Opérateurs et probabilités (à propos de l'interprétation statistique de la mécanique quantique)

J. Bass

24, rue Ferdinand Jamin, 92340 Bourg-la-Reine

RÉSUMÉ. On présente ici les principes de la mécanique quantique en prenant comme point de départ l'interprétation probabiliste d'un couple (opérateur - fonction d'onde). L'élément essentiel est la fonction caractéristique associée à l'opérateur. Pour un couple d'opérateurs A et B, elle n'a de signification probabiliste que si A et B commutent. Cela conduit à étudier les algèbres d'opérateurs hermitiens, à en montrer la construction et à comparer les structures probabilistes attachées à deux algèbres qui ne commutent pas entre elles. On compare deux opérateurs A et B qui ont la même statistique respectivement dans deux états ψ et ψ'. Le cas où ψ_1 se déduit de ψ par l'évolution temporelle (équation de Schrödinger) permet de donner une justification logique du choix classique de l'opérateur vitesse ($\frac{h}{i}\frac{d}{dx}$), qui apparaît alors comme la dérivée par rapport au temps de l'opérateur position.

ABSTRACT. The principles of quantum mechanics are recalled, starting from the probabilistic interpretation of a pair "operator–wave function". The fundamental element is the caracteristic function associated with the operator. But for a pair of non commuting operators, it has no probabilistic significance. That suggests to study the algebras of hermitian operators, and to compare the probabilistic structure with the structure of non commuting algebras. The case of two operators, defined at two different times with the same statistic is considered. When the time evolution is given by the Schrödinger's equation, a logical interpretation is given of the choice of $\frac{h}{i}\frac{d}{dx}$ *as the velocity operator.*

1. Introduction

L'interprétation statistique de la mécanique quantique est connue depuis longtemps. Elle est exposée dans de nombreux livres de physique. J. von Neumann en développe les principes dans son célèbre livre "Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik" (1932). Mais, par comparaison avec les principes du calcul des probabilités, certaines anomalies apparaissent. Des interprétations physiques en ont été données. Il semble cependant que, du point de vue théorique, ces justifications présentent des lacunes, que l'habitude empêche de discerner.

Je me propose de donner une présentation aussi correcte que possible de la manière dont les probabilités s'introduisent en mécanique quantique. Il ne s'y trouvera peut être rien de nouveau, mais je m'efforcerai d'éclairer bien des points qui, s'ils sont devenus classiques, me semblent un peu obscurs.

2. Opérateurs et fonctions caractéristiques

Rappelons d'abord ce qu'on appelle une *fonction de type positif.* Soit $\varphi(\lambda)$ une fonction à valeurs complexes de la variable réelle λ. Cette fonction est de type positif si les conditions suivantes sont réalisées:

Soit n un entier arbitraire;

Soit $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ n nombres réels arbitraires;

Soit $c_1, \ldots, c_n$ n nombres complexes arbitraires;

Alors φ est un type positif si pour tout choix de n et des nombres précédents

$$\sum_{k,l} c_k \bar{c}_l \varphi(\lambda_k - \lambda_l) \geq 0.$$

Si φ est continue, il résulte d'un théorème de Bochner qu'il existe une mesure positive bornée m telle que

$$\varphi(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp{(i\lambda\omega)} dm(\omega)$$

Si $\varphi(0) = 1$, m a les propriétés d'une mesure de probabilité.

On peut donner de φ diverses interprétations. La plus naturelle consiste à interpréter véritablement m comme une mesure de probabilité. Alors φ est la *fonction caractéristique* d'une certaine variable aléatoire. Mais on pourrait aussi considérer φ comme la covariance d'une fonction aléatoire stationnaire, ou la fonction de corrélation d'une fonction non aléatoire. m serait alors une mesure spectrale.

Les règles de la mécanique quantique introduisent justement une fonction de type positif, et c'est son interprétation probabiliste qui a été choisie. Voici comment on procède.

On donne un espace de Hilbert S, qui sera dans les applications un espace L^2 de fonctions de carré intégrable. On choisit dans S un élément ψ de norme unité. Soit G_λ un groupe continu à un paramètre d'opérateurs unitaires sur S. Cela signifie

$$G_{\lambda+\lambda'} = G_\lambda G_{\lambda'} \ , \quad G_{-\lambda} = G_\lambda^{-1} \ , \quad G_0 = \text{identité} \ , \quad \lambda \in \mathbf{R}$$

Si $\langle\rangle$ désigne le produit scalaire dans S , la fonction

$$\varphi(\lambda) = \langle G_\lambda \psi, \psi \rangle$$

est une fonction de type positif, et $\varphi(0) = 1$. Cela se vérifie facilement.

La mécanique quantique interprète $\varphi(\lambda)$ comme la fonction caractéristique d'une loi de probabilité relative à une certaine variable aléatoire.

Soit A un opérateur hermitien sur S . Si A est borné, c'est le générateur infinitésimal d'un groupe G_λ, et l'on peut poser

$$G_\lambda = \exp(i\lambda A)$$

Moyennant quelques précautions, cette notation reste valable même si A n'est pas borné, et on écrit

$$\varphi(\lambda) = \langle \exp(i\lambda A)\psi, \psi \rangle$$

Lorsque A possède un spectre dénombrable, cette formule conduit aux énoncés usuels donnant les valeurs que peut prendre la variable aléatoire, et les probabilités correspondantes.

En mécanique quantique, on associe à toute grandeur physique un opérateur hermitien A. Cette grandeur est considérée comme aléatoire, et sa loi de probabilité a pour fonction caractéristique la fonction $\varphi(\lambda)$ définie ci-dessus. L'espace S utilisé est un espace L^2. L'élément ψ est donc une fonction $\psi(x)$ telle que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$. Les opérateurs usuels sont :

- l'opérateur de position x, défini par $(x\psi)(x) = x\psi(x)$.
- l'opérateur vitesse (ou impulsion), défini par $(p\psi)(x) = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d\psi(x)}{dx}$ (où $\hbar$ est la constante de Planck, à un facteur 2π près).

En ce qui concerne l'opérateur $p = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d}{dx}$, son introduction peut sembler tout à fait arbitraire. Puisqu'il s'agit d'une vitesse, il ne peut provenir que de la considération de la position de la particule à deux instants successifs. Je reviendrais sur ce point un peut plus loin. Pour le moment, tout se passe à un instant donné, qui n'intervient pas.

Bien entendu, l'expression de $\varphi(\lambda)$ contient comme sous-produit celle de la valeur moyenne de A (opérateur ou grandeur physique observable) "dans l'état ψ". C'est $\overline{A} = \langle A\psi, \psi\rangle$.

Pour l'opérateur x, on a

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\lambda x)\psi\overline{\psi}dx$$

ce qui correspond à une densité de probabilité $|\psi|^2$.

Pour l'opérateur $\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d}{dx}$, on a

$$\varphi(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i\frac{\hbar\lambda}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi.\bar{\psi}dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x+\lambda\hbar)\bar{\psi}(x)dx$$

Cette convolution se met sous la forme d'une transformée de Fourier

$$\varphi(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ih\lambda y)|\psi_1(y)|^2 dy$$

avec

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}\psi_1(y)dy$$

C'est ce qu'on exprime souvent en disant que la vitesse dans l'état ψ a les mêmes propriétés statistiques que la position dans l'état $\mathcal{F}_\psi$, où $\mathcal{F}$ est l'opérateur de Fourier. Nous reviendrons sur ce point.

3. Couples d'opérateurs

L'exemples des opérateurs x et $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ nous incite à considérer des couples d'opérateurs A, B représentant deux grandeurs physique attachées à la particule. Peut-on les interpréter comme des couples des variables aléatoires? Il est naturel de leur associer la fonction

$$\varphi(\lambda, \mu) = \langle \exp(i\lambda A + \mu B)\psi, \psi \rangle$$

qui a priori joue le rôle de fonction caractéristique pour le couple. Si A et B commutent, $\varphi(\lambda, \mu)$ est bien une fonction caractéristique à deux variables. Autrement dit,

$$G_{\lambda\mu} = \exp i(\lambda A + \mu B)$$

constitue bien un groupe d'opérateurs unitaires.

Il n'en est plus de même si A et B ne commutent pas, sauf peut être pour certains ψ particuliers. La fonction $\varphi(\lambda, \mu)$ existe toujours , mais elle n'est pas de type positif. Sa transformée de Fourier n'est pas une mesure de probabilité. Si c'est une fonction (une densité), elle n'est pas partout positive.

L'exemple traditionnel est celui des opérateurs x et $p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ dans l'espace L^2. On vérifie que

$$xp - px = -\frac{\hbar}{i}$$

Dans ce cas, on sait calculer

$$\varphi(\lambda, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp i \left(x\lambda + \mu \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \right) \psi(x).\bar{\psi}(x) dx$$

Il suffit pour cela, en s'inspirant des méthodes relatives aux groupes de Lie, de calculer la fonction

$$\chi(s) = \exp si \left(x\lambda + \mu \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \right) \psi(x)$$

qui vérifie l'équation aux dérivées partielles élémentaires

$$\frac{1}{i}\frac{\partial \chi}{\partial s} = \lambda x \chi + \mu \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \chi}{\partial x}$$

Cette équation s'intégre facilement. Moyennant la condition $\chi(0) = \psi(x)$, elle fournit $\chi(s)$, et par conséquent $\varphi(\lambda, \mu) = \langle \chi(s), \chi(0) \rangle$. On trouve

$$\varphi(\lambda, \mu) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp i\lambda x \psi(x + \frac{\hbar}{2})\bar{\psi}(x - \frac{\hbar}{2})$$

La transformée de Fourier de la fonction $\varphi(\lambda, \mu)$ obtenue s'appelle la pseudo-densité de Wigner. Son expression est due à Wigner [10] et sa démonstration complète a été faite par J. Bass [4]. On trouve facilement des exemples de fonctions ψ pour lesquelles cette densité peut prendre des valeurs négatives.

Rappelons que les relations d'incertitude de Heisenberg sont une traduction condensée de ces circonstances.

4. Algèbres d'opérateurs

L'ensemble des opérateurs (hermitiens) sur S est un espace vectoriel, mais non une algèbre. Un ensemble d'opérateurs commutant deux à deux est une algèbre, à laquelle on peut associer une structure probabiliste.

Donnons nous un opérateur A. L'ensemble des opérateurs qui commutent entre eux et avec A constitue une algèbre. Ses éléments sont de la forme $F(A)$ *. Réciproquement, si on considère un ensemble quelconque $\{X\}$ d'opérateurs hermitiens commutant deux à deux, il existe un opérateur borné A qui commute avec $\{X\}$ et tel que tout $X \in \{X\}$ soit fonction de A.

On peut alors considérer deux opérateurs A et B qui ne commutent pas. Ils engendrent deux algèbres distinctes. Cependant ces algèbres ont peut être une intersection non vide. Plaçons-nous par exemple dans l'espace S des fonctions $\psi(x, y)$ de deux variables telles que $\int\int |\psi(x, y)|^2 dx\, dy = 1$.

La particule à 2 dimensions est caractérisée par les quatre opérateurs

$$\text{position } x,\ y\ ; \quad \text{vitesse } p = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ q = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial y}$$

* La fonction $F(A)$ peut être définie par $\langle F(A)\psi, \theta \rangle = \int F(z) d\langle E_z \psi, \theta \rangle$ où E_z est la mesure spectrale associée à A. Si F est un polynôme, $F(A)$ se définit immédiatement

Voici leur schéma de commutation :

En y adjoignant l'opérateur identité I, on peut le représenter de la façon suivante :

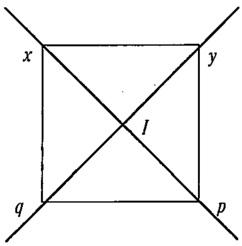

Figure 1.

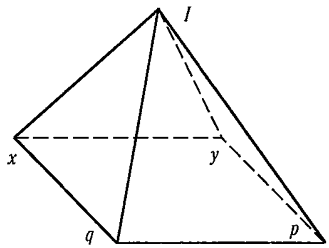

Figure 2.

Il est commode de se placer dans l'espace à 3 dimensions, qui confère aux segments leur individualité : qI ne prolonge pas Iy, pI ne prolonge pas Ix. On a alors une pyramide ayant pour base le carré $xypq$, pour sommet I. Les quarts de plan qui prolongent les triangles xyI, ypI, pqI, qxI, décrivent les faces d'un angle polyèdre. Ils forment 4 angles non coplanaires, qui sont des images de 4 algèbres d'opérateurs, ayant en commun les arêtes Ix, Iy, Ip, Iq de la pyramide (figure 2).

Examinons encore le cas d'une particule à 3 dimensions, avec les opérateurs x, y, z et p, q, r.

On peut matérialiser le schéma de commutation par un octaèdre ayant pour centre l'image I de l'identité. Les sommets représentent les 6 opérateurs. Ils forment 8 triangles de commutation :

$$xyz \quad pqr \quad xyr \quad xzq \quad yzp \quad pqz \quad pry \quad qrx$$

Ces triangles servent de base à des tétraèdres de sommet I, lesquels se prolongent dans l'espace en 8 domaines pyramidaux de sommet I, représentant les 8 algèbres possibles. Ces domaines ont des intersections non vides. Par exemple l'arête Ir représente des opérateurs qui commutent avec x, y, p, q.

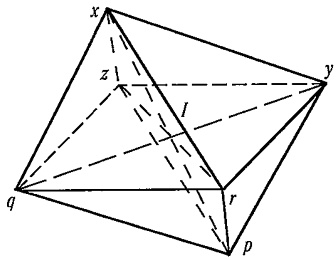

Figure 3.

5. Algèbres d'opérateurs et probabilités

A tout opérateur hermitien A et à tout état ψ, nous avons vu qu'on associe une mesure de probabilité m, suivant la formule

$$\langle \exp i\lambda A\psi, \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\lambda x) dm(x)$$

Il faut maintenant examiner ce qui se passe pour l'ensemble des opérateurs rassemblés dans une algèbre commutative.

On a vu que tous ces opérateurs apparaissent comme des fonctions de l'un d'entre eux : $F(A)$. Considérons alors un ensemble fini d'opérateurs commutant deux à deux. Ils sont de la forme : $F_1(A), \ldots, F_n(A)$. Ils engendrent une fonction caractéristique

$$\langle \exp[i\Sigma\lambda_k F_k(A)]\psi, \psi\rangle = \int \exp[i\Sigma\lambda_k F_k(x)] dm(x)$$

La mesure m définie par A possède donc dans l'algèbre un caractère universel. Cela signifie que, l'état ψ étant choisi , on peut effectivement représenter l'observable définie par $F_k(A)$ sous forme d'une variable aléatoire $F_k(x)$ où x a pour mesure de probabilité la mesure m.

Si A et B n'appartiennent pas à la même algèbre, ils n'admettent en général pas de représentation probabiliste commune. Ils appartiennent à deux espaces de probabilité différents, ce qui traduit le fait qu'ils n'ont pas la même signification physique (des dimensions différentes, au sens physique du mot dimension tel qu'il apparaît dans ce que l'on appelle les "équations aux dimensions"). Ce n'est pas la même mesure de probabilité qui opère dans l'algèbre A et dans l'algèbre de B.

La relation entre un opérateur associé à un ψ , et une probabilité peut être examinée du point de vue inverse. Etant donné une mesure de probabilité, peut-on trouver un couple (A, ψ) qui fournisse une probabilité distribuée conformément à cette mesure?

Il y a d'abord une réponse banale à cette question. Si on donne la fonction caractéristique

$$\varphi(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\lambda x) f(x) dx$$

(avec pour simplifier l'hypothèse qu'il y a une densité de probabilité), on peut écrire

$$f = \psi\bar{\psi}$$

oú ψ est l'une des racines carrées complexes de f. Cela met φ sous la forme

$$\varphi(\lambda) = \langle \exp i\lambda x\psi, \psi\rangle$$

Si ensuite on transforme ψ par une transformation unitaire T , on a

$$\varphi(\lambda) = \langle \exp i\lambda xT\psi, T\psi\rangle = \langle T^{-1} \exp i\lambda xT\psi, \psi\rangle$$

On a donc mis φ sous la forme souhaitée, avec un opérateur A de la forme

$$A = T^{-1} \exp i\lambda xT$$

6. Évolution temporelle

On considère le couple (A, ψ) composé d'un opérateur A et d'un état ψ. Grâce à sa fonction caractéristique $\langle e^{i\lambda A}\psi, \psi\rangle$, il a les propriétés d'une variable aléatoire. Comme ψ dépend du temps t, cette variable est une fonction aléatoire de t. Mais ce qui correspond à une grandeur physique, fonction du temps, c'est l'opérateur A. On peut donc se proposer de reporter sur A les propriétés d'évolution temporelle. Cette transposition sera une conséquence d'une remarque générale.

On donne deux états ψ, ψ' et un opérateur unitaire T qui change ψ en ψ' : $\psi' = T\psi$. Alors la loi de probabilité de A dans l'état ψ' est identique à celle de $B = T^{-1}AT$ dans l'état ψ. En utilisant les fonctions caractéristiques :

$$\langle e^{i\lambda A}\psi', \psi'\rangle = \langle e^{i\lambda B}\psi, \psi\rangle$$

On vérifie en effet sans difficulté, à l'aide de développements en série, que

$$e^{i\lambda T^{-1}AT} = T^{-1}e^{i\lambda A}T$$

On peut aussi remarquer que les deux fonctions

$$\chi_1 = e^{i\lambda T^{-1}AT}\psi \quad \text{et} \quad \chi_2 = T^{-1}e^{i\lambda A}T\psi$$

vérifient la même équation d'évolution

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\chi}{\partial\lambda} = T^{-1}AT\chi$$

avec la même condition initiale pour $\lambda = 0$

L'évolution temporelle de ψ est régie par l'équation de Schrödinger, qu'on peut écrire sous la forme, non explicitée,

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\phi}{\partial t} = H\psi$$

où H est un opérateur hermitien indépendant du temps. On met la solution sous la forme

$$\psi' = e^{itH}\psi$$

On met donc en évidence l'opérateur unitaire

$$T = e^{itH}$$

L'opérateur A dans l'état ψ' a la même loi de probabilité que

$$B = e^{-itH}Ae^{itH}$$

dans l'état ψ.

On peut alors calculer la dérivée par rapport au temps de B dans l'état ψ. En termes d'opérateur, elle correspond à la dérivée de la grandeur mécanique ou physique que représente A. On a donc

$$\frac{dA}{dt} = i(AH - HA)$$

Si par exemple A est la position x, $\dfrac{dA}{dt}$ est l'opérateur p qui représente la vitesse (la masse étant prise comme unité). Donc

$$p = i(xH - Hx)$$

Pour expliciter cette expression, on utilise la forme détaillée de l'opérateur de Schrödinger. L'équation de Schrödinger s'écrit

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{i}{h}V$$

(où V ne dépend pas de t). On a donc

$$H = -\frac{\hbar}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{h}V$$

On trouve que

$$xH - Hx = \hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

On est donc conduit à associer à la vitesse l'opérateur

$$p = -\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

C'est un résultat classique, utilisé depuis longtemps. Mais il mérite une discussion.

Ce qui apparaît, c'est une relation nécessaire entre l'équation de Schrödinger et l'opérateur vitesse. Divers moyens permettent, sinon de "démontrer" l'équation de Schrödinger, du moins de l'écrire, sa validité étant assurée par les conséquences qu'elle entraîne.

Elle peut résulter de considérations physiques sur les phénomènes ondulatoires. Pour l'écrire, il est plus simple de partir de l'équation de conservation de l'énergie pour un "point matériel" de vitesse u (et de masse unité) :

$$\frac{u^2}{2} + V(x) = E$$

Ensuite on remplace les grandeurs mécaniques par des opérateurs : E par $\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial t}$, et u par $-\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$. On obtient l'opérateur

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial t}$$

qui, appliqué à un état ψ fonctionnel, donne l'équation de Schrödinger.

Si donc on choisit comme point de départ la représentation de la vitesse par l'opérateur $-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, l'équation de Schrödinger en résulte (par un calcul formel).

On peut procéder à l'envers. C'est ce qui a été fait au début de ce paragraphe. On choisit une équation d'évolution de ψ. Si elle a la forme voulue, elle entraîne nécessairement la formule $p = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ qui n'a plus rien d'arbitraire.

La présence du nombre complexe i dans l'équation d'évolution est naturelle. Elle implique que l'opérateur d'évolution est unitaire. Il conserve $||\psi||$ sans aucun amortissement.

Références

[1] E. Arnous, *Quelques applications de la théorie des groupes continus au calcul des probabilités et à la mécanique quantique*, Thèse 19, Paris, 1946.

[2] E. Arnous, Revue Scientifique, n° 3273, 1947.

[3] J. Bass, *Moyennes et mesures en mécanique classique et en mécanique quantique*, Annales Institut H. Poincaré, n° 3, 1980.

[4] J. Bass, *Probability, pseudo-probability, mean values.* In “Wave particle duality”, Plenum Press, 1992.

[5] J. Bass, *Probabilités et pseudo-probabilités en mécanique quantique In “Courants, Amers et Écueils en microphysique”*, Fondation Louis de Broglie, Paris, 1993.

[6] L. de Broglie, *Les incertitudes d'Heisenberg et l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique*, Gauthier-Villars, Paris, 1982.

[7] F. Riesz et B. Sz. Nagy, *Leçons d'analyse fonctionnelle*, Budapest, 1953.

[8] Tomonaga,*Quantum mechanics*, North Holland, 1962.

[9] E. P. Wigner, *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium, Phys. Rev., 40, 1932.*

(Manuscrit reçu le 14 décembre 1994)