

Outils mathématiques pour l'équation de Schrödinger

J'ai écrit ces notes pour préparer et compléter le contenu d'un exposé que j'ai présenté à l'occasion des journées portes ouvertes du centre Borelli le 3 Septembre 2026. Cet exposé est destiné à présenter à la nouvelle promotion d'étudiant(e)s en début de L3 à l'ENS Paris-Saclay, quelques résultats marquants de mon domaine de recherche : l'analyse semiclassique.

Voici quelques sources pour la première partie :

- *Principles of variational mechanics* de Lanczos
- *Mathematical foundations of Quantum mechanics* de von Neumann,
- La série d'articles publiée par Schrödinger en 1926 (et dans lesquels il explique l'importance du formalisme de Hamilton pour lui permettre d'aboutir à son équation).
- La présentation historique que l'on trouve au début de la thèse de de Broglie (1924).
- Une série de lettres tirées des correspondances de Fermat.

Pour la deuxième partie, qui est une présentation succincte d'un cas particulier du théorème d'Egorov (1969), je me suis principalement appuyé sur les notes de cours d'analyse semiclassique de Stéphane Nonnenmacher¹ ; j'ai suivi quasiment au mot près sa démonstration.

Introduction

L'**analyse semiclassique** est un domaine des mathématiques qui s'intéresse, historiquement à l'équation de Schrödinger, mais aussi plus généralement à des équations d'ondes (acoustiques, électromagnétiques, etc.) à haute fréquence. L'une des caractéristiques principales de l'analyse semiclassique est qu'elle relie les **solutions d'équations d'onde** (que l'on peut voir comme des phénomènes continus, qui font intervenir des oscillations rapides et des comportements en apparence complexes) à des objets limites beaucoup plus simples, et dépourvus d'oscillations, qui sont des **trajectoires d'une certaine équation différentielle**. On dit qu'il y a un *principe de correspondance* entre l'objet ondulatoire et les trajectoires associée.

L'un des exemples les plus célèbres en est le principe de correspondance entre mécanique quantique et mécanique classique. Le nom "analyse semiclassique" vient d'ailleurs historiquement de cet exemple : *classique* fait référence à la mécanique classique Newtonienne, par opposition à la mécanique quantique. Un système quantique "semiclassique" est un système de grande taille, dont le comportement est presque classique, et pour lequel les prédictions de la mécanique quantique ne diffèrent que marginalement de celles de la mécanique classique.

Une jolie formulation mathématique de ce principe est le **théorème d'Egorov**, établi en 1969.² Le but de cet exposé est de présenter ce théorème.

D'abord, soulignons que le principe de correspondance répond à une intuition immédiate : si les équations de la mécanique quantique sont une version "plus précise" des équations de Newton, et compte tenu de la quantité de phénomènes que les équations de Newton décrivent

1. <https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~stephane.nonnenmacher/enseign/Course-Semiclassical-Analysis2025-total.pdf>

2. Yuri Vladimirovich Egorov "The canonical transformations of pseudodifferential operators", *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* 24.5 (1969) : 235-236.

de manière presque parfaite (mouvement d'un projectile, des planètes), il faut nécessairement que la mécanique quantique reproduise quasiment à l'identique ces prédictions. Bien sûr, les physiciens ont toujours été convaincus de l'existence de cette correspondance (bien avant le résultat d'Egorov) ; il se trouve qu'elle est directement au coeur de la découverte même par Schrödinger de son équation, et je vous propose de commencer par découvrir, exactement 100 ans après lui (son équation fut publiée dans une série d'articles de 1926), l'équation qui porte son nom.

1 Découvrir l'équation de Schrödinger (100 ans plus tard)

Pour comprendre comment Schrödinger a pu découvrir son équation, ou plus exactement, les indices qui ont pu le mettre sur la bonne piste, nous allons voir qu'il fallait disposer d'une certaine culture de l'histoire des mathématiques, notamment le principe de Fermat, et le principe de moindre action. Nous commençons par le premier.

1.1 Le principe de Fermat

Dans une correspondance avec un certain Marin Cureau de La Chambre, Pierre de Fermat conteste la démonstration par Descartes des lois de la réfraction (bien que celles-ci soient déjà bien vérifiées expérimentalement, et malgré la réputation de Descartes). Contrairement à Descartes, il considère que que dans un milieu plus dense, la lumière doit se propager plus lentement (il a raison) ; il est d'autre part peu convaincu par les arguments de Descartes, qui supposent une tendance naturelle de la lumière à continuer son mouvement ou au contraire accélérer dans telle ou telle direction. Lui et son correspondant M. de la Chambre s'accordent au moins sur un point :

La nature agit toujours par les voies les plus courtes

Fermat, Lettre à Monsieur de la chambre (1662).

Après quelques lettres, Fermat, triomphant, annonce à M. de la Chambre avoir résolu le problème : ce principe de parcimonie de la nature mène effectivement, par déduction logique, à la prédiction de la réfraction, et ce, exactement par les formules de Descartes !

Voici une analogie très célèbre pour expliquer son raisonnement : imaginez que vous êtes sur la plage et que quelqu'un dans l'eau se noie et vous appelle à l'aide. Son temps est compté, il faut que vous l'atteigniez aussi vite que possible. Plutôt que d'aller en ligne droite, le plus rapide est d'adopter une trajectoire en ligne brisée, qui passe plus longtemps sur la plage, où vous pouvez courir rapidement, et moins longtemps dans l'eau, où vous nagez lentement (voir Figure 1). En notant v_1/v_2 vos vitesses dans l'eau/l'air, et i_1/i_2 les angles que votre trajectoire dans l'eau/l'air fait avec la normale à l'interface, le trajet optimal vérifie,

$$v_1 \sin(i_1) = v_2 \sin(i_2)$$

(bel exercice !) Remplacez v_1/v_2 par les vitesses de la lumière dans l'air/l'eau, et divisez par c la vitesse de la lumière dans le vide : vous obtenez la célèbre relation de Snell-Descartes

$$n_1 \sin i_1 = n_2 \sin i_2$$

où $n_1 = \frac{v_1}{c}$, $n_2 = \frac{v_2}{c}$ sont les indices de réfraction de la lumière dans l'air et l'eau.

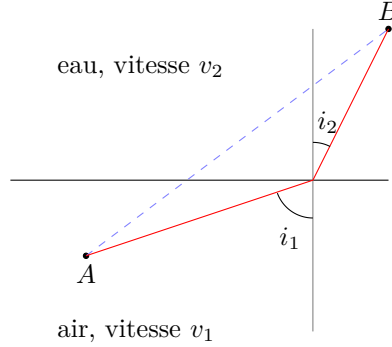


FIGURE 1 – Une trajectoire en ligne brisée permet d’atteindre plus rapidement le point B qu’en ligne droite, en profitant de la vitesse de déplacement plus élevée dans l’air que dans l’eau.

1.2 Le principe de moindre action

Frappés par l’élégance du principe de Fermat, des mathématiciens ont cherché à obtenir une interprétation similaire des équations de la mécanique. Cette idée est généralement attribuée à Maupertuis, et a été formulée de manière complète notamment suite aux travaux de Lagrange, Euler et Hamilton. On choisit une description de la configuration du système physique par un vecteur $q \in \mathbb{R}^d$, où d représente le nombre de degrés de liberté du système. Pour une particule évoluant dans l’espace, on peut choisir $q \in \mathbb{R}^3$ avec par exemple les coordonnées cartésiennes x, y, z , ou les coordonnées sphériques r, θ, φ . Pour une masse accrochée à un fil se balançant dans un plan, il suffit d’un seul degré de liberté : la configuration du système est décrite par un angle $\theta \in \mathbb{R}$.

Une fois introduite la paramétrisation des configurations du système, on définit une fonction

$$L : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, \quad (x, \dot{x}) \mapsto L(x, \dot{x})$$

nommée “Lagrangien”, et qui est la différence entre l’énergie cinétique et l’énergie potentielle. L’expression du Lagrangien dépend des coordonnées choisies. En coordonnées cartésiennes, pour un système mécanique de masse m soumis uniquement à des forces conservatives $F = -\nabla V$, associées à un potentiel V , le lagrangien s’écrit³

$$\forall x, \dot{x} \in \mathbb{R}^d, \quad L(x, \dot{x}) := \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - V(x), \quad |a| := \sqrt{a_1^2 + \dots + a_d^2}.$$

Le Lagrangien représente l’excès d’énergie cinétique par rapport à l’énergie potentielle, il faut le voir comme un “coût” que la nature chercherait à minimiser.

Soit $q : [t_1, t_2] \rightarrow \mathbb{R}^d$ une fonction (régulière) représentant une trajectoire possible de notre système mécanique, *pas nécessairement la trajectoire effectivement suivie par notre système dans la réalité*. On définit la quantité d’*action* de la trajectoire q par⁴

$$A(q) := \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t)) dt.$$

Le *principe de moindre action* est le suivant :

3. la notation traditionnelle utilise x et $\dot{x}$ pour désigner les deux arguments de L , mais dans cette définition, $\dot{x}$ est à comprendre comme une variable indépendante de x (ne pas confondre avec une dérivée)

4. Cette fois (et c’est toujours la notation traditionnelle...) $\dot{q}(t) := \frac{dq}{dt}(t)$ désigne la dérivée de q .

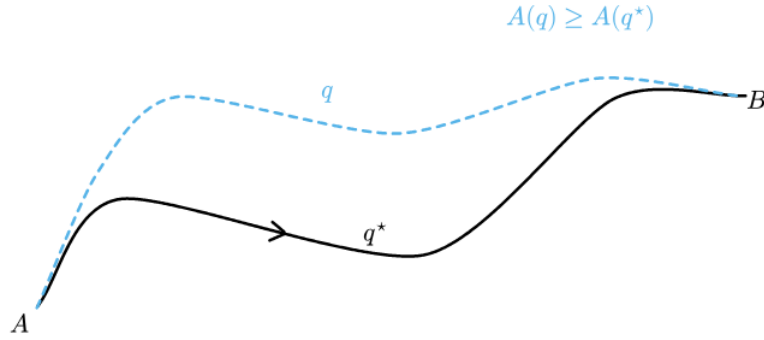


FIGURE 2 – Le principe de moindre action

*Principe de moindre action (voir Figure 2) :*⁵

La trajectoire physique, notée q^ , vérifie $A(q^*) \leq A(q)$ pour toute autre trajectoire régulière $q : [t_1, t_2] \rightarrow \mathbb{R}^d$ telle que $q(t_1) = q^*(t_1)$ et $q(t_2) = q^*(t_2)$.*

L'interprétation de ce principe est la suivante : $A(q)$ désigne en quelque sorte la quantité d'efforts qu'a dû déployer la nature pour faire suivre la trajectoire $q(t)$ au système physique. S'il existait une autre trajectoire que q^* partant et arrivant aux mêmes points, mais demandant moins d'action, la nature aurait privilégié celle-ci. La nature choisit toujours une trajectoire aussi économique que possible pour aller d'un point A à un point B , elle ne "gaspille" jamais d'action.

Remarque. Nous allons voir que le principe de moindre action, associé à des conditions initiales, détermine complètement l'évolution du système : c'est une formulation de la dynamique classique équivalente aux équations de Newton. Outre son élégance, l'un des aspects importants de cette formulation est son invariance vis-à-vis des coordonnées : l'action est minimale pour la trajectoire réelle, et cette propriété de minimalité ne requiert aucun choix de coordonnées pour être exprimée.

L'invariance par rapport aux coordonnées a joué un rôle important dans l'histoire des mathématiques (par exemple pour la théorie des variétés) et de la physique (notamment pour la théorie de la relativité). Pour plus de détails, voir le livre de Lanczos cité plus haut.

Théorème (Euler–Lagrange). La trajectoire physique q^* vérifie l'équation d'Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(q^*(t), \dot{q}^*(t)) = \frac{\partial L}{\partial x}(q^*(t), \dot{q}^*(t)).$$

Exemple. Dans le cas du Lagrangien $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - V(x)$, et donc l'équation d'Euler-Lagrange s'écrit

$$\frac{d}{dt}(m\dot{q}^*) = -\nabla V(q^*) \implies m\ddot{a} = \vec{F}.$$

On obtient, comme annoncé, les équations de Newton (et on peut montrer l'implication réciproque : les lois de Newton entraînent le principe de moindre action).

5. Physiquement, ceci n'est vrai que pour t_2 assez proche de t_1 . Mais en général, la trajectoire est un point critique de l'action, pas nécessairement un minimum (il existe un contre-exemple célèbre considérant le rebond d'une balle sur un miroir sphérique montrant que l'action n'est pas toujours minimale).

Idée de la démonstration. Supposant que q^* est la trajectoire minimisant l'action, on considère la petite variation $q + \varepsilon h$, pour $\varepsilon \in \mathbb{R}$, où $h : I \rightarrow \mathbb{R}^d$ est une fonction régulière telle que $h(a) = h(b) = 0$. Les trajectoires q^* et q partent et arrivent aux mêmes points, donc le principe de moindre action assure que

$$A(q^*) \leq A(q^* + \varepsilon h) \quad \text{pour tout } \varepsilon \in \mathbb{R}.$$

Un développement limité et une intégration par partie (avec les termes de bord nuls grâce à $h(a) = h(b) = 0$) montrent que

$$\begin{aligned} A(q^* + \varepsilon h) - A(q^*) &= \int_{t_1}^{t_2} L(q^* + \varepsilon h, \dot{q}^* + \varepsilon \dot{h}) - L(q^*, \dot{q}^*) dt \\ &= \varepsilon \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial x}(q^*, \dot{q}^*) h + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(q^*, \dot{q}^*) \dot{h} dt + O(\varepsilon^2) \\ &= \varepsilon \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial x}(q^*, \dot{q}^*) - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(q^*, \dot{q}^*) \right\} h dt + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

En prenant ε suffisamment petit et positif ou négatif, on en déduit que

$$\int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial x}(q^*, \dot{q}^*) - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(q^*, \dot{q}^*) \right\} h(t) dt = 0$$

ce qui n'est possible que si le terme entre accolades s'annule pour tout $t \in [t_1, t_2]$. $\square$

1.3 Flot Hamiltonien

Avant de quitter le monde classique, nous aurons besoin pour la suite de définir le “flot hamiltonien”; cet objet, et les relations qu'il vérifie, nous seront utiles dans la partie suivante, pour expliquer le théorème d'Egorov.

Comme on le sait (si le Lagrangien est suffisamment régulier) la donnée de $q(t)$ et $\dot{q}(t)$ à n'importe quel instant t détermine de manière unique toute la trajectoire du système mécanique (conséquence des équations d'Euler-Lagrange et du théorème de Cauchy-Lipschitz). L'état du système est donc entièrement déterminé par ses coordonnées *position-vitesse* $(q, \dot{q})$. Mais il existe une “meilleure” façon de paramétrer l'espace des états, en utilisant des variables dites *canoniquement conjuguées*, x et ξ . La définition adéquate de la variable ξ dépend du Lagrangien et des coordonnées choisies pour représenter la configuration q de notre système. Dans le cas particulier qui nous intéresse, à savoir $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - V(x)$, la variable ξ est définie comme la quantité de mouvement, ou impulsion,

$$\xi := m\dot{x}.$$

On définit également le hamiltonien⁶

$$p(x, \xi) := \frac{|\xi|^2}{2m} + V(x)$$

(on reconnaît l'énergie cinétique + potentielle). Dans la suite, on considère une trajectoire physique, notée plutôt $(x(t), \dot{x}(t))$ (et non plus $q(t), \dot{q}(t)$), et on pose $\xi(t) := m\dot{x}(t)$ son impulsion. On note $x_0 := x(0)$, $\xi_0 := \xi(0)$ les conditions initiales en position et impulsion.

6. Il serait souhaitable de le noter $H(x, \xi)$, en hommage à Hamilton, mais nous devons utiliser des minuscules pour les quantités classiques (et des majuscules pour leur version quantique), et la lettre h est réservée dans la suite au petit paramètre semiclassique.

Corollaire (Système Hamiltonien). *Les fonctions $x(t)$ et $\xi(t)$ sont solutions du système Hamiltonien*

$$\begin{cases} \dot{x}(t) &= \frac{\partial p}{\partial \xi}(x(t), \xi(t)) \\ \dot{\xi}(t) &= -\frac{\partial p}{\partial x}(x(t), \xi(t)) \\ (x(0), \xi(0)) &= (x_0, \xi_0). \end{cases} \quad (1)$$

Remarque (Symétrie symplectique). *Le fait que le couple position-impulsion soit “meilleur” que le couple position-vitesse pour paramétrer l’espaces des états du système, tient à la symétrie fondamentale que prennent les équations d’Euler-Lagrange dans ces nouvelles coordonnées. Cette symétrie, que l’on voit ici avec les variables x et ξ entremêlées et le signe “−” uniquement sur la deuxième ligne, porte le nom de symétrie symplectique. Il existe une branche de la géométrie différentielle qui est centrée sur cette symétrie : la géométrie symplectique.*

Remarque (Construction générale du Hamiltonien). *Pour des Lagrangiens plus généraux que $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - V(x)$, il existe une construction générale de la variable conjuguée ξ et du Hamiltonien $p(x, \xi)$, que nous résumons brièvement ici. Étant donné un Lagrangien $L(x, \dot{x})$, on considère l’application $\Phi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ définie par*

$$\Phi(x, \dot{x}) := \left(x, \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}(x, \dot{x}) \right) =: (x, \xi(x, \dot{x}))$$

et on fait l’hypothèse (vérifiée par les systèmes physiques habituels) que Φ est un difféomorphisme. On note alors

$$\Phi^{-1} : (x, \xi) \mapsto (x, \dot{x}(x, \xi))$$

sa réciproque. Dans le cas particulier où $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - V(x)$, on vérifie que ces définitions mènent bien à la relation $\xi = m\dot{x}$. Mais de manière plus générale, ξ n’est pas toujours la quantité de mouvement. On peut s’en convaincre par exemple en écrivant le Lagrangien précédent en coordonnées polaires $(r, \theta), (\dot{r}, \dot{\theta})$ pour constater que le moment conjugué aux variables $q = (r, \theta)$, noté $\xi = (\xi_r, \xi_\theta)$, vérifie

$$\dot{r} = \frac{\xi_r}{m}, \quad \dot{\theta} = \frac{\xi_\theta}{mr^2}$$

(noter que $\xi((r, \theta), (\dot{r}, \dot{\theta}))$ dépend donc ici des coordonnées de position $q = (r, \theta)$, et pas seulement de leurs dérivées $\dot{q} = (\dot{r}, \dot{\theta})$).

La définition générale du Hamiltonien $p : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ est

$$p(x, \xi) := \dot{x}\xi - L(x, \dot{x})$$

où $\dot{x} = \dot{x}(x, \xi)$ selon la définition précédente. Pour le cas particulier du Lagrangien $L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - V(x)$, en utilisant que $\dot{x} = \frac{\xi}{m}$, on obtient donc bien le Hamiltonien

$$p(x, \xi) = \dot{x}\xi - \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 + V(x) = \frac{|\xi|^2}{2m} + V(x),$$

mais notre définition s’applique aussi pour un lagrangien L plus général.

Le procédé que nous venons de décrire, qui associe la fonction p à la fonction L , est connu sous le nom de transformée de Legendre. Cette opération a la remarquable propriété d’être involutive (la transformée de Legendre du Hamiltonien est donc égale au Lagrangien). Avec ces définitions, le résultat du théorème précédent est encore vrai. Nous recommandons au lecteur/à la lectrice de trouver les jolies (et courtes) démonstrations de toutes les affirmations contenues dans cette remarque.

La donnée de (x_0, ξ_0) détermine une unique trajectoire $(x(t), \xi(t))_{t \in \mathbb{R}}$, (d'après le théorème de Cauchy-Lipschitz), ce qui permet de poser la définition suivante

Définition (Le flot Hamiltonien). Pour tout $t \in \mathbb{R}$, on note $\phi_t^p : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ l'application définie par

$$\phi_t^p(x_0, \xi_0) := (x(t), \xi(t))$$

où $t \mapsto x(t), \xi(t)$ sont les solution du système (1).

Le flot Hamiltonien ϕ_t^p est donc l'application qui propage la condition initiale (x_0, ξ_0) pendant un temps t en suivant la trajectoire définie par le système (1).

Proposition (Propriétés du flot Hamiltonien). *Le flot ϕ_t^p vérifie les propriétés suivantes :*

1. $\phi_0^p = \text{Id}_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d}$ et $\phi_t^p \circ \phi_s^p = \phi_{t+s}^p$.
2. Pour toute fonction régulière $a : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, on a

$$\frac{d}{dt}(a \circ \phi_t^p) = \{p, a\} \circ \phi_t^p$$

où $\{\cdot, \cdot\}$ est le crochet de poisson

$$\{f, g\} := \frac{\partial f}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial g}{\partial \xi}$$

avec $\frac{\partial f}{\partial x} = (\partial_{x_1} f, \dots, \partial_{x_d} f) \in \mathbb{R}^d$, et une définition analogue pour $\frac{\partial f}{\partial \xi}$.

3. On a $p \circ \phi_t^p = p$ pour tout $t \in \mathbb{R}$. Ainsi,

$$p(x(t), \xi(t)) = p(x_0, \xi_0);$$

autrement dit, le Hamiltonien est conservé le long d'une trajectoire.

Démonstration. Démonstration

1. Conséquences immédiates de la définition.
2. On applique la règle de la dérivation composée et les équations de Hamilton (en étant volontairement un peu "flexible" sur les notations pour éviter la lourdeur)

$$\frac{d}{dt}a \circ \phi_t^p = \frac{d}{dt}a(x(t), \xi(t)) = \frac{\partial a}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial a}{\partial \xi} \dot{\xi} = \frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial \xi} - \frac{\partial a}{\partial \xi} \frac{\partial p}{\partial x} = \{p, a\} \circ \phi_t^p.$$

3. Cela résulte du point précédent et du fait que $\{p, p\} = 0$. □

1.4 L'équation de Schrödinger

Dans les sections précédentes, on a vu que l'optique géométrique et la mécanique Newtonienne peuvent être décrites par un principe de moindre action. L'analogie peut être poussée jusqu'au bout : ces deux théories peuvent être écrites à l'aide du formalisme hamiltonien, seul l'expression particulière du Lagrangien diffère.⁷ C'est par une présentation de cette analogie que commence l'un des articles de Schrödinger⁸ pour présenter sa nouvelle équation, en précisant que cette comparaison n'a rien de nouveau :

7. Pour l'optique, le hamiltonien est donné par $p(x, \xi) = -\sqrt{|\xi|^2 - n(x)}$ où $n(x)$ est l'indice de réfraction du milieu au point x .

8. E. Schrödinger. "An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules." *Physical review* 28.6 (1926), 1049.

“All this was very much better known to Hamilton himself than it is in our day to a good many physicists”

Mais, comme il le remarque ensuite, il existe de nombreux phénomènes optiques qui sont inexpliqués par la théorie géométrique de la lumière : pour comprendre les interférences, on doit recourir à la description de la lumière en temps qu’onde. Nous sommes maintenant prêts à apprécier le génial saut conceptuel de Schrödinger, qui consiste à pousser l’analogie jusqu’au bout, et donc à chercher une *théorie ondulatoire de la mécanique*. Dans ses propres mots :

“Now compare with these considerations the very striking fact, of which we have today irrefutable knowledge, that ordinary mechanics is really not applicable to mechanical systems of very small size, viz. of atomic dimensions. Taking into account this fact, which impresses its stamp upon all modern physical reasoning, is one not greatly tempted to investigate whether the non-applicability of ordinary mechanics to micro-mechanical problems is perhaps of exactly the same kind as the non-applicability of geometrical optics to the phenomena of diffraction or interference and may, perhaps, be overcome in an exactly similar way ?”⁹

Schrödinger aboutit à l’équation suivante pour une particule *non-relativiste* dans $\mathbb{R}^d$, de masse m soumise à un potentiel V :

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\psi(t, x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(t, x) + V(x)\psi(t, x) \\ \psi(0, x) &= \psi_0(x) \end{cases} \quad (2)$$

Dans cette équation :

- i est le nombre complexe imaginaire usuel.
- $\hbar$ est la constante de Planck réduite, i.e., $\frac{h}{2\pi}$ où $h \approx 6.626 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-1}$ est la constante de Planck, homogène à énergie $\times$ temps, i.e., à une action (c’est le “quantum d’action”).
- $\psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ est une fonction à *valeurs complexes* suffisamment régulière et décroissante à l’infini (nous restons volontairement vagues sur ce point), les coordonnées $t \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^d$ représentant le temps et l’espace, respectivement. Dans la suite, on notera souvent $\psi(t)$ la fonction $x \mapsto \psi(t, x)$.

On la nomme la *fonction d’onde* de la particule. Elle décrit complètement l’état de la particule, de la même manière que les coordonnées $(x, \xi) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ décrivaient complètement l’état d’un système en mécanique classique. Autrement dit, la fonction d’onde ψ contient *toutes* les informations sur la particule qu’il est possible d’obtenir. On passe donc d’une description avec un nombre fini de degrés de liberté (en mécanique classique), à une description par un élément d’un espace vectoriel de dimension infinie.

Étant vue comme une onde, la particule, n’a pas de “position” ou “d’impulsion” bien définie (de même que cela n’a pas de sens d’associer une position précise à des vagues sur l’eau, bien qu’il puisse y avoir des endroits avec plus de vagues que d’autres).

On peut effectuer des mesures sur la particule, mais les résultats obtenus seront aléatoires. La fonction d’onde ψ permet de décrire la distribution de probabilité de ces résultats via le formalisme de von Neumann, que nous présentons ci-dessous. Par exemple, il est

9. Comparons maintenant ces considérations au fait très frappant, dont nous avons aujourd’hui une certitude irréfutable, selon lequel la mécanique classique n’est réellement pas applicable aux systèmes mécaniques de très petite taille, c’est-à-dire de dimensions atomiques. Compte tenu de ce fait, qui marque de son empreinte tout raisonnement de physique moderne, la tentation n’est-elle pas grande d’étudier l’hypothèse selon laquelle l’inapplicabilité de la mécanique classique aux problèmes de micromécanique serait exactement du même ordre que l’inapplicabilité de l’optique géométrique aux phénomènes de diffraction ou d’interférence, et si elle ne pourrait pas, peut-être, être surmontée d’une manière tout à fait similaire ?

assez connu que $|\psi(x)|^2 dx$ s'interprète comme la distribution de probabilité de présence de la particule (i.e., la particule a plus de probabilité d'être détectée là où ψ est grande en module). Mais attention : la fonction d'onde ψ renferme plus d'informations sur la particule que seulement sa densité de probabilité de présence, voir ci-après.

- Δ est le “Laplacien”, défini par

$$\Delta := \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2}{\partial x_d^2}.$$

C'est l'un des opérateurs les plus fondamentaux de la théorie des équations aux dérivées partielles.

- $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction à valeurs réelles “suffisamment régulière et intégrable” (là encore, nous resterons volontairement vague). Dans le cas où ψ décrit un électron soumis à une interaction électrique avec un proton situé en y , en dimension 3, on prend $V(x) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0|x-y|}$ le potentiel de Coulomb (mais en toute rigueur, la description de la molécule doit être faite par une fonction d'onde de “toute la molécule” qui vérifie une équation de Schrödinger où V contient tous les termes d'interactions entre les différentes particules constituant la molécule).
- ψ_0 est une condition initiale, qui décrit l'état de la particule au temps $t = 0$. Il existe des techniques expérimentales pour “préparer” des particules dans un état initial connu. La condition initiale étant connue, et sous des hypothèses adéquates sur V (vérifiées par exemple pour un potentiel coulombien), la solution ψ de l'équation est entièrement déterminée par le système (2)¹⁰ : l'équation de Schrödinger décrit une évolution *déterministe* ! Le caractère aléatoire de la théorie quantique ne se manifeste qu'au moment de l'interaction d'un système quantique avec un observateur effectuant des mesures. Pour expliquer ce point, nous allons présenter le formalisme classique, souvent appelé “interprétation de Copenhague”, et tel que présenté sous forme axiomatique par von Neumann dans un livre datant de 1932.

1.5 Le théorème spectral

La formulation de von Neumann fait explicitement appel à la théorie spectrale des opérateurs auto-adjoints dans les espaces de Hilbert, et nous commençons donc par la présenter brièvement ici. En résumé, il s'agit d'une généralisation (significative) du théorème de diagonalisation des matrices symétriques réelles en base orthonormée de vecteurs propres.

Définition (Espace de Hilbert). Un *espace de Hilbert* est un espace vectoriel normé $(\mathcal{H}, \|\cdot\|_{\mathcal{H}})$ *complet* (généralement de dimension infinie), et dont la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ est issue d'un *produit scalaire* $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$.

En physique quantique, l'espace de Hilbert est un espace de *fonctions*, très souvent $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^d)$, dont nous ne donnons pas la définition exacte, mais dont le produit scalaire est défini par

$$\langle f, g \rangle_{L^2} := \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \overline{g(x)} dx.$$

10. Ceci découle, par exemple, du fait que l'opérateur $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ est “essentiellement auto-adjoint”, ce qui a été démontré par Kato en 1951. La solution ψ peut alors s'écrire $\psi(t, \cdot) = e^{i\frac{t}{\hbar}\overline{H}}\psi_0(t, \cdot)$, où $\overline{H}$ est l'unique extension auto-adjointe de H , et où l'exponentielle d'un opérateur auto-adjoint est définie par calcul fonctionnel à l'aide du théorème spectral.

À chaque instant t , la fonction d'onde $\psi(t) = \psi(t, \cdot)$ est un élément de l'espace de Hilbert, et la condition initiale ψ_0 aussi.

La notion de matrice symétrique réelle se généralise de la manière suivante sur les espaces de Hilbert :

Définition (Opérateur auto-adjoint). Un opérateur linéaire $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, continu pour la norme $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ est *auto-adjoint* s'il vérifie

$$\langle Af, g \rangle = \langle f, Ag \rangle \quad \text{pour tout } f, g \in \mathcal{H}.$$

Pour énoncer une version simple du théorème spectral, nous introduisons une hypothèse supplémentaire de “compacité”. Sa définition, que nous indiquons ci-dessous pour éviter d'être trop vague, importe peu pour la suite, d'autant plus que le théorème se généralise à tous les opérateurs linéaires auto-adjoints bornés (et même les opérateurs dits “non-bornés”, comme l'opérateur $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ de l'équation de Schrödinger). Disons seulement que la compacité assure que l'on puisse tout formuler en termes de valeurs propres, tandis qu'en général, il faudrait recourir à la notion plus délicate de spectre continu.

Définition (Opérateur compact). Un opérateur $K : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ est dit *compact* si pour toute suite $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ bornée d'éléments de $\mathcal{H}$, la suite $(K\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ admet une sous-suite convergente dans $\mathcal{H}$.¹¹

Théorème (Théorème spectral). Soit $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un opérateur linéaire borné, auto-adjoint, compact, et défini-positif (i.e., $\langle Au, u \rangle > 0$ pour tout $u \in \mathcal{H}$). Alors il existe une suite $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ d'éléments de $\mathcal{H}$, et une suite décroissante $(\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de réels strictement positifs convergeant vers 0, tels que

- Pour tout $n \in \mathbb{N}$, $A\psi_n = \lambda_n\psi_n$ (on dit que ψ_n est une “fonction propre” de A , et λ_n la valeur propre associée)
- Toute fonction $\psi \in \mathcal{H}$ s'écrit de manière unique comme combinaison linéaire infinie (convergente) des ψ_n

$$\psi = \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle \psi, \psi_n \rangle_{\mathcal{H}} \psi_n \quad \text{pour tout } \psi \in \mathcal{H},$$

et on a la formule de Parseval

$$\|\psi\|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{n \in \mathbb{N}} |\langle \psi, \psi_n \rangle|^2$$

et plus généralement,

$$\langle \psi, \varphi \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{n \in \mathbb{N}} \langle \psi, \psi_n \rangle \overline{\langle \varphi, \psi_n \rangle} \quad \text{pour tout } \psi, \varphi \in \mathcal{H}.$$

Ce théorème (et ses généralisations) est démontré dans de nombreuses références standard de théorie spectrale. Son histoire est complexe ; signalons simplement que Hilbert a joué un rôle important entre 1900 et 1910 dans sa découverte, au cours de ses travaux sur les “équations intégrales”, sous l'impulsion notable de Fredholm¹².

11. Remarquons que l'identité $\text{Id} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ est compacte si et seulement si $\mathcal{H}$ est de dimension finie (c'est une conséquence du théorème de Riesz sur la compacité de la boule unité dans un espace de Banach).

12. voir <https://www.jstor.org/stable/2319079?seq=9>

1.6 Le formalisme de von Neumann

Dans le formalisme de von Neumann, l'évolution d'un système quantique est décrite à l'aide d'un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ et d'un hamiltonien quantique $P : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ *auto-adjoint* ($\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ et $P = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ pour une particule dans un potentiel V). À chaque instant t , l'état du système quantique est défini par un élément $\psi(t) \in \mathcal{H}$. La condition initiale $\psi_0 \in \mathcal{H}$ est un état normalisé $\|\psi_0\|_{\mathcal{H}}^2 = 1$. L'évolution $t \mapsto \psi(t)$ de l'état quantique, et la relation qu'il entretient avec nos observations, est décrite par les axiomes suivants (et une généralisation adéquate dans le cas des opérateurs non compacts).

- Tant que la particule n'est pas *observée*, ou *mesurée*, l'évolution de $\psi(t)$ est gouvernée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi = P\psi$$

Il en découle que $\psi(t, \cdot)$ reste toujours de norme 1, puisque

$$\frac{d\|\psi(t)\|^2}{dt} = \langle \partial_t \psi, \psi \rangle + \langle \psi, \partial_t \psi \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\langle P\psi, \psi \rangle - \langle \psi, P\psi \rangle) = 0.$$

- À toute mesure correspond à un opérateur auto-adjoint A , appelé *observable quantique*.
- Les résultats possibles d'une mesure sont les valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ de l'opérateur A (s'il est compact), et plus généralement, son des éléments de son "spectre" (qui peut être un continuum).
- Le résultat d'une mesure est aléatoire et, en général, impossible à prédire exactement même en connaissant parfaitement l'état $\psi(t)$ juste avant la mesure. La probabilité d'observer le résultat λ_n est donnée par¹³

$$\mathbb{P}_A(\text{résultat observé} = \lambda_n) = |\langle \psi, \psi_n \rangle|^2$$

L'espérance du résultat observé est donc

$$\mathbb{E}_A(\text{résultat observé}) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n |\langle \psi, \psi_n \rangle|^2 = \sum_{n \in \mathbb{N}} \lambda_n \langle \psi, \psi_n \rangle \overline{\langle \psi, \psi_n \rangle} = \langle A\psi, \psi \rangle$$

- Immédiatement après une mesure à l'instant t (toujours si A est compact), si le résultat observé est λ_n , alors l'état quantique change brutalement en

$$\psi(t + dt, \cdot) := \frac{\langle \psi, \psi_n \rangle}{|\langle \psi, \psi_n \rangle|} \psi_n$$

(c'est d'ailleurs l'une des façons de préparer une particule dans une condition initiale connue).

Exemple. *Intuitivement, on peut reformuler les choses comme ceci. Supposez que vous connaissez la fonction d'onde $\psi(t)$ d'une particule. Quelqu'un s'apprête à mesurer son énergie à l'aide de l'appareil de mesure dédié. En général, vous ne pouvez pas deviner à coup sûr le résultat que l'appareil va afficher (la mesure va produire un résultat aléatoire) mais vous pouvez prédire les différents résultats possibles et leurs probabilités grâce à votre connaissance de ψ .*

Pour cela, il vous suffit de vous procurer l'opérateur auto-adjoint $A_{\text{énergie}}$ correspondant à la mesure qui va être effectuée, en l'occurrence, $A_{\text{énergie}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$. Vous cherchez ses fonctions propres définies par le théorème spectral, $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ et ses valeurs propres $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$. Vous savez alors que le résultat sera l'un des nombres λ_i , avec la probabilité $|\langle \psi, \psi_i \rangle|^2$.

13. on néglige ici le cas où la valeur propre est multiple

Par exemple, votre fonction d'onde pourrait être donnée par

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2.$$

Dans ce cas, il y a une chance sur deux que l'énergie mesurée soit λ_1 , et une chance sur deux qu'elle soit λ_2 (et probabilité 0 pour tous les autres valeurs propres). Si la mesure a donné le résultat λ_1 , le nouvel état de la particule est désormais dans l'état $\psi(t + dt) = \psi_1$ (et ψ_2 si l'énergie observée était λ_2)

Le dernier axiome est souvent formulé en disant que la fonction d'onde ψ est “projetée” sur l'un des états propres de A ; on parle aussi de “l'effondrement du paquet d'onde”. On voit donc que l'évolution de l'état quantique alterne entre une succession de deux types radicalement différents d'évolution (i) déterministe, continue, réversible, gouvernée par l'équation de Schrödinger, et (ii) aléatoire, discontinue, irréversible, gouvernée par le spectre de l'opérateur associé à la mesure effectuée. Ces deux modes d'évolutions sont incompatibles : lors d'une observation, le système **cesse** d'obéir à l'équation de Schrödinger. Dans l'expérience des fentes de Young, appliquée à des particules quantiques (photons, électrons, atomes) projetées une par une, on observe une figure d'interférences analogue à celle obtenue avec de la lumière, mais la figure de diffraction est systématiquement détruite si le dispositif expérimental inclut une mesure sur chaque particule pour déterminer par quelle fente elle est passée (on obtient alors deux tâches d'ombres en face des fentes, sans interférences).

Remarque (Le problème épistémologique de la mesure). *Se pose alors un problème épistémologique majeur quant à la délimitation des deux modes d'évolution décrits précédemment : comment différencier a priori, parmi toutes les interactions quantiques imaginables, celles qui doivent être considérées comme des mesures et celles qui ne doivent pas l'être ?*

Par exemple, pour mesurer le *spin* d'un électron, la méthode classique met en jeu une interaction avec un champ magnétique. A priori, cette interaction pourrait aussi être décrite par l'équation de Schrödinger. Mais d'après la théorie précédente, ce n'est pas ce qui a lieu : lorsqu'on effectue une mesure de *spin* sur un électron, il est **impossible** de décrire le comportement de son état seulement à partir de l'équation de Schrödinger : la projection de la fonction d'onde doit être prise en compte, et ne peut pas découler, comme on aurait pu l'espérer, d'une sorte d'effet “boule de neige”, déterministe mais trop difficile à calculer, résultant des nombreuses interactions de l'électron avec toutes les particules constituant l'appareil de mesure. Cette impossibilité vient notamment du fait que, mathématiquement, l'un des deux modes d'évolutions est “unitaire”, mais pas l'autre.

Dans les axiomes de von Neumann, la distinction entre “mesures” et “interaction normales” est faite en donnant un rôle à l'observateur (voire à la conscience de l'observateur, comme il le développe dans son livre) : c'est seulement si le système quantique est observé et qu'une conscience prend connaissance de son état, que l'interaction compte comme une mesure. Cette théorie porte le nom de *Consciousness causes collapse* et n'est plus très en vogue.

Il existe d'autres tentatives pour dépasser ce problème, la plus à la mode au moment d'écrire ces notes étant celle des “univers multiples” d'Everett. L'interprétation de Copenhague, qui est celle traditionnellement acceptée, consiste essentiellement à ignorer ce problème, et à se contenter d'utiliser la théorie telle quelle sans chercher à en éclaircir les fondements, puisqu'elle est parfaitement satisfaisante en pratique. Une citation célèbre donne une idée de cette attitude :

“If I were forced to sum up in one sentence what the Copenhagen interpretation says to me, it would be ‘Shut up and calculate!’”

David Mermin, 1989

Remarque (Mesure de position). *Mesurer la position de la particule revient à appliquer l'opérateur de multiplication par x , i.e., $(A\psi)(x) := x\psi(x)$. Cet opérateur n'est pas compact (ni même borné), ses "valeurs propres" (le bon terme est plutôt son spectre) sont un continuum égal à $\mathbb{R}$ tout entier. La loi de probabilité du résultat d'une mesure de position est continue, et sa densité est donnée par $|\psi(x)|^2 dx$: pour un ouvert $U \subset \mathbb{R}^d$,*

$$\mathbb{P}(\text{position mesurée} \in U) = \int_U |\psi(x)|^2 dx.$$

Pour une mesure d'énergie, l'opérateur A est le hamiltonien H lui-même. L'un des succès frappants et immédiats de l'équation de Schrödinger est que les valeurs propres du hamiltonien $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ correspondent précisément aux niveaux d'énergie quantifiés de l'atome d'hydrogène. L'équation de Schrödinger explique ainsi non seulement la nature ondulatoire de la matière, mais également son caractère quantifié, en accord avec les résultats expérimentaux, et fournissant historiquement la première description de la matière conciliant la dualité onde-corpuscule.

2 Le principe de correspondance en analyse semiclassique

Dans ce qui suit, nous étudions l'évolution quantique d'une particule dont l'état est gouverné par l'équation

$$i\hbar \partial_t \psi_h = P(h)\psi_h, \quad \psi_h(0) = \psi_0 \in \mathcal{H}$$

où $P(h) = -\hbar^2 \Delta + V$ et $h > 0$ est un paramètre qui, dorénavant, ne désigne plus la constante de Planck. Sans rentrer dans les détails, ce petit paramètre apparaît par lorsque la particule considérée a une masse très grande, ou est soumise à une énergie importante (V est grand); en résumant un peu grossièrement, cette équation apparaît lorsqu'on applique l'équation de Schrödinger à un système beaucoup plus gros qu'un atome et $h > 0$ tend vers 0 lorsque la taille du système tend vers l'infini.

La fonction d'onde ψ_h solution de cette équation dépend donc désormais de h , et le but de cette seconde partie de l'exposé (et aussi de l'analyse semiclassique) est de décrire asymptotiquement ψ_h dans la limite $h \rightarrow 0$. Puisque la limite $h \rightarrow 0$ correspond à un système macroscopique, la question que l'on se pose est la suivante :

Le comportement classique est-il retrouvé dans la limite $h \rightarrow 0$?

Cette question est intéressante non seulement d'un point de vue théorique, mais aussi pratique : elle est par exemple la base de méthodes d'approximations des solutions de l'équation de Schrödinger appliquées par exemple en chimie moléculaire.¹⁴

Le théorème d'Egorov donne une réponse affirmative à la question ci-dessus. Son énoncé (de même que sa démonstration) fait appel à un opérateur dit de *quantification* $a \mapsto \text{Op}_h(a)$. Pour le définir et étudier ses propriétés, nous aurons besoin d'introduire brièvement une généralisation du développement en séries de Fourier : la transformation de Fourier.

2.1 Transformation de Fourier

Rappelons que pour une fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ régulière et T -périodique, on a le développement en série de Fourier

$$f(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{f}(n) e^{in \frac{2\pi}{T} x}$$

14. Ce type d'approximations a notamment été initié par Born et Oppenheimer, il consiste à décrire les électrons d'une molécule de manière purement quantique, mais les atomes, beaucoup plus gros, de manière semiclassique.

où les coefficients de Fourier sont donnés par la formule $\hat{f}(n) = \frac{1}{T} \int_0^T f(x) e^{-in \frac{2\pi}{T} x} dx$.¹⁵

Si f n'est pas périodique, le résultat est évidemment faux, mais il est toujours possible de représenter f comme une superposition (continue) d'ondes planes, un peu comme si l'on passait formellement à la limite $T \rightarrow \infty$ dans le résultat précédent. Pour éviter les subtilités, tout en restant précis quand c'est possible, dans toute la suite, nous restreindrons les énoncés à des fonctions dans la classe de Schwartz

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) := \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^d) \mid (1+|x|)^N \partial_{x_i}^N f \text{ est bornée, pour tout } i \in \{1, \dots, d\} \text{ et } N \text{ entier positif} \right\}.$$

Remarque (Intérêt de la classe de Schwartz). *Il s'agit de l'espace des fonctions qui sont infiniment régulières et qui décroissent très rapidement à l'infini (plus vite que tous les inverses de polynômes), de même que toutes leurs dérivées. C'est donc une classe de fonction très confortable dans laquelle on peut dériver à volonté et multiplier par n'importe quel polynôme. En se restreignant à cette classe, nous évitons les difficultés qui existent dans la théorie de Fourier pour des fonctions moins régulières. Notons que l'attitude de commencer par étudier des opérateurs dans des classes confortables comme la classe de Schwartz est très fructueuse, notamment à cause du fait que cette classe forme un sous-espace dense de l'espace $L^2(\mathbb{R}^d)$ (et de bien d'autres espaces fonctionnels). C'est une des idées à la base de la théorie des distributions dont l'inventeur est ... Laurent Schwartz!*

Théorème (Transformation de Fourier). *Pour $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on a la représentation*

$$f(x) = (\mathcal{F}^{-1}f)(x) =: \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} (\mathcal{F}f)(\xi) e^{ix \cdot \xi} d\xi$$

où pour tout $\xi \in \mathbb{R}$, $\mathcal{F}f(\xi)$ est définie par

$$(\mathcal{F}f)(\xi) := \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-ix \cdot \xi} dx.$$

Ici, $x \cdot \xi$ désigne le produit scalaire Euclidien de x et ξ , i.e., $x \cdot \xi = x_1 \xi_1 + \dots + x_d \xi_d$, et $dx = dx_1 \dots dx_d$ (l'intégrale étant à comprendre comme une intégrale multiple). On notera aussi souvent $\hat{f}(\xi) = \mathcal{F}f(\xi)$. L'opération $f \mapsto \mathcal{F}f$ est appelée *transformation de Fourier*, et la première égalité du théorème précédent est appelée *formule d'inversion de Fourier*.

Proposition (Propriétés fondamentales de la transformée de Fourier). *La transformation de Fourier jouit des propriétés suivantes*

1. *On a l'identité*

$$\mathcal{F}(\partial_{x_k} f) = -i\xi_k \cdot \mathcal{F}f$$

En particulier, on a la représentation suivante du Laplacien :

$$-\Delta f = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(-\Delta f)) = \mathcal{F}^{-1}(|\xi|^2 \mathcal{F}f)$$

2. *$\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^{-1}$ définissent deux applications linéaires de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans lui-même, et, comme la notation l'indique, $\mathcal{F} \circ \mathcal{F}^{-1} = \text{Id}$.*
3. *Pour tout $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, on a l'identité de Parseval*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} |\mathcal{F}f(\xi)|^2 d\xi,$$

et plus généralement

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \langle \mathcal{F}f, \mathcal{F}g \rangle_{L^2}.$$

¹⁵. on peut d'ailleurs voir ce résultat comme une conséquence du théorème spectral pour le Laplacien sur un espace de Hilbert constitué de fonctions T -périodiques de carré intégrable!

Idées de démonstration.

1. Cela découle sans difficulté de la définition grâce à une intégration par parties (comme dans la théorie des séries de Fourier).
2. Il faut montrer que si $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, alors $\mathcal{F}f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. La décroissance rapide de $\mathcal{F}f$ se démontre comme la décroissance des coefficients de Fourier, en utilisant des intégrations par parties répétées. Pour établir la régularité infinie on utilise notamment la relation

$$\partial_{\xi_k} \mathcal{F}f = \mathcal{F}(-ix_k f)$$

(un théorème de différentiabilité d'une intégrale à paramètre assure que $\mathcal{F}f$ est au moins C^1 et vérifie l'égalité précédente).

Les résultats pour $\mathcal{F}^{-1}$ s'en déduisent en remarquant que

$$\mathcal{F}^{-1}f = \overline{(\mathcal{F}f)}.$$

3. Un calcul simple utilisant les définitions et le théorème de Fubini montre que pour tout $\tilde{g} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$,

$$\langle \mathcal{F}f, \tilde{g} \rangle = \langle f, \mathcal{F}^{-1}\tilde{g} \rangle.$$

On conclut en appliquant cela à $\tilde{g} = \mathcal{F}g$ et en utilisant la formule d'inversion de Fourier. $\square$

Remarque. Voici un exemple illustrant le rôle important de la transformation de Fourier dans la théorie des équations aux dérivées partielles. L'application

$$f \mapsto -\Delta f + f$$

est inversible dans la classe de Schwartz. En effet, d'après la proposition précédente, elle peut s'écrire $\mathcal{F}^{-1}(|\xi|^2 + 1)\mathcal{F}$ et son inverse est donc instantanément donné par $\mathcal{F}^{-1}(|\xi|^2 + 1)^{-1}\mathcal{F}$. Plus généralement, on voit que tout opérateur différentiel à coefficients constants correspond à un certain "symbole" (obtenu formellement en remplaçant ∂_{x_k} par $-i\xi_k$), et si ce symbole ne s'annule pas sur $\mathbb{R}^d$, l'opérateur est inversible.

Remarque (Mesure d'impulsion). L'égalité de Parseval montre que pour une fonction d'onde ψ , la transformée de Fourier $\xi \mapsto \hat{\psi}(\xi)$ définit également une densité de probabilité par $|\hat{\psi}(\xi)|^2 d\xi$. Celle-ci correspond aux mesures d'impulsion de la particule : pour tout ouvert $\hat{U} \subset \mathbb{R}^d$,

$$\mathbb{P}(\text{impulsion mesurée} \in \hat{U}) = \int_{\hat{U}} |\hat{\psi}(\xi)|^2 d\xi.$$

Dans la suite, une version semiclassique de la transformation de Fourier, qui incorpore le paramètre h :

$$\mathcal{F}_h f(\xi) := \frac{1}{(2\pi h)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} f(x) e^{-i \frac{x \cdot \xi}{h}} dx.$$

L'idée est que dans la limite semiclassique, les fonctions typiques auxquelles on s'intéresse oscillent à des fréquences proches de $1/h$, et il s'avère plus commode (i) de renormaliser la variable $\xi \rightarrow \frac{\xi}{h}$ et (ii) d'assortir toute dérivée d'une puissance correspondante de h . Ainsi, avec cette définition, on vérifie par changement de variable immédiat que les énoncés précédents prennent la forme

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi h)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{F}_h f(\xi) e^{i \frac{x \cdot \xi}{h}} d\xi,$$

$$\mathcal{F}(h\partial_{x_k} f) = -i\xi_k \cdot \mathcal{F}f, \quad -h^2\Delta = \mathcal{F}^{-1}(|\xi|^2 \mathcal{F}).$$

2.2 Opérateurs h -pseudodifférentiels

Définition et exemples

Une façon d'introduire les opérateurs h -pseudodifférentiels est la suivante : comment savoir quel opérateur auto-adjoint A correspond à une certaine mesure ? La réponse apportée par cette théorie est un opérateur dit de *quantification* Op_h qui fait correspondre, à une observable classique $a(x, \xi) \in \mathbb{R}$ ($a : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$) un opérateur $A = \text{Op}_h(a)$.

Définition (La quantification Op_h). Soit $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ et $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. On pose

$$(\text{Op}_h(a)\psi)(x) := \frac{1}{(2\pi h)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} a(x, \xi) (\mathcal{F}_h \psi)(\xi) e^{i \frac{x \cdot \xi}{h}} d\xi.$$

On dit que a est le *symbole* de l'opérateur h -pseudodifférentiel $\text{Op}_h(a)$, et que $\text{Op}_h(a)$ est la *quantification* de a .

Exemple (Exemples fondamentaux de symboles).

1. Dans le cas où $a(x, \xi) = a(x)$, la formule d'inversion de Fourier implique

$$\text{Op}_h(a)\psi = a(x)\psi(x).$$

Ainsi, la classe des opérateurs h -pseudodifférentiels contient les opérateurs de multiplication par une fonction.

2. Dans le cas où $a(x, \xi) = \xi_k$, la propriété de la transformation de Fourier en relation avec la dérivation donne

$$\text{Op}_h(a)\psi = -ih\partial_{x_k}\psi.$$

Plus généralement, tout opérateur différentiel à coefficients constants s'écrit $\text{Op}_h(a)$ pour un certain symbole $a = a(\xi)$. Par exemple,

$$-h^2\Delta = \text{Op}_h(|\xi|^2)$$

Les opérateurs h -pseudodifférentiels contiennent donc les opérateurs différentiels à coefficients constants.

3. Par linéarité d'après ce qui précède, le symbole $p(x, \xi)$ mène à

$$\text{Op}_h(p) = -h^2\Delta + V(x) = P(h) :$$

le hamiltonien quantique est donc la quantification du hamiltonien classique.

Remarque (Symboles et observables). Rappelons que pour un système décrit par la mécanique classique, l'état à l'instant t est donné par le couple $(x(t), \xi(t))$ (position et impulsion), et les "observables classiques", à savoir, les quantités que l'on peut associer à notre système à chaque instant, sont donc des fonctions $a(x, \xi)$ de ces deux variables. Par exemple, l'énergie est l'observable classique $a(x, \xi) = |\xi|^2 + V(x)$ (pour une particule de masse $m = 1$).

Pour un système décrit par la mécanique quantique, l'état est donné par la fonction d'onde $\psi \in \mathcal{H}$, et les observables sont, d'après le formalisme de von Neumann, l'ensemble des opérateurs auto-adjoints $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Les quantités que l'on peut mesurer sur le système sont donc définies de manière quelque peu abstraites : il faut encore préciser quelle quantité est représentée par tel ou tel opérateur auto-adjoint, et réciproquement, quel opérateur correspond à une quantité physique donnée, comme la position, l'impulsion, l'énergie, etc.

C'est donc l'opérateur de quantification Op_h qui fournit cette correspondance via

$$a(x, \xi) \mapsto A := \text{Op}_h(a)$$

reliant les observables classiques et quantiques. Il nous dit par exemple que la mesure de l'énergie d'un système quantique, l'opérateur auto-adjoint qu'il faut considérer est $\text{Op}_h(|\xi|^2 + V(x)) = -\hbar^2 \Delta + V$, qui n'est autre que le hamiltonien quantique.

Propriétés d'algèbre

On peut naïvement se demander si, pour tous symboles $a, b \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, on a la formule de composition

$$\text{Op}_h(ab) = \text{Op}_h(a)\text{Op}_h(b) ? \quad (3)$$

Cette relation serait trop belle pour être vraie ! On a en effet

$$\begin{aligned} \text{Op}_h(x)\text{Op}_h(\xi)\psi &= -i\hbar x \cdot \nabla \psi \\ \text{Op}_h(\xi)\text{Op}_h(x)\psi &= -i\hbar \nabla(x\psi(x)) = -i\hbar x \cdot \nabla \psi - i\hbar \psi. \end{aligned}$$

La différence est donc non-nulle (ce qui exclut donc que (3) ait lieu). Cependant, heureusement, la différence est *petite* (car rappelons que nous sommes intéressés par la limite $\hbar \rightarrow 0$). En notant $[A, B] := AB - BA$ le *commutateur* de deux opérateurs, on vient d'obtenir la relation

$$[\text{Op}_h(x), \text{Op}_h(\xi)] = i\hbar \text{Id} = \frac{\hbar}{i} \text{Op}(\{x, \xi\}) \quad (4)$$

(puisque $\{x, \xi\} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{\partial \xi}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial x} = -1$).

Remarque (Principe d'incertitude). *La relation précédente est directement liée au célèbre "principe d'incertitude" d'Heisenberg. Pour l'illustrer, considérons une fonction d'onde $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ telle que $\|\psi\|_{L^2}^2 = 1$. On peut supposer sans perte de généralité que*

$$\int_{\mathbb{R}^d} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}^d} \xi |\hat{\psi}(\xi)|^2 d\xi = 0$$

(on s'y ramène en considérant $\psi \rightarrow e^{i\theta} \psi(x - c)$ où $c, \theta \in \mathbb{R}$). Notons

$$\Delta_x := \sqrt{\int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 |\psi(x)|^2 dx}, \quad \Delta_\xi := \sqrt{\int_{\mathbb{R}^d} |\xi|^2 |\psi(\xi)|^2 d\xi}.$$

Il s'agit de l'écart-type des distributions de probabilités décrivant la position et l'impulsion de la particule, respectivement. Ces définitions peuvent se réécrire

$$\Delta_x = \|\text{Op}_h(x)\psi\|, \quad \Delta_\xi = \|\text{Op}_h(\xi)\psi\|$$

L'inégalité de Cauchy-Schwarz nous fait alors voir que

$$\begin{aligned} \Delta_x \Delta_\xi &\geq |\langle \text{Op}_h(x)\psi, \text{Op}_h(\xi)\psi \rangle| \geq \left| \text{Im} \left(\langle \text{Op}_h(x)\psi, \text{Op}_h(\xi)\psi \rangle \right) \right| \\ &= |\langle \text{Op}_h(\xi)\psi, \text{Op}_h(x)\psi \rangle - \langle \text{Op}_h(x)\psi, \text{Op}_h(\xi)\psi \rangle| \\ &= |\langle \text{Op}_h(x)\text{Op}_h(\xi)\psi, \psi \rangle - \langle \text{Op}_h(\xi)\text{Op}_h(x)\psi, \psi \rangle| \\ &= |\langle [\text{Op}_h(x), \text{Op}_h(\xi)]\psi, \psi \rangle| \\ &= \hbar \|\psi\|^2 \\ &= \hbar. \end{aligned}$$

Ainsi, “les incertitudes” que nous avons sur la distribution des résultats de mesures de position/impulsion ne peuvent pas être simultanément arbitrairement petites.

Nous concluons cette section en généralisant beaucoup la relation (4).

Théorème (Composition des opérateurs h -pseudodifférentiels). *Soient $a, b \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ deux symboles à valeurs réelles. Alors*

$$\text{Op}_h(a)\text{Op}_h(b) = \text{Op}_h(ab) + \frac{h}{2i}\text{Op}_h(\{a, b\}) + O(h^2)$$

et par conséquent,

$$[\text{Op}_h(a), \text{Op}_h(b)] = \frac{h}{i}\text{Op}(\langle a, b \rangle) + O(h^2).$$

Le résultat est énoncé ici pour des symboles dans la classe de Schwartz, mais il est en fait beaucoup plus général : il s’applique par exemple à des symboles polynomiaux en ξ , comme $a(x, \xi) = |\xi|^2 + V(x)$ (si V est suffisamment régulière). C’est l’un des résultats fondamentaux de l’analyse semiclassique, sa démonstration requiert des outils que nous n’aborderons pas ici.

2.3 Théorème d’Egorov

Nous sommes enfin prêts à énoncer et démontrer (au moins informellement) un cas particulier du théorème d’Egorov

Théorème (Egorov (1960)). *Soit $\psi_0 \in \mathcal{H}$, et $\psi = \psi_h$ (nous omettons la dépendance en h de la notation) la solution de l’équation de Schrödinger*

$$ih\partial_t\psi = P(h)\psi, \quad \psi(0) = \psi_0$$

où $P(h) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ est auto-adjoint. On suppose de plus que $P(h) = \text{Op}_h(p)$ pour un certain symbole $p \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Soit $A = \text{Op}_h(a)$ une observable quantique correspondant à un symbole $a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Alors

$$\langle A\psi(t), \psi(t) \rangle = \langle \text{Op}_h(a \circ \phi_t^p)\psi_0, \psi_0 \rangle + O(ht)$$

où ϕ_t^p est le flot Hamiltonien associé à p .

Remarque. Le théorème d’Egorov donne une approximation de l’évolution quantique de l’espérance d’une observable (le membre de gauche de l’égalité) à l’aide d’une quantité faisant intervenir le flot hamiltonien ϕ_t^p étudié dans la première partie, et qui est associé à la dynamique classique. Ce résultat réalise donc le programme annoncé d’établir une correspondance entre dynamique quantique et dynamique classique ; c’est l’un des résultats emblématiques de l’analyse semiclassique.

Idées de la démonstration. Notons $f(t) := \langle A\psi_t, \psi_t \rangle$ où $\psi_t = \psi(t)$, et $g(t) := \langle \text{Op}_h(a \circ \phi_t^p)\psi_0, \psi_0 \rangle + O(ht)$.

1. Evidemment, $f(0) = g(0)$ (puisque $\phi_0^p = \text{Id}$).
2. Que dire des dérivées ? D’une part,

$$g'(t) = \frac{d}{dt} \langle \text{Op}_h(a \circ \phi_t^p)\psi_0, \psi_0 \rangle = \langle \text{Op}_h(\frac{d}{dt}(a \circ \phi_t^p))\psi_0, \psi_0 \rangle = \langle \text{Op}_h(\{p, a\} \circ \phi_t^p)\psi_0, \psi_0 \rangle,$$

d'après la formule vue dans la première partie, reliant le crochet de Poisson $\{p, a\}$ et l'évolution d'une observable a le long du flot hamiltonien ϕ_t^p . D'autre part, en utilisant l'équation de Schrödinger,

$$\begin{aligned} f'(t) &= \langle A \partial_t \psi_t, \psi_t \rangle + \langle A \psi_t, \partial_t \psi_t \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\langle AP \psi_t, \psi_t \rangle - \langle A \psi_t, P \psi_t \rangle) \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\langle AP \psi_t, \psi_t \rangle - \langle PA \psi_t, \psi_t \rangle) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle [A, P] \psi_t, \psi_t \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{\hbar}{i} \langle \text{Op}_h(\{a, p\}) \psi_t, \psi_t \rangle + O(\hbar^2) \right) \end{aligned}$$

d'après le théorème de composition des opérateurs $\hbar$ -pseudodifférentiels. On obtient donc $f'(t) = \langle \text{Op}_h(\{p, a\}) \psi_t, \psi_t \rangle + O(\hbar)$. En prenant $t = 0$, comme dans le point précédent, on obtient finalement

$$f'(0) = g'(0) + O(\hbar)$$

3. Le point précédent doit nous faire déjà sentir toute l'idée de la démonstration : cela tient au rôle central qu'occupe le crochet de Poisson à la fois dans la théorie classique, et dans les commutateurs d'opérateurs $\hbar$ -pseudodifférentiels.

Néanmoins, nous n'avons pas encore atteint la conclusion, et il est difficile de relier $f'(t)$ et $g'(t)$. L'astuce qui mène au résultat est d'introduire un objet qui mélange un peu plus les dynamiques quantiques et classiques :

$$K(t, s) = \langle \text{Op}_h(a \circ \phi_{t-s}^p) \psi_s, \psi_s \rangle.$$

En résumé, $K(t, s)$ représente la dynamique dans laquelle on laisse d'abord évoluer le système de manière quantique pendant l'intervalle $[0, s]$, puis de manière classique pendant l'intervalle $[s, t]$.

En particulier, on a $K(t, t) = f(t)$, $K(t, 0) = g(t)$, et donc

$$f(t) - g(t) = \int_0^t \frac{\partial K}{\partial s}(t, s) ds.$$

Le calcul de $\partial_s K(t, s)$ se déroule selon la même méthode que précédemment, en remarquant que

$$K(t, s) = \langle \text{Op}_h(\underbrace{[a \circ \phi_t^p]}_{\tilde{a}} \circ \phi_{-s}^p) \psi_s, \psi_s \rangle$$

On obtient

$$\frac{\partial K}{\partial s} = -\langle \text{Op}_h(\{p, a \circ \phi_t^p\} \circ \phi_{-s}^p) \psi_s, \psi_s \rangle + \frac{1}{i\hbar} (\langle [\text{Op}_h(a \circ \phi_{t-s}^p), P] \psi_s, \psi_s \rangle)$$

puis en vérifiant facilement que $\{a_1, a_2\} \circ \phi_s^p = \{a_1 \circ \phi_s^p, a_2 \circ \phi_s^p\}$ pour tous symboles $a_1, a_2 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, et en se rappelant que $p \circ \phi_t^p = p$, le théorème de composition donne

$$\frac{\partial K}{\partial s} = O(\hbar).$$

On conclut à l'aide de l'inégalité triangulaire (en laissant de côté les questions d'uniformité par rapport au temps du reste)

$$|f(t) - g(t)| \leq \int_0^t \left| \frac{\partial K}{\partial s}(t, s) \right| ds = O(ht). \quad \square$$