogue classique de l'opérateur $B$ donné par le principe de correspondance

$$\begin{cases} b(q,p) = \dfrac{1}{2\pi\hbar} \displaystyle\int_{\mathbf{R}^2} \dfrac{Tr\left(B\ e^{\frac{-i}{\hbar}(uP+vQ)}\right)}{\Omega(u,v)} e^{\frac{i}{\hbar}(up+vq)} du\ dv \\ B = \displaystyle\int_{\mathbf{R}^2} \tilde{b}(u,v)\Omega(u,v)\ e^{\frac{i}{\hbar}(uP+vQ)} du\ dv \end{cases} \tag{1.3}$$

où

$$\tilde{b}(u,v) = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{\mathbf{R}^2} e^{\frac{-i}{\hbar}(up+vq)} b(q,p) dq\ dp \tag{1.4}$$

La transformée de Wigner originelle [2] qui est relative au principe de correspondance de Weyl (P.C.W.) est obtenue en prenant $\Omega(u,v) \equiv 1$ :

$$f_w^\psi(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbf{R}} \psi(q+\frac{\Delta}{2})\psi^\star(q-\frac{\Delta}{2})\ e^{-i\ \frac{P\Delta}{\hbar}} d\Delta \tag{1.5}$$

Elle a l'avantage de donner les distributions marginales correctes (puisque la condition nécessaire et suffisante $\Omega(0,v) = \Omega(u,0) = 1$ est vérifiée) mais présente le défaut de n'être pas partout positive (ces deux propriétés étant incompatibles comme prouvé par Wigner [3]).

Srinivas et Wolf [4] ont montré que le choix

$$\Omega(u,v) = \int_{\mathbf{R}^2} e^{\frac{i}{\hbar}(up+vq)} f_w^{\rho}(q,p)dq\ dp \tag{1.6}$$

c'est-à-dire $\Omega(u,v)$ pris comme étant la fonction caractéristique de la transformée de Wigner d'un état arbitraire $\rho$ assure la positivité de $f_c^{\psi}(q,p)$ (en fait, cette condition n'est que suffisante (Mourgues et Alii [5]). Dans ce cas, la transformée de Wigner généralisée s'écrit (Bertrand et Alii [6])

$$f_c^{\psi}(q,p) = \int_{\mathbf{R}^2} f_w^{\psi}(q',p') f_w^{\rho}(q-q',p-p')dq'dp' = \frac{1}{\hbar} \mid G_{\rho}^{\psi}(q,p) \mid^2 \tag{1.7}$$

où

$$G_{\rho}^{\psi}(q,p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbf{R}} \psi(s)\rho^{\star}(q-s)\ e^{-i\frac{ps}{\hbar}} ds \tag{1.8}$$

Notons que (1-7) traduit la double convolution de la transformée de Wigner relative à la fonction d'onde $\psi$ par celle de l'état choisi arbitrairement $\rho$ ; c'est une régularisation de la transformée de Wigner par lissage.

Soucieux de privilégier la condition de positivité (afin de pouvoir interpréter les problèmes de limite classique) nous choisirons dorénavant pour $\rho$, l'état fondamental de l'oscillateur harmonique de masse $m$ et pulsation $\omega$

$$< q \mid \rho >= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{\sigma_q}}\, e^{-\frac{q^2}{4\sigma_q^2}} \qquad \sigma_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{1.9}$$

et nous noterons $\tilde{f}(q,p)$ la transformée généralisée de Cohen correspondant à ce choix. Nous abandonnerons désormais, pour simplifier l'écriture, les indices $\psi$ et $\rho$, $\rho$ étant toujours donné par (1.9), ainsi :

$$\left\{\begin{aligned} \tilde{f}(q,p) = f_c^{\psi}(q,p) = f_w^{\psi}(q,p) \star_{q,p} \frac{1}{2\pi\sigma_q\sigma_p}\ e^{-(\frac{q^2}{2\sigma_q{}^2}+\frac{p^2}{2\sigma_p{}^2})} \\ = \frac{1}{\hbar} \mid G_{\rho}^{\psi}(q,p) \mid^2 = \frac{1}{\hbar} \mid G(q,p) \mid^2 \end{aligned}\right. \tag{1.10}$$

avec

$$\sigma_q \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$$

(la notation $\star_{q,p}$ traduit la double convolution en $q$ et $p$). Le principe de correspondance résultant de ce choix est le principe antinormal (P.C.A.N.) pour lequel $\Omega(u,v) = e^{-(m\omega u^2 + v^2/m\omega)/4\hbar}$. Notons que cette distribution $\tilde{f}(q,p)$ ainsi construite est le cas limite minimal du lissage de Cartwright [7] qui est réalisé à l'aide de doubles gaussiennes de variances $\sigma_q \sigma_p \geq \hbar/2$.

Signalons brièvement une possibilité d'interpréter, indépendamment de sa construction, cette transformée de Wigner lissée particulière, dans laquelle l'état $\rho$ décrit le dispositif de mesure de finesse optimale $\sigma_q \sigma_p = \hbar/2$. Si $\psi$ et $\phi$ sont deux états purs quelconques, un calcul simple montre que si l'on note $\mid \alpha, \beta >_\phi = \exp(i/\hbar)(\alpha Q - \beta P) \mid \phi >$ alors,

$$< \psi \mid \alpha, \beta >_\phi = e^{-i\frac{\alpha\beta}{2\hbar}} \int_{\mathbf{R}} e^{i\frac{\alpha s}{\hbar}} \psi^\star(s) \phi(s - \beta) ds \tag{1.11}$$

D'après Aharonov [8], le module au carré du premier membre de (1-11) est au facteur $1/2\pi\hbar$ près, la “propension” pour deux particules d'états $\psi$ et $\phi$, d'avoir leur position et impulsion différant respectivement de $\beta$ et $\alpha$. Cette formume (1.11) rappelle la définition (1.8) de $G$ et suggère que $\tilde{f}$ soit interprétée comme une propension. Toutefois, à cause d'une différence de signe dans les intégrands, cela n'est possible que lorsque $\phi$ est symétrique en $q$, ce qui est le cas de notre $\rho$. Prenant pour $\phi$ l'état fondamental $\rho$ de l'oscillateur harmonique (1.9) qui a cette propriété de symétrie, nous aurons

$$G(p,q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\frac{qp}{2\hbar}} < \psi \mid p, q >_\rho^\star \tag{1.12}$$

soit

$$\tilde{f}(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| < \psi \mid p, q >_\rho \right|^2 \tag{1.13}$$

Signalons qu'O'Connell et Rajagopal [9] ont remarqué la possibilité d'interpréter la propension $< \psi \mid \alpha, \beta >_\phi$ en terme de convolution de fonctions de Wigner originelles des états $\psi$ et $\phi$. Pour notre cas particulier, (1-13) signifie que $\tilde{f}(q,p)$ traduit la probabilité de trouver la particule représentée par l'état $\mid \psi >$ dans l'état quasi-classique (ou cohérent) $\mid \rho >$, centré autour du point $(q,p)$ de l'espace des phases.

Cette interprétation conduit à considérer $\mid \rho >$ non plus comme lié à une particule, mais à un dispositif de mesure dont la *symétrie est imposée.* Un aspect analogue de mesure est développé dans les articles de Vodkiewicz [10] et plus récemment de Royer [11].

## 2. Conditions initiales des équations d'évolution de $\tilde{f}$ (ou $G$) et problème de l'inversion

Utilisant (1.8) et (1.9), nous obtenons par différentiation

$$\frac{\partial G}{\partial q} = -\frac{q}{2\sigma_q^2} + \frac{i\hbar}{2\sigma_q^2}\frac{\partial G}{\partial p} \tag{2.1}$$

et posant $G(q,p) = A(q,p)\ e^{iB(q,p)}$

$$\frac{\partial B}{\partial q} = \frac{\hbar}{2A\sigma_q^2}\frac{\partial A}{\partial p} \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial B}{\partial p} = -\frac{1}{\hbar}\left(\frac{2\sigma_q^2}{A}\frac{\partial A}{\partial q} - q\right) \tag{2.2}$$

La condition (2.1) est une condition nécessaire et suffisante pour qu'une fonction $G(q,p)$ donnée provienne d'une fonction d'onde (donc d'un état pur) ; (2.2) et (2.3) sont les conditions analogues portant sur le module et la phase de $G$). Ecrivant le fait que $B$ doit avoir une différentielle totale, c'est-à-dire $\partial^2 B/\partial p\partial q = \partial^2 B/\partial q\partial p$ et utilisant le fait que $A = \sqrt{\hbar \tilde{f}}$ nous obtenons la condition analogue sur $\tilde{f}$

$$\sigma_p^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}[\ln \tilde{f}] + \sigma_q^2\frac{\partial^2}{\partial q^2}[\ln \tilde{f}] = -1 \tag{2.4}$$

Cette équation aux dérivées partielles admet pour solutions

$$\tilde{f}(q,p) = \exp\left\{F_1(p - i\frac{\sigma_p}{\sigma_q}q) + F_2(p + i\frac{\sigma_p}{\sigma_q}q) - \frac{1}{2}(\frac{q^2}{2\sigma_q^2} + \frac{p^2}{2\sigma_p^2})\right\} \tag{2.5}$$

où $F_1$ et $F_2$ sont des fonctions arbitraires de variables complexes qui doivent être choisies de façon que les termes imaginaires s'annulent.

A titre d'exemple, une double gaussienne de Variances $\Sigma_q$ et $\Sigma_p$ vérifiera la condition (2.4) si et seulement si

$$\frac{\sigma_q^2}{\Sigma_q^2} + \frac{\sigma_p^2}{\Sigma_p^2} = 1 \tag{2.6}$$

*Une fonction réelle positive $\tilde{f}(q,)$ (resp. complexe $G(q,p)$) vérifiant les propriétés (2.4) (resp. (2.2) et (2.3)) et servant à initialiser les équations d'évolution de $\tilde{f}$ (ou $G$), sera dite "condition initiale restreinte" (RIC).* De telles fonctions proviennent des états purs. Toutefois, il est souhaitable d'étendre la classe des conditions initiales, et cela pour deux raisons :

1) - la nécessité de traiter les mélanges statistiques,

2) - le fait que, désirant étudier la possibilité d'obtenir la limite classique du formalisme, *nous voudrions pouvoir considérer n'importe quelle condition initiale.*

*De telles fonctions (correspondant à 1) ou 2)) seront dites "conditions initiales généralisées" (GIC).*

Une première remarque peut être faite. (2.4), ou (2.5), ou (2.1), ou (2.2) et (2.3), montrent que toute fonction $\tilde{f}$ ou $G$ RIC contient explicitement (ou implicitement) $\hbar$. D'autre part, seules, les fonctions $\tilde{f}$ ou $G$ GIC peuvent ne pas dépendre du paramètre $\hbar$ (conditions initiales classiques). A titre de seconde remarque, notons que les conditions (2.2) ou (2.3) permettent de construire la fonction $G(q,p)$ relative à une fonction $\tilde{f}$ RIC donnée ; en effet :

$$A(q,p) = \mid G(q,p) \mid = \sqrt{\hbar\ \tilde{f}(q,p)} \tag{2.7}$$

La phase de $G$ est obtenue par intégration indifféremment de (2.2) ou (2.3).

$$(2.2) \Rightarrow B(q,p) = \frac{\hbar}{4\sigma_q^2} \int \frac{\partial}{\partial p}(\log \tilde{f}(q,p))dq + k_1(p) \tag{2.8}$$

$$(2.3) \Rightarrow B(q,p) = -\frac{\sigma_q^2}{\hbar} \int \frac{\partial}{\partial q}(\ln \tilde{f}(q,p))dp + k_2(q) \tag{2.9}$$

Le symbole $\int$ signifiant primitive. Les valeurs de $k_1(p)$ ou $k_2(q)$ résultant de l'intégration, sont déterminées en utilisant la condition de différentiabilité totale de $B$.

A titre d'exemple, pour la double gaussienne, RIC de variances $\Sigma_q \Sigma_p$ vérifiant (2.6) nous obtenons

$$B(q,p) = -\frac{pq}{\hbar}\frac{\sigma_p^2}{\Sigma_p^2} = -\frac{pq}{\hbar}\left(1 - \frac{\sigma_q^2}{\Sigma_q^2}\right) \tag{2.10}$$

Dans le cas d'une fonction $\tilde{f}(q,p)$ GIC les deux expressions (2.8) ou (2.9) permettant le calcul de la phase de $G$ sont mutuellement incompatibles.

Comme troisième remarque, il est possible d'inverser une fonction $\tilde{f}(q,p)$ RIC. Utilisant (2.7) et (2.8) ou (2.9) on obtient le $G(q,p)$ correspondant puis, prenant la transformée de Fourier inverse de (1.8), on en déduit $\psi$. Comme résultat final, nous obtenons

$$\psi(s) = \frac{\sqrt{\sigma_q}}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{\hbar}} e^{\frac{(q-s)^2}{4\sigma_q^2}} \int_{\mathbf{R}} \sqrt{\tilde{f}(q,p)} e^{i\frac{ps}{\hbar}} \exp\left\{\frac{i\hbar}{4\sigma_q^2}\int \frac{\partial}{\partial p}\left(\ln \tilde{f}(q,p)\right) dq + k_1(p)\right\} dp \tag{2.11}$$

La condition $\tilde{f}$ RIC fait que finalement, la variable $q$ s'élimine et qu'il suffit, en principe, de connaître $\tilde{f}(q,p)$ en un seul point $q$ pour la déterminer totalement.

Signalons le parallèle entre les résultats de ce paragraphe et ceux de Tatarskii [12] relatifs à la transformation de Wigner originelle : une fonction $f(q,p)$ donnée est la transformée de Wigner d'un certain état si et seulement si

$$\frac{\partial^2 \ln\theta(q_1,q_2)}{\partial q_1 \partial q_2} = 0 \text{avec} \theta(q_1,q_2) = \int_{\mathbf{R}} e^{ip\frac{q_1-q_2}{\hbar}} f\left(p, \frac{q_1+q_2}{\hbar}\right) dp \tag{2.12}$$

auquel cas, l'inversion de $f$ est possible, au facteur de normalisation près égal à $(\int f(p,\overline{q})dp)^{1/2}$ :

$$\psi(s) = e^{i\phi} \int_{\mathbf{R}} f\left(\frac{s+\overline{q}}{2}, p\right) e^{ip\frac{s-\overline{q}}{\hbar}} dp \tag{2.13}$$

où $\phi$ est une phase arbitraire, et $\overline{q}$ est choisi arbitrairement sous la seule réserve que $\psi(\overline{q}) \neq 0$.

De même que l'inversion de $\tilde{f}$ n'est pas possible pour une fonction GIC (puisque la variable $q$ ne s'élimine pas) la relation (2.13) présente le danger de permettre abusivement l'inversion d'un $f$ GIC (c'est-à-dire ne vérifiant pas (2.12)) si l'on considère le $\overline{q}$ arbitraire comme une constante (éventuellement nulle si $\psi(0) \neq 0$).

## 3. Equations d'évolution de $G$ et $\tilde{f}$

### *3.1 Cas de la particule libre (FPM)*

En dérivant par rapport au temps la relation (1.8), nous obtenons

$$i\hbar\frac{\partial G}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbf{R}} i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} e^{-i\frac{qp}{\hbar}} e^{i\frac{ps}{\hbar}} \rho^\star(s)ds \tag{3.1.1}$$

et remarquant que

$$\frac{1}{2m}\big(p - i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\big)^2 \psi(q-s)e^{i\frac{pq}{\hbar}} = -e^{-i\frac{qp}{\hbar}}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(q-s)}{\partial q^2} \tag{3.1.2}$$

nous obtenons, vu que $\psi(q)$ obéit à l'équation de Schroedinger

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} = 0 \tag{3.1.3}$$

$$i\hbar\frac{\partial G}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(p - i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)^2 G = \frac{p^2}{2m}G - i\frac{\hbar p}{m}\frac{\partial G}{\partial q} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 G}{\partial q^2} \tag{3.1.4}$$

Remarquons le fait que la fonction d'onde $\rho(q)$ utilisée pour le lissage n'apparaît pas explicitement dans cette équation (3.1.4). En utilisant l'équation conjuguée de (3.1.4), un calcul simple conduit à

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(GG^\star) = -i\hbar\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial q}(GG^\star) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial q}\left(G^\star\frac{\partial G}{\partial q} - G\frac{\partial G^\star}{\partial q}\right) \tag{3.1.5}$$

Cette équation (3.1.5) fait apparaître la phase de $G$ et rend a priori impossible l'obtention d'une équation générale d'évolution de la fonction de Wigner lissée par un noyau quelconque. Cependant, dans le cas du noyau doublement gaussien de variances $\sigma_q$ et $\sigma_p$ vérifiant $\sigma_q\sigma_p = \hbar/2$, nous avons

$$G^\star\frac{\partial G}{\partial q} - G\frac{\partial G^\star}{\partial q} = \frac{i\hbar}{2\sigma_q^2}\frac{\partial}{\partial p}\tilde{f} \tag{3.1.6}$$

d'où

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{f} + \frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial q}\tilde{f} + \frac{\hbar^2}{4m\sigma_q^2}\frac{\partial^2}{\partial q \partial p}\tilde{f} = 0 \tag{3.1.7}$$

Cette possibilité souligne ainsi le rôle privilégié joué par le noyau doublement gaussien. Cette équation (3.1.7) déjà donnée par O'Connell et Wigner [13] (qui est l'équivalent de l'équation de Liouville quantique pour la fonction de Wigner) est difficilement résolvable en raison de la dérivée partielle d'ordre 2 en $q$ et $p$. Nous considérerons plutôt la forme (3.1.4) qui se résout facilement par transformation de Fourier

$$G(k,p) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbf{R}} G(q,p)e^{-ikq}dp \quad \text{et} \quad G(q,p) = \int_{\mathbf{R}} G(k,p)e^{ikq}dk \tag{3.1.8}$$

et qui conduit à

$$G(k,p,t) = G(k,p,0)e^{-\frac{i}{2m\hbar}(p+\hbar k)^2 t} \tag{3.1.9}$$

d'où

$$G(q,p,t) = e^{-i(\frac{p^2 t}{2m\hbar}+\frac{\pi}{4})}\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\left(G(q,p,0) \star_q e^{-i[\frac{\pi}{4}-\frac{(mq-pt)^2}{2\hbar t m}}\right) \tag{3.1.10}$$

puis, finalement, $\tilde{f} = (1/\hbar)GG^\star$ (le symbole $\star_q$ signifiant la convolution en $q$).

*3.2 Cas du potentiel $V(q,t)$*

Dans ce cas, l'équation de Schroedinger s'écrit

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2} + V\psi \tag{3.2.1}$$

Un calcul simple donne pour la contribution due au potentiel

$$\int_{\mathbf{R}} V(p',t)G(q,p-p',t)dp' = V(p,t) \star_p G \tag{3.2.2}$$

où

$$V(p,t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{\mathbf{R}} V(q,t)e^{-i\frac{qp}{\hbar}}dq \tag{3.2.3}$$

et finalement

$$i\hbar\frac{\partial G}{\partial t}=\frac{p^2}{2m}G-i\frac{\hbar p}{m}\frac{\partial G}{\partial q}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial G}{\partial q^2}+\int_{\mathbf{R}}V(p',t)G(q,p-p',t)dp' \quad (3.2.4)$$

Nous nous intéresserons plus particulièrement au cas connu sous l'appellation "Approximation Soudaine" (S.A.) pour lequel

$$V(q,t)=\Phi(q)\delta(t-t_0) \quad (3.2.5)$$

En effet, d'une part, (3.2.4) admet alors une solution immédiate obtenue par transformation de Fourier :

$$G(q,\lambda,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbf{R}}G(q,p,t)e^{ip\lambda}dp \quad \text{puis} \quad G(q,p,t)=\int_{\mathbf{R}}G(q,\lambda,t)e^{-ip\lambda}d\lambda \quad (3.2.6)$$

qui s'écrit

$$G(,q,\lambda,t_0^+)=G(q,\lambda,t_0^-)e^{-\frac{i}{\hbar}\Phi(\lambda\hbar)} \quad (3.2.7)$$

(les notations $t_0^-$ et $t_0^+$ désignent le temps juste avant et juste après le pulse de potentiel), et d'autre part, le fait de convoluer un potentiel, variant de façon continue en temps, par un peigne de Dirac d'incrément $\Delta t$ assez fin donne un schéma numérique efficace [14] de résolution de (3.2.4) par emplois successifs de (3.1.9) et (3.2.7). Notons que, comme dans le cas FPM, l'équation (3.2.4) ne fait pas intervenir explicitement la fonction $\rho(q)$ utilisée pour le lissage. Dans le cas où l'on choisit $\rho(q)$ donné par (1.9), nous obtenons conformément au résultat de R.F. O'Connell et Wigner [13]

$$\begin{aligned}\frac{\partial\tilde f}{\partial t}+\frac{p}{m}\frac{\partial\tilde f}{\partial q}+\frac{\sigma_p^2}{m}\frac{\partial^2\tilde f}{\partial q\partial p}+\frac{i}{\hbar}\int_{\mathbf{R}}\Big[\tilde f\big(q+ik\sigma_q^2,p+\frac{\hbar k}{2},t\big)\\ -\tilde f\big(q+ik\sigma_q^2,p-\frac{\hbar k}{2},t\big)\Big]e^{-\frac{k^2\sigma_q^2}{2}}e^{ikq}V(k,t)dk=0\end{aligned} \quad (3.2.8)$$

où $V(k)$ est la transformée de Fourier de $V(q)$ définie par (3.1.8) et où $\sigma_q\sigma_p=\hbar/2$. Une autre forme (dont le principe de calcul est donné en Annexe 1 [1] ) faisant intervenir les dérivées d'ordre pair et impair du

[1] L'Annexe 1 paraîtra à la fin de la partie II, dans le numéro suivant.

potentiel est la suivante :

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + \frac{p}{m}\frac{\partial \tilde{f}}{\partial q} + \frac{\sigma_p^2}{m}\frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial q \partial p} = V^{(1)}(q,t)\frac{\partial \tilde{f}}{\partial p} \\
&\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\sqrt{2}\sigma_q)^{2n}}{2^{2n-1}} V^{(2n)}(q,t) \sum_{s=0}^{n-1} C_{n,s}^{(0)} (\sqrt{2}\sigma_p)^{2s} \\
&\quad \times \sum_{r=1}^{n-s} C_{n,s,r}^{(1)} (\sqrt{2}\sigma_q)^{2r-2} \frac{\partial^{2(r+s)}}{\partial q^{2r-1}\partial p^{2s+1}} \tilde{f} \\
&\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\sqrt{2}\sigma_q)^{2n+1}}{2^{2n}} V^{(2n+1)}(q,t) \sum_{s=0}^{n} C_{n,s}^{(0)} (\sqrt{2}\sigma_p)^{2s} \\
&\quad \times \sum_{r=0}^{n-s} C_{n,s,r}^{(2)} (\sqrt{2}\sigma_q)^{2r-1} \frac{\partial^{2(r+s)+1}}{\partial q^{2r}\partial p^{2s+1}} \tilde{f}
\end{aligned} \tag{3.2.9}$$

Les valeurs des coefficients $C_{n,s}^{(0)}$, $C_{n,s,r}^{(1)}$ et $C_{n,s,r}^{(2)}$ sont données dans l'annexe 1. Cette équation (ici plus explicite) a été obtenue différemment par O'Connell et Wigner [13].

*3.3 Remarques sur les opérateurs intégrodifférentiels liés à ces équations*

Rapppelons tout d'abord l'équation de Liouville quantique relative à la distribution originelle de Wigner $f_w$

$$\begin{aligned}
0 = \frac{\partial}{\partial t} f_w + \frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial q} f_w + \frac{i}{2\pi\hbar}\int_{\mathbf{R}^2} &\frac{V(q+\frac{\Delta}{2}) - V(q-\frac{\Delta}{2})}{\hbar} e^{i\frac{p-p'}{\hbar}\Delta} \\
&f_w(q,p',t)dp'd\Delta
\end{aligned} \tag{3.3.1}$$

qui peut s'écrire autrement au moyen de l'Hamiltonien classique $H$

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial f_w}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial f_w}{\partial p} - \frac{\hbar^2}{24}\frac{\partial^3 H}{\partial q^3}\frac{\partial^3 f_w}{\partial p^3} + \frac{\hbar^4}{120}\frac{\partial^5 H}{\partial q^5}\frac{\partial^5 f_w}{\partial p^5} + 0(\hbar^6) \tag{3.3.2}$$

Utilisant les opérateurs Liouville classique $\mathcal{L}_C$ et Liouville quantique $\mathcal{L}_Q$, nous obtenons

$$\mathcal{L}_Q f_w = \left[\mathcal{L}_C + \frac{\hbar^2}{24}\frac{\partial^3 H}{\partial q^3}\frac{\partial^3}{\partial p^3} - \frac{\hbar^4}{120}\frac{\partial^5 H}{\partial q^5}\frac{\partial^5}{\partial p^5} + 0(\hbar^6)\right] f_w \tag{3.3.3}$$

Il faut insister sur le fait, pas toujours compris, signalé par Heller [15] que, si au sens opérateurs

$$\lim_{\hbar\to 0} \mathcal{L}_Q = \mathcal{L}_C \tag{3.3.4}$$

nous n'aurons pas obligatoirement

$$\lim_{\hbar\to 0} \mathcal{L}_Q f_w = \mathcal{L}_C f_w \tag{3.3.5}$$

car le paramètre $\hbar$ intervient non seulement dans l'opérateur mais aussi dans $f_w$ (introduisant des singularités, du moins pour les états purs, comme signalé par Heller [15]) ; cette situation ne se produit pas, par contre, dans le cas des mélanges incohérents qui conduisent à un développement de $f_w$ ne faisant intervenir que des puissances positives de $\hbar$. Nous constatons donc, dès à présent, qu'il ne faudra pas étudier l'obtention de la limite classique (L.C.) sur les opérateurs liés aux équations (3.1.4), (3.1.9), (3.2.4) et (3.2.9), mais sur les équations elles-mêmes faisant intervenir les fonctions $G$.

*3.4 Choix des potentiels à considérer*

Nous ne considérerons pas les potentiels de type linéaire ou quadratique pour lesquels l'équation de Liouville quantique (3.3.1) se réduit à l'équation de Liouville classique, l'aspect quantique n'intervenant que dans la condition initiale. Ce "bon comportement" mais tout à fait marginal sera similairement suspect pour l'équation (3.2.4) en $G$ (Soto et Claverie [16] ont montré ce fait sur le calcul des corrections quantiques à apporter à $\tilde{f}$ pour divers types de potentiels).

## Références


[1] L. Cohen, J. Math Phys. **7** (5), 781 (1966).
[2] E.P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
[3] E.P. Wigner, *Perspective in quantum mechanics*, MIT Press, Cambridge, pp. 25 (1971).
[4] M.D. Srinivas, E. Wolf, Phys. Rev.,**D 11** (6), 1477 (1975).
[5] G. Mourgues, M.R. Feix, J.C. Andrieux, P. Bertrand, J. Math. Phys., **26** (10), 2554 (1985).
[6] P. Bertrand, J. Doremus, B. Izrar, V.T. Nguyen, M.R. Feix, Physics Letters, **94 A** (9), 415 (1983).
[7] N.D. Cartwright, Physica **83 A**, 249 (1976).
[8] Y. Aharonov, D.Z. Albert, C.K. Au, Phys. Rev. Lett. **47** (15), 1029 (1981).

[9] R.F. O'Connel, A.K. Rajagopal, Phys. Rev. Lett. **48** (8), 525 (1982).
[10] K. Vodkiewicz, Phys. Rev. Lett. **52** (13), 1064 (1984).
[11] A. Royer, Phys. Rev. Lett. **55** (25), 2745 (1985).
[12] V.I. Tatarskii, Sov. Phys. Usp. **26** (4), 311 (1983).
[13] R.F. O'Connel, E.P. Wigner, Phys. Lett. **85 A** (3), 121 (1981).
[14] Ce type de code numérique annoncé dans G. Mourgues,J.C. Andrieux, M.R. Feix, Eur. J. Phys. **5** 112 (1984), a été testé avec succès sur l'équation de Schrödinger avec potentiel harmonique dépendant du temps, par comparaison avec la solution exacte de l'équation obtenue par une méthode de groupe (voir J.R. Burgan, M.R. Feix, E. Fijalkow, A. Munier, Phys. Lett. **74 A**, 11 (1979)).
[15] E.J. Heller, The journal of Chemical Physics **65** (4), 1289 (1976).
[16] F. Soto, P. Claverie, Physica **109 A**, 193 (1981).
[17] P. Bertrand, V.T. Nguyen, M. Gros, B. Izrar, M.R. Feix, J. Guttierez, J. Plasma Phys. **23**, part. 3, pp. 401–422, 1980.
[18] H.J. Horsch, M.V. Berry, Physica **3 D**, 687 (1981).