ANNALES DE L'I. H. P., SECTION A

ANDRÉ ROT

Sur certaines transformations canoniques en mécanique quantique

Annales de l'I. H. P., section A, tome 1, n° 1 (1964), p. 31-45
<http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1964__1_1_31_0>

Ann. Inst. Henri-Poincaré,
Vol. I, n° 1, 1964, p. 31-45.

Section A :
Physique théorique.

Sur certaines transformations canoniques en Mécanique quantique

par

André ROT
Institut Henri-Poincaré, Paris.

RÉSUMÉ. — Pour définir une transformation canonique quantique $q \to Q$, $p \to P$ on montre qu'il ne suffit pas d'exiger que Q et P soient hermitiens et satisfassent à la condition $[Q, P] = i$. Discussion d'un exemple.

SUMMARY. — For a transformation $q \to Q$, $p \to P$ to be canonical in quantum mechanics it is shown that it is not sufficient that Q and P be hermitian and verify $[Q, P] = i$. An example is discussed.

Introduction. — L'une des méthodes de résolution des équations du mouvement de la Mécanique classique consiste à effectuer un changement de variables canoniques, de telle façon que la dépendance de la fonction d'Hamilton par rapport aux nouvelles variables soit particulièrement simple. On peut notamment chercher de nouvelles variables canoniques qui soient toutes cycliques : c'est précisément la méthode bien connue de Hamilton et Jacobi [*3*].

De façon analogue, pour diagonaliser un opérateur hamiltonien en Mécanique quantique ou en Théorie quantique des champs, on peut chercher à construire de nouveaux opérateurs canoniquement associés tels que l'expression de l'opérateur hamiltonien dans cette nouvelle représentation se ramène à une forme connue pour être aisément diagonalisable.

On sait que toutes les représentations des relations de commutation sont équivalentes en Mécanique quantique [*7*]. Il est cependant peu commode de chercher *a priori* la transformation qui amènerait, par exemple, la représentation de Schrödinger sur une représentation où l'hamiltonien serait facilement résoluble. En se laissant guider par l'expression de cet opérateur, on préfère le plus souvent chercher à le mettre sous une forme plus simple en employant une représentation dans laquelle les opérateurs canoniques soient des fonctions élémentaires et en particulier des polynômes, des opérateurs primitifs [*4*].

Le but de ce travail est de montrer qu'il ne suffit cependant pas, comme on le fait généralement, de s'assurer que les nouveaux opérateurs soient hermitiens [1] et satisfont aux relations de commutation, pour obtenir un ensemble d'opérateurs canoniquement associés. En effet, tandis qu'en Mécanique classique, les conditions imposées aux changements de variables pour qu'ils soient canoniques sont des conditions purement locales, le fait que toutes les représentations quantiques soient équivalentes entre elles et en particulier équivalentes à celle de Schrödinger impose des conditions de nature globale, par conséquent beaucoup plus restrictives. En particulier, nous verrons que lorsque ces conditions ne sont pas respectées, on peut être conduit à des opérateurs (dynamiques ?) ayant des valeurs propres complexes.

Les transformations canoniques en Mécanique classique [*3*]. — Considérons un système dynamique à un degré de liberté ; sa configuration est complètement déterminée par la donnée des valeurs de deux variables dynamiques q et p, appelées variables conjuguées. Son évolution est déterminée par la fonction hamiltonienne $\mathrm{H}(q, p)$ caractérisant ce système, dont dérivent les équations du mouvement

$$(1) \qquad \left\{ \begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial p} = [q, \mathrm{H}], \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial q} = [p, \mathrm{H}]. \end{aligned} \right.$$

Ce sont les équations canoniques, ou équations d'Hamilton du système. Le symbole [,] désigne ici le crochet de Poisson défini par

$$[f, g] = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q},$$

[1] Soit A un opérateur défini dans un domaine $\mathfrak{D}_{\mathrm{A}}$ de l'espace hilbertien $\mathcal{H}$. Conformément à un usage assez répandu en mathématiques, nous disons que A est hermitien lorsque $(\mathrm{A}\varphi, \chi) = (\varphi, \mathrm{A}\chi)$ quels que soient φ et $\chi \in \mathfrak{D}_{\mathrm{A}}$; que A est symétrique lorsqu'il est hermitien et que son domaine de définition $\mathfrak{D}_{\mathrm{A}}$ est dense dans $\mathcal{H}$. Dans ce cas, son adjoint A^* est bien défini et est une extension de A : $\mathrm{A} \subset \mathrm{A}^*$. En particulier, lorsque $\mathrm{A} = \mathrm{A}^*$, nous dirons que A est autoadjoint.

f et g étant deux grandeurs mécaniques quelconques, fonctions de q et de p. En particulier, on a

$$[q, p] = 1. \tag{2}$$

On sait que la condition (2) caractérise les variables conjuguées, dans le sens suivant : un changement de variables, inversible

$$\mathrm{Q} = \mathrm{Q}(q, p); \qquad \mathrm{P} = \mathrm{P}(q, p) \tag{3}$$

sera dit canonique lorsque les nouvelles variables Q et P seront telles que

$$[\mathrm{Q}, \mathrm{P}] = 1. \tag{2'}$$

On démontre en effet que c'est la condition nécessaire et suffisante pour que le crochet de Poisson se conserve par le changement de variables (3), c'est-à-dire que

$$\begin{aligned}[f, g]_{q,p} &= \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \mathrm{Q}}\frac{\partial g}{\partial \mathrm{P}} - \frac{\partial f}{\partial \mathrm{P}}\frac{\partial g}{\partial \mathrm{Q}} = [f, g]_{\mathrm{Q},\mathrm{P}}.\end{aligned}$$

C'est donc aussi la condition nécessaire et suffisante pour que les équations du mouvement conservent leur forme canonique

$$\begin{aligned}\frac{d\mathrm{Q}}{dt} &= \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathrm{P}} = [\mathrm{Q}, \mathrm{H}], \\ \frac{d\mathrm{P}}{dt} &= -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathrm{Q}} = [\mathrm{P}, \mathrm{H}].\end{aligned}$$

La description quantique du système précédent. — La description quantique du système précédent s'effectue à l'aide de deux opérateurs autoadjoints q et p qui jouent le rôle de variables dynamiques. Ces opérateurs sont définis dans un espace hilbertien $\mathcal{H}$ et satisfont aux conditions suivantes :

a. $\mathcal{D}_q$ et $\mathcal{D}_p$ désignant les domaines de définition de q et de p respectivement, l'intersection $\mathcal{D}_q \cap \mathcal{D}_p$ est dense dans $\mathcal{H}$, stable pour q et p;

b. Quel que soit $\varphi \in \mathcal{D}_q \cap \mathcal{D}_p$ on a

$$qp\varphi - pq\varphi = i\varphi;$$

c. Le système $\{ q, p \}$ est irréductible.

La condition b est la traduction mathématique de la relation de commutation qu'on note habituellement en physique

$$[q, p] = i\mathrm{I} \tag{4}$$

comme si les opérateurs q et p étaient bornés. Pour deux opérateurs bornés A et B le symbole [A, B] désigne en effet le commutateur AB — BA de ces deux opérateurs. Nous conserverons néanmoins cette notation abusive mais commode. Naturellement, I désigne l'opérateur identité sur $\mathcal{H}$.

La condition c signifie qu'aucun vrai sous-espace vectoriel de $\mathcal{H}$ ne réduit simultanément q et p. En d'autres termes, il n'existe aucun projecteur E tel que

$$\mathrm{E}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{D}_q \cap \mathcal{D}_p,$$
$$\mathrm{E}q \subset q\mathrm{E}; \qquad \mathrm{E}p \subset p\mathrm{E}.$$

Deux opérateurs tels que q et p, satisfaisant aux conditions ci-dessus seront dits canoniquement associés.

On sait qu'une réalisation possible des axiomes précédents est obtenue en prenant pour $\mathcal{H}$ l'espace L^2 des fonctions de la variable réelle x, définies sur toute la droite, mesurables et de carré sommable pour la mesure de Lebesgue. L'opérateur q est alors défini par

q : $\mathcal{D}_q$ = ensemble des $\psi \in \mathrm{L}^2$, telles que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\,\psi(x)|^2\,dx < \infty\,;$$
$$(q\psi)(x) = x\,\psi(x),$$

tandis que l'opérateur p est défini par

p : $\mathcal{D}_p$ = ensemble des $\psi \in \mathrm{L}^2$, absolument continues sur tout intervalle borné, telles que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(x)|^2\,dx < \infty\,;$$
$$(p\psi)(x) = -\,i\,\frac{d\psi}{dx}(x).$$

C'est en ce choix des opérateurs canoniquement associés que consiste la représentation de Schrödinger. On trouvera dans [1] et [2] une étude détaillée de ces deux opérateurs, permettant de vérifier qu'ils satisfont bien aux conditions précédentes.

Les transformations canoniques en mécanique quantique. — Par analogie avec la Mécanique classique, un changement d'opérateurs canoniquement associés sera appelé transformation canonique. De façon plus précise, une transformation canonique est une transformation

$$q \to \mathrm{Q}; \qquad p \to \mathrm{P}$$

qui, aux opérateurs q et p, fait correspondre deux opérateurs autoadjoints Q et P, définis dans $\mathcal{H}$, satisfaisant aux conditions a, b et c.

Or, d'après un théorème démontré par von Neumann, toute représentation du système $\{ q, \; p \}$ est équivalente à la représentation de Schrödinger. Cela signifie que, quels que soient les opérateurs autoadjoints q et p satisfaisant aux conditions précédentes, il existe un isomorphisme isométrique de $\mathcal{H}$ sur L^2, appliquant l'opérateur q sur l'opérateur de multiplication par la variable indépendante et l'opérateur p sur l'opérateur $-i\dfrac{d}{dx}$. Il résulte de ce théorème, qu'à toute transformation canonique correspond une transformation unitaire $\mathcal{U}$ de $\mathcal{H}$, telle que

$$Q = \mathcal{U} q \mathcal{U}^{-1}; \qquad P = \mathcal{U} p \mathcal{U}^{-1}. \tag{5}$$

C'est la raison pour laquelle les transformations canoniques sont souvent appelées changements de représentation [5].

Signalons, encore à ce propos, que nous aurions pu poser le problème de façon apparemment plus générale en définissant les nouveaux opérateurs Q et P dans un autre espace de Hilbert $\mathcal{K}$. D'après le théorème que nous venons d'invoquer, la formule (5) resterait valable, $\mathcal{U}$ désignant cette fois un isomorphisme de $\mathcal{H}$ sur $\mathcal{K}$, au lieu d'un automorphisme de $\mathcal{H}$ [7].

Il convient de remarquer que ce résultat est d'une importance fondamentale; tellement fondamentale que, même avant qu'il n'ait été démontré, il était évident pour les physiciens qu'un tel théorème dût exister. En effet, on sait que l'interprétation de la Mécanique quantique repose essentiellement sur les notions de valeur propre ou de valeur moyenne. Ce qui signifie que tous les résultats physiques de la théorie s'expriment en termes de valeurs spectrales des opérateurs que la Mécanique quantique associe aux grandeurs physiques. Il était donc nécessaire, pour que la théorie soit physiquement cohérente, qu'il existât un théorème proclamant l'invariance des spectres par les transformations canoniques. Et précisément l'une des propriétés des transformations unitaires est de laisser invariant le spectre des opérateurs, ainsi d'ailleurs que sa multiplicité ([2]).

Conséquences des résultats précédents. — Nous venons de dire que les spectres et leur multiplicité étaient invariants par les transformations canoniques. Quels que soient donc les opérateurs Q et P canoniquement

---

([2]) Remarquons que le spectre et sa multiplicité ne forment pas à eux seuls un ensemble suffisant d'invariants unitaires. Ils nous suffiront cependant pour le problème qui nous intéresse ici.

associés, ils ont tous deux un spectre continu, simple, étalé sur toute la droite réelle, puisqu'il en est ainsi pour les opérateurs correspondants dans la représentation de Schrödinger.

On peut se demander s'il existe quelque chose d'analogue pour les transformations canoniques de la Mécanique classique. Considérons par exemple le problème suivant : soit donné $Q = Q(q, p)$; peut-on lui associer une fonction $P = P(q, p)$ de telle façon que le changement de variables dynamiques ainsi défini soit canonique ? Comme nous l'avons indiqué, il suffira de nous assurer que la transformation soit inversible, c'est-à-dire qu'il suffira que

(6) $\dfrac{\partial Q}{\partial q}$ et $\dfrac{\partial Q}{\partial p}$ ne s'annulent pas simultanément.

Alors la condition (2') se ramènera à une équation aux dérivées partielles déterminant $P(q, p)$.

Il faut toutefois remarquer que la condition (6) est une condition locale; elle n'assure l'inversibilité de la transformation que dans un certain voisinage du plan (q, p).

Illustrons ceci par un exemple particulièrement simple qui nous servira pour la discussion ultérieure en Mécanique quantique. Posons

$$Q = q^2. \tag{7}$$

Il est facile de voir qu'il suffit de prendre, par exemple [3],

$$P = \frac{p}{2q}$$

pour obtenir une transformation canonique. Celle-ci n'est cependant inversible que pour $q > 0$, ou bien pour $q < 0$.

Le spectre d'un opérateur n'étant, en dernière analyse, que l'ensemble des valeurs que cet opérateur est susceptible de prendre, on voit que la condition imposée aux spectres des opérateurs canoniquement conjugués est de la même nature que la condition d'inversibilité. Mais contrairement à la condition (6), c'est une condition globale. La condition de canonicité quantique est donc beaucoup plus exigeante que son homologue classique. Elle exige

---

[3] La solution générale de ce problème est évidemment :

$$P = \frac{p}{2q} + f(q).$$

Il est aisé de se rendre compte que le choix $f(q) \equiv 0$ ne diminue en rien la généralité, mais simplifie considérablement la discussion.

pratiquement que les équations de définition des nouveaux opérateurs, analogues à (3), définissent une transformation biunivoque du plan de phase (q, p) sur lui-même.

Étude d'une transformation particulière. — Afin de bien mettre en évidence l'importance, du point de vue de la Physique, des considérations qui précèdent, nous allons étudier en détail l'analogue de la transformation canonique définie par les équations (7) et (8) en Mécanique quantique.

Considérons donc l'opérateur

$$Q_1 = q^2. \tag{9}$$

C'est un opérateur autoadjoint, mais dont le spectre est continu, double, étalé sur la demi-droite réelle positive. Nous pouvons toujours lui associer l'opérateur P_1 obtenu en symétrisant l'expression (8) :

$$P_1 = \frac{1}{2}((2q)^{-1}p + p(2q)^{-1}) = (2q)^{-1}p + i(4q^2)^{-1}$$

et il est aisé de vérifier que ces deux opérateurs vérifient la relation de commutation (4)

$$[Q_1, P_1] = iI.$$

De plus, l'opérateur P_1 est certainement hermitien et même symétrique. Cependant, en dépit de ces propriétés et d'après ce que nous avons vu ci-dessus, il faut s'attendre à ce que le système $\{ Q_1, P_1 \}$ ne puisse convenir. Pour le voir supposons que nous partions de la représentation de Schrödinger. Nous aurions pour définir Q_1 :

Q_1 : $\mathfrak{D}_{Q_1}$ = ensemble des $\psi \in L^2$ telles que

$$\int_{-\infty}^{\infty} | x^2 \psi(x) |^2 dx < \infty ;$$
$$(Q_1\psi)(x) = x^2 \psi(x);$$

et, de même, pour définir P_1 :

P_1 : $\mathfrak{D}_{P_1}$ = ensemble des $\psi \in L^2$, absolument continues sur tout intervalle fini, telles que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\psi'(x)}{2x} - \frac{\psi(x)}{4x^2} \right|^2 dx < \infty ;$$
$$(P_1\psi)(x) = -\frac{i}{2x}\left(\frac{d\psi}{dx} - \frac{\psi}{2x}\right).$$

On voit facilement que l'opérateur P_1 est un opérateur symétrique; pour voir qu'il n'est pas autoadjoint nous chercherons ses valeurs propres : la relation $P_1\psi = \lambda\psi$ se traduit par l'équation différentielle

$$-\frac{i}{2x}\left(\frac{d\psi}{dx} - \frac{\psi}{2x}\right) = \lambda\psi \tag{10}$$

dont la solution générale est

$$\psi_\lambda(x)\,\psi_\lambda(x) = \sqrt{|x|}\,e^{i\lambda x^2} \tag{11}$$

$\psi_\lambda(x)$ sera de carré sommable si et seulement si λ est un nombre complexe à partie imaginaire pure positive.

Ainsi, l'opérateur P_1 que nous avons associé à Q_1 possède un ensemble continu de valeurs propres complexes; il n'est pas autoadjoint. Nous ne ferons aucun commentaire sur le fait qu'un tel opérateur puisse ou non représenter une grandeur physique en Mécanique quantique !

De plus, le système $\{ Q_1, P_1 \}$ n'est pas irréductible. En effet, le sous-espace engendré par les fonctions paires de L^2 et évidemment aussi son complémentaire orthogonal engendré par les fonctions impaires de L^2, réduisent simultanément Q_1 et P_1.

Nous venons donc de montrer qu'il n'existe pas de changement de représentation correspondant à la transformation classique (7)-(8), tout au moins si l'on se limite strictement à cette forme.

Étude complète de la transformation précédente. — Nous allons montrer qu'il est cependant possible d'envisager des transformations canoniques de ce type, si l'on prend la précaution de s'assurer que les nouveaux opérateurs sont réellement autoadjoints et non pas seulement hermitiens ou symétriques. On remarquera que ces changements de représentation sont d'un type beaucoup plus général que ceux qui sont utilisés d'habitude en Physique où l'on se limite au cas où Q et P sont tous deux des polynômes en q et en p. Une étude systématique de ces représentations « polynomiales » a été faite récemment par F. R. Halpern [*4*].

Puisque le système $\{ Q_1, P_1 \}$ n'est pas irréductible, nous devons commencer par le réduire en considérant sa restriction à l'un ou à l'autre des deux sous-espaces réducteurs ou, ce qui est équivalent, sa restriction dans l'espace L'^2 des fonctions définies sur le demi-axe positif, mesurables et de carré sommable pour la mesure de Lebesgue sur ce demi-axe. Plus précisément, nous considérerons les deux opérateurs définis par :

Q_2 : $\mathcal{D}_{Q_2}$ = ensemble des $\varphi \in L'^2$ telles que

$$\int_0^\infty | x^2\varphi(x) | \, dx < \infty \, ;$$
$$(Q_2\varphi)(x) = x^2 \varphi(x);$$

P_2 : $\mathcal{D}_{P_2}$ = ensemble des $\varphi \in L'^2$, absolument continues sur tout intervalle fini, nulles à l'origine, telles que

$$\int_0^\infty \left| \frac{\varphi'(x)}{2x} - \frac{\varphi(x)}{4x^2} \right|^2 dx < \infty \, ;$$
$$(P_2\varphi)(x) = -\frac{i}{2x}\left(\frac{d\varphi}{dx} - \frac{\varphi}{2x}\right).$$

On remarquera que nous avons dû ajouter la condition de nullité à l'origine dans la définition du domaine de P_2 pour que cet opérateur soit hermitien. Il est facile de vérifier que ces deux opérateurs vérifient la relation de commutation (4). L'opérateur Q_2 est autoadjoint et son spectre est continu, simple, étalé sur toute la demi-droite réelle positive. L'opérateur P_2 est symétrique, mais il n'est pas autoadjoint. Pour le voir il n'y a qu'à chercher son adjoint. Un raisonnement classique [*1*] montre que P_2^* a la même expression formelle que P_2, mais que son domaine est défini à partir de celui de P_2 en abandonnant la condition de nullité à l'origine.

Pour déterminer les valeurs propres de P_2^* il suffit de se reporter au calcul précédent (10) et (11) dont la conclusion reste valable : les nombres complexes à partie imaginaire positive sont valeurs propres de P_2^*. Or, on sait que cela signifie précisément que l'indice de défaut de P_2 est [1, 0], donc qu'il est impossible d'en trouver une extension autoadjointe dans L'^2, en élargissant son domaine de définition [*1*].

Il est cependant toujours possible de construire une extension autoadjointe de seconde espèce de P_2, c'est-à-dire de construire un opérateur autoadjoint défini dans un espace hilbertien contenant L'^2 comme sous-espace, qui se réduise à P_2 dans L'^2. Il suffit pour cela [*6*] de considérer l'opérateur $- P_2$ dans L'^2. Il a évidemment [0, 1] pour indice de défaut de sorte que, dans la somme hilbertienne $L'^2 \oplus L'^2$, l'opérateur

$$\{ \varphi_1, \varphi_2 \} \rightarrow \{ P_2\varphi_1, - P_2\varphi_2 \} \qquad (\varphi_1 \text{ et } \varphi_2 \in \mathcal{D}_{P_2}) \tag{12}$$

est symétrique et a [1, 1] pour indice de défaut : il est susceptible d'extensions autoadjointes.

Mais, puisque notre but est de revenir à l'espace initial L^2, nous considérerons plutôt l'espace $L''^2 = L^2 \ominus L'^2$ des fonctions définies sur le demi-axe négatif, mesurables et de carré sommable sur ce demi-axe. Dans L''^2 définissons alors les deux opérateurs :

Q_3 : $\mathfrak{D}_{Q_3}$ = ensemble des $\chi \in L''^2$ telles que

$$\int_{-\infty}^{0} | x^2 \chi(x) |^2 dx < \infty ;$$
$$(Q_3\chi)(x) = - x^2 \chi(x);$$

P_3 : $\mathfrak{D}_{P_3}$ = ensemble des $\chi \in L''^2$, absolument continues sur tout intervalle fini, nulles à l'origine, telles que

$$\int_{-\infty}^{0} \left| \frac{\chi'(x)}{2x} - \frac{\chi(x)}{4x^2} \right| dx < \infty ;$$
$$(P_3\chi)(x) = \frac{i}{2x}\left(\frac{d\chi}{dx} - \frac{\chi}{2x}\right).$$

On vérifie immédiatement que Q_3 est autoadjoint et a un spectre continu, simple, étalé sur toute la demi-droite réelle négative; que P_3 est symétrique et a [0, 1] pour indice de défaut; enfin que Q_3 et P_3 satisfont à la relation de commutation (4). Dans l'espace de Hilbert initial $L^2 = L'^2 \oplus L''^2$ définissons alors les opérateurs Q et P′ par

$$Q \{ \varphi, \chi \} = \{ Q_2\varphi, Q_3\chi \} \qquad (\varphi \in \mathfrak{D}_{Q_2}, \chi \in \mathfrak{D}_{Q_3})$$
$$P' \{ \varphi, \chi \} = \{ P_2\varphi, P_3\chi \} \qquad (\varphi \in \mathfrak{D}_{P_2}, \chi \in \mathfrak{D}_{P_3}),$$

Q peut être évidemment défini directement par

Q : $\mathfrak{D}_Q$ = ensemble des ψL^2 telles que

$$\int_{-\infty}^{\infty} | x^2 \psi(x) |^2 dx < \infty ;$$
$$(Q\psi)(x) = (\mathrm{sgn}\, x)\, x^2 \psi(x).$$

C'est un opérateur autoadjoint à spectre continu, simple, étalé sur toute la droite réelle. D'autre part, P′ est un opérateur symétrique qui a [1, 1] pour indice de défaut. Une extension autoadjointe P de P′ est obtenue simplement en abandonnant la condition, imposée aux $\psi(x) \in \mathfrak{D}_{P'}$, de nullité à l'origine [*1*].

En résumé, on peut définir P directement par :

P : $\mathfrak{D}_P$ = ensemble des $\psi \in L^2$, absolument continues sur tout intervalle fini, telles que

$$\int_{-\infty}^{\infty} | x^2 \psi(x) |^2 dx < \infty ;$$
$$(P\psi)(x) = - \frac{i\, \mathrm{sgn}\, x}{2x}\left(\frac{d\psi}{dx} - \frac{\psi}{2x}\right).$$

Il est alors facile de vérifier que cet opérateur est bien canoniquement associé à l'opérateur Q défini précédemment.

La transformation unitaire correspondante. — D'après ce que nous avons dit au début de cette étude, il doit exister une transformation unitaire de L^2 qui transforme q en Q et p en P, la mise en évidence de cette transformation justifiant directement que Q et P sont canoniquement associés. Pour obtenir cette transformation sous une forme simple, nous ne partirons pas de la représentation de Schrödinger, mais de la représentation dans l'espace des impulsions. Dans cette représentation l'espace hilbertien est toujours L^2, mais nous nous conformerons à l'usage constant en Physique et désignerons par k la variable indépendante. L'opérateur de multiplication par k est alors pris pour opérateur p et l'opérateur q est représenté par $i \frac{d}{dk}$.

Posons alors :

$$K(k, x) = \sqrt{\frac{|x|}{x}}\, e^{ikx^2 \operatorname{sgn} x}.$$

Un changement de variable évident permet de ramener la transformation intégrale de noyau $K(k, x)$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} K(k, x)\Psi(k)\, dk \tag{13}$$

à une transformation de Fourier et de montrer ainsi que la correspondance (13) définit bien une transformation unitaire de L^2, son inverse étant donnée par la formule réciproque

$$\Psi(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{K(k, x)}\, \psi(x)dx.$$

Enfin, les relations

$$k\, K(k, x) = -\frac{i}{2\,|x|}\left(\frac{d}{dx} - \frac{1}{2x}\right) K(k, x),$$

$$i \frac{d}{dk} K(k, x) = -\, x^2 \operatorname{sgn} x\, K(k, x)$$

montrent que la correspondance entre opérateurs q et p d'une part, Q et P de l'autre est bien celle qui a été annoncée.

Remarquons encore que, puisque la représentation de Schrödinger est précisément la représentation spectrale de q, on peut encore définir les opérateurs Q et P par les formules

$$Q = q \mid q \mid,$$
$$P = (2 \mid q \mid)^{-1}(p - (2q)^{-1}),$$

où $\mid A \mid$ désigne en général l'opérateur autoadjoint positif défini par $\mid A \mid^2 = A^*A$. A ce changement de représentation correspond, en Mécanique classique, la transformation canonique

$$Q = q^2 \operatorname{sgn} q\,; \qquad P = \frac{p}{2 \mid q \mid}.$$

Conclusion. — Si nous avons discuté aussi longuement cet exemple simple, c'est que nous voulions indiquer une méthode suffisamment générale pour être appliquée à de nombreux cas particuliers sans modification essentielle, tout en évitant un exposé trop théorique et d'application difficile. Nous avons donc montré qu'à toute transformation canonique de la Mécanique classique ne correspond pas nécessairement un changement de représentation en Mécanique quantique. C'est ainsi qu'il n'est possible de poser :

$$Q = f(q)$$

que si l'application $q \to f(q)$ applique biunivoquement la droite numérique sur elle-même. Remarquons toutefois que si l'on désire faire un changement de variable tel que l'opérateur Q soit effectivement l'opérateur de multiplication par une fonction quelconque f de la variable indépendante, il faut utiliser une représentation où les états du système sont représentés par des fonctions d'onde comportant autant de composantes qu'il y a de domaines où la fonction f est inversible. C'est ce qui correspond à la représentation (12) de l'exemple étudié ci-dessous, l'opérateur défini par (12) étant évidemment remplacé par l'une de ses extensions autoadjointes. Ainsi un état du système est représenté par la matrice colonne $\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$, où φ_1 et $\varphi_2 \in L'^2$. L'opérateur Q est défini par :

$\mathfrak{D}_Q$ = ensemble des paires φ_1 et $\varphi_2 \in L'^2$ telles que

$$\int_0^\infty [\mid x^2\varphi_1(x) \mid^2 + \mid x^2\varphi_2(x) \mid^2]dx < \infty,$$

$$Q \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 & \varphi_1(x) \\ -\,x^2 & \varphi_2(x) \end{pmatrix}, \qquad \text{soit encore} \quad Q = \begin{pmatrix} x^2 & 0 \\ 0 & -\,x^2 \end{pmatrix}$$

tandis que l'opérateur P sera défini par :

$\mathfrak{D}_P$ = ensemble des paires φ_1 et $\varphi_2 \in L'^2$, absolument continues sur tout intervalle fini, telles que $\varphi_1(0) = e^{i\alpha}\varphi_2(0)$ et que

$$\int_0^\infty \left[\left|\frac{\varphi_1'}{2x} - \frac{\varphi_1}{4x^2}\right|^2 + \left|\frac{\varphi_2'}{2x} - \frac{\varphi^2}{4x^2}\right|^2\right] dx < \infty,$$

$$P\begin{pmatrix}\varphi_1 \\ \varphi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\dfrac{i}{2x}\left(\dfrac{d\varphi_1}{dx} - \dfrac{\varphi_1}{2x}\right) \\ \dfrac{i}{2x}\left(\dfrac{d\varphi_2}{dx} - \dfrac{\varphi^2}{2x}\right)\end{pmatrix}.$$

Comme précédemment on construit immédiatement l'isomorphisme isométrique de L^2 sur $L'^2 \oplus L'^2$ qui correspond à ce changement de représentation : partant toujours de la représentation dans l'espace des impulsions, on aura :

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{x}\, e^{ikx^2}\Psi(k)\, dk \qquad (x \geqslant 0),$$

$$\varphi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{x}\, e^{-ikx^2}\Psi(k)\, dk \qquad (x \geqslant 0).$$

Remarquons enfin pour conclure que, lorsqu'on se borne à étudier des opérateurs quadratiques en P par exemple comme le sont certains hamiltoniens, ces considérations peuvent passer parfois inaperçues. La raison en est que l'expression différentielle formelle correspondant à l'opérateur P^2 est la même que celle qui correspond à l'opérateur P^*P. C'est, en particulier, le cas qui se présente lorsqu'on utilise les coordonnées sphériques dans l'espace physique à trois dimensions. On désigne alors symboliquement par p_r l'opérateur hermitien $-i\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$ qui a précisément le même comportement que l'opérateur P_2 considéré ci-dessus et ne correspond donc pas à la composante radiale de l'impulsion. On voit alors que, si l'on ne prend pas soin de préciser le domaine de définition des opérateurs, l'opérateur d'énergie cinétique correspondant $-\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$ peut aussi bien s'écrire p_r^2 que $p_r^* p_r$.

APPENDICE [*1*]

Le concept de multiplicité d'un spectre continu n'étant guère utilisé par les physiciens, nous avons rassemblé dans cet appendice, quelques indications qui ont pour but de justifier nos affirmations à ce sujet.

Soit A un opérateur autoadjoint défini dans un espace hilbertien $\mathcal{H}$. Nous désignerons par E_δ le projecteur spectral de A attaché à un intervalle mesurable δ de la droite réelle et par Δ l'ensemble de tous les intervalles mesurables. On dit que le spectre de A est simple s'il existe un vecteur φ de $\mathcal{H}$ tel que l'ensemble $\{ E_\delta\varphi;\ \delta \in \Delta \}$ soit un ensemble total dans $\mathcal{H}$. Le vecteur φ est appelé totalisateur pour A.

Il est aisé de démontrer que la condition nécessaire et suffisante pour que le spectre de A soit simple est qu'il existe un vecteur φ de $\mathcal{H}$, appartenant au domaine de définition de toutes les puissances entières positives de A et tel que l'ensemble $\{ A^k\varphi;\ k = 0, 1, 2, \dots \}$ soit total dans $\mathcal{H}$; φ est alors totalisateur pour A.

Pour vérifier que le spectre de q est simple, il suffit de se placer, comme nous l'avons fait, dans la représentation de Schrödinger. Considérons, en effet, $\varphi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \in L^2$; l'ensemble des $x^k e^{-\frac{x^2}{2}}$ est bien total dans L^2 puisque les fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique forment une base de L^2.

Plus généralement soit $\mathcal{N}$ un sous-espace de dimension finie de $\mathcal{H}$. Il sera dit totalisateur pour A si l'ensemble $\{ E_\delta(\mathcal{N});\ \delta \in \Delta \}$ est total dans $\mathcal{H}$. Par définition, nous appellerons multiplicité du spectre de A la dimension minimale des sous-espaces totalisateurs de A.

Montrons que le spectre de Q_1 est double. Tout d'abord ce spectre n'est pas simple; sinon il existerait un $\varphi(x) \in L^2$ tel que l'ensemble des $x^{2k}\varphi(x)$ pour $k = 0, 1, \dots$ soit total dans L^2. Mais cela est impossible puisque par exemple $x\overline{\varphi(x)}$ est orthogonal à tous les éléments de l'ensemble précédent. En effet, on a bien

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2k+1}[\varphi(x)]^2 dx = 0.$$

Il est, d'autre part, évident que

$$\varphi_1(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \qquad \text{et} \qquad \varphi_2(x) = x\, e^{-\frac{x^2}{2}}$$

définissent bien un sous-espace totalisateur pour Q_1 et que ce sous-espace est de dimension 2.

Par contre, dans l'espace de Hilbert L'^2, l'opérateur Q_2 a un spectre simple.

En effet, $\varphi(x) = x\, e^{-\frac{x^2}{2}}$ est totalisateur pour Q_2; car si $\psi(x) \in L'^2$ était orthogonal à tous les $x^{2k}\varphi(x)$, on aurait

$$0 = \int_0^{\infty} (x^2)^k x\, e^{-\frac{x^2}{2}}\, \psi(x)\, dx = \frac{1}{2}\int_0^{\infty} t^k e^{-\frac{t}{2}}\, \psi(\sqrt{t})\, dt.$$

Mais $\{ t^k e^{-\frac{t}{2}} ; k = 0, 1, \dots \}$ est un ensemble total dans L'^2 puisque les $e^{-\frac{t}{2}} L_k(t)$, où les L_k sont les polynômes de Laguerre, forment une base orthogonale de L'^2.

BIBLIOGRAPHIE

[1] N. I. Akhieser et I. M. Glazman, *Théorie des opérateurs linéaires dans l'espace de Hilbert* (en russe), Moscou-Léningrad, 1950.

[2] R. G. Cooke, *Linear operators*, Londres, 1953.

[3] Goldstein, *Classical Mechanics*, Cambridge (U. S. A.), 1953.

[4] F. R. Halpern, *Some examples of Canonical Transformations in Quantum Mechanics* (*J. Math. Phys.*, t. 3, 1962, p. 281).

[5] G. Ludwig, *Die Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin, 1954.

[6] M. A. Naïmark, *Extensions autoadjointes de seconde espèce d'un opérateur symétrique* (en russe) (*Izv. Akad. Nauk U. R. S. S.*, t. 4, 1940, p. 53).

[7] J. von Neuman, *Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren* (*Math. Ann.*, t. 104, 1930, p. 570).

(Manuscrit reçu le 24 septembre 1963).