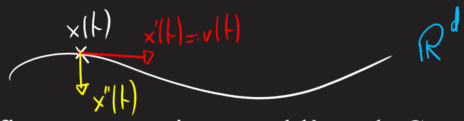
Qu'est ce que la quantification ?

Mécanique classique

théorie décrivant le mouvement des objets

Newton : · $m\, x''(t) = F(t, x(t))$



· Degrés de libertés $x(0), v(0)$ a fixer pour avoir un problème de Cauchy bien posé

Formulation Hamiltonienne

Energie ↪ $H(t,x,p)$

impulsion : variable dual de la vitesse
exemple : particule massive $p = mv$

Dynamique : équations de Hamilton-Jacobi :

$$\begin{cases} x'(t) = \nabla_p H(t,x(t),p(t)) \\ p'(t) = -\nabla_x H(t,x(t),p(t)) \end{cases} \quad (HJ)$$

$\Longleftrightarrow$

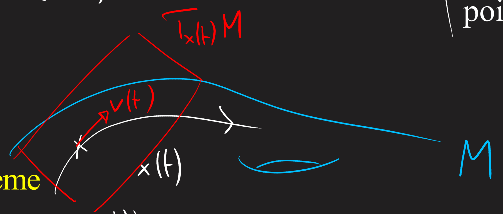
Formulation Lagrangienne $\mathcal{L}(t,x,v)$

$p := \nabla_v \mathcal{L}(t,x,v)$ variable duale pour la transformée de Legendre

$\frac{d}{dt}\nabla_v \mathcal{L}(t,x(t),x'(t)) = \nabla_x \mathcal{L}(t,x(t),x'(t))$ équation d' Euler-Lagrange

↪ point critique de $x \mapsto \int \mathcal{L}(t,x(t),x'(t))\,dt$ (action)

Structure symplectique



état du système

$$\begin{cases} x(t)\in M \\ x'(t)\in T_{x(t)}M \\ p(t)\in T^*_{x(t)}M \end{cases} \quad \text{donc} \quad \begin{cases} \binom{x(t)}{p(t)} \in T^*M \quad \text{espace des phases} \\ HJ \Leftrightarrow \binom{x}{p}'(t) = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & Id \\ -Id & 0 \end{pmatrix}}_{\text{forme symplectique}} \begin{pmatrix} \nabla_x H(t,x(t),p(t)) \\ \nabla_p H(t,x(t),p(t)) \end{pmatrix} \quad \text{flot sur } T^*M \end{cases}$$

Crochet de Poisson

$f,g : T^*M \to \mathbb{R}$ observables, $\{f,g\} := \nabla_x f\cdot\nabla_p g - \nabla_p f\cdot\nabla_x g$

$$\frac{d}{dt} f(x(t),p(t)) = \nabla_x f(x(t),p(t))\cdot x'(t) + \nabla_p f(x(t),p(t))\cdot p'(t) \underset{HJ}{=} \{f, H(t,\cdot)\}(x(t),p(t)) \quad \text{donc} \quad \boxed{\frac{d}{dt} f = \{f, H\}}$$

équation de Liouville

La dynamique est la donnée de l'Hamiltonien et de la structure (le crochet)

Mécanique quantique

Etat : $\psi \in H$, $\langle\psi,\psi\rangle = 1$, $\mathcal{H}$ Hilbert complexe séparable, ou plus généralement $\gamma \in \mathcal{L}^1(\mathcal{H})$, $\gamma \geq 0$, $\mathrm{Tr}[\gamma] = 1$

$\Big(\psi \mapsto \gamma_\psi := \psi\otimes\psi^* = |\psi\rangle\langle\psi|$ projection sur $\psi\Big)$

Observable : Opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$, théorème spectral $\sigma = \int_{\mathbb{R}} \lambda\, d\pi_\sigma(\lambda)$ (si σ compact : $\sigma = \sum'_{n\in\mathbb{N}} \lambda_n \Pi_n$)

Mesure : valeur propre de σ avec probabilité $\mathrm{Tr}[\gamma \Pi_\lambda]$. $\mathbb{P}$(la mesure de σ sur $\gamma \in \underbrace{\beta}_{\text{borélien de } \mathbb{R}}$) $:= \mathrm{Tr}[\gamma\Pi_\beta]$ où $\Pi_\beta = \int_\beta d\pi_\sigma(\lambda)$

exemple : $H = e_1\mathbb{C}\oplus e_2\mathbb{C} \simeq \mathbb{C}^2$, $\psi = \lambda_1 e_1 + \lambda_2 e_2$, $|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1$, $\sigma = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix}$

$\gamma_\psi = \psi\otimes\psi^* = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar\lambda_1 & \bar\lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\lambda_1|^2 & \lambda_1\bar\lambda_2 \\ \bar\lambda_1\lambda_2 & |\lambda_2|^2 \end{pmatrix}$, $\Pi_{a_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\mathrm{Tr}[\gamma_\psi \Pi_{a_1}] = \langle \psi, \Pi_{a_1}\psi\rangle = |\lambda_1|^2$

Effondrement :

$\gamma \xrightarrow{\text{mesure de } \beta} \Pi_\beta\gamma\Pi_\beta$

$\psi \longrightarrow \Pi_\beta\psi$

$\psi \to e_1$

Dynamique :

$$\begin{cases} i\hbar\,\partial_t \psi = H\psi & \text{équation de Schödinger} \\ \boxed{\partial_t \psi = \frac{i}{\hbar}[\gamma, H]} & \text{Liouville quantique} \end{cases}$$

$$i\hbar\,\partial_t(\psi\otimes\psi^*) = (H\psi)\otimes\psi^* - \psi\otimes\underbrace{(H\psi)^*}_{=\psi^* H} = H\gamma_\psi - \underbrace{\gamma_\psi H}_{= \langle\cdot, \psi H\cdot\rangle} = [H, \gamma_\psi] \quad \text{donc} \quad \partial_t \gamma_\psi = \frac{i}{\hbar}[\gamma_\psi, H]$$

Quantification

états	$(x,p) \in T^*M$	$\longrightarrow$	$q[(x,p)] \in \mathcal{L}^1(H)$ positif de trace 1
observables	$f : T^*M \to \mathbb{R}$	$\longrightarrow$	$q[f] : H \to H$ auto-adjoint
dynamique	$\{f, g\}$	$\longrightarrow$	$\frac{i}{\hbar}[q[f], q[g]]$ pas de foncteur

ON THE PRINCIPLES OF ELEMENTARY QUANTUM MECHANICS Groenewold

THE C∗-ALGEBRAIC FORMALISM OF QUANTUM MECHANICS, JONATHAN JAMES GLEASON

Observables

C* algèbre : $(A, *)$ — A : algèbre de Banach ; $*$: involution qui s'atisfait les mêmes propriétés que l'adjoint

$C_0(T^*M, \mathbb{R})$ est la sous algèbre des éléments auto-adjoints de $\underbrace{(C_0(T^*M, \mathbb{C}), \bar{\cdot})}$

Théorème de Gelfand : une C* algèbre commutative $\mathcal{A}$ est isomorphe (représentation de Gerlfand) à $C_0(\Phi_{\mathcal{A}}, \mathbb{C})$

$\Phi_{\mathcal{A}}$ topological space (spectre/representations/ideaux maximaux de A)

Observables classiques : éléments auto-adjoints d'une C* algèbre séparable commutative
les observables canoniques classiques sont X, P (polynômes)

Etats

changement de point de vue sur les états $T^*M \hookrightarrow C_0(T^*M, \mathbb{R})^*$

$x,p \longrightarrow (\varphi_{x,p} : f \mapsto f(x,p))$

$\varphi_{x,p}$ est positif $f \geq 0 \Rightarrow \varphi_{x,p}(f) \geq 0$
et normalisé $\varphi_{x,p}(1) = 1$

def : état classique $\varphi \in C_0(T^*M, \mathbb{C})^*$, positif normalisé

Théorème de Riesz-Markov $\varphi \in C_0(\underbrace{X}, \mathbb{C})^*$ est représenté par $\underbrace{\mu_\varphi}$ une mesure régulière $\varphi : C_0(X, \mathbb{R}) \to \mathbb{R}$, $f \mapsto \int f \, d\mu_\varphi$

X : espace tologique séparé locallement compact ; μ_φ : densité

remarque : rien de quantique pour le moment ! $\varphi(1) = \int d\mu_\varphi = \mu_\varphi(T^*M)$ donne bien la masse totale de l'état

Incertitude

Variance de f dans l'état φ : $\sigma_\varphi(f)^2 = \varphi\big((\underbrace{f - \varphi(f)}_{:= f_0})^2\big)$, $\sigma_\varphi(f)^2 \sigma_\varphi(g)^2 = \varphi(f_0^2)\,\varphi(g_0^2)$

Soit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $\varphi((\alpha f_0 - i\beta g_0)(\alpha f_0 + i\beta g_0)) = \alpha^2 \varphi(f_0^2) + \beta^2 \varphi(g_0^2) + \underset{\circledast}{\alpha\beta\varphi(i[f_0, g_0])} \geq 0$ donc $\begin{pmatrix} \varphi(f_0^2) & \frac{\varphi(i[f_0, g_0])}{2} \\ \frac{\varphi(i[f_0, g_0])}{2} & \varphi(g_0^2) \end{pmatrix} \geq 0$

donc $\varphi(f_0^2)\varphi(g_0^2) \geq \frac{1}{4}\varphi(i[f_0, g_0])^2$

On obtient $\boxed{\sigma_\varphi(f)\,\sigma_\varphi(g) \geq \frac{1}{2}|\varphi([f_0, g_0])|}$ non commutation => incertitude

Axiome (principe d'incetitude)
- les observables quantiques sont les éléments auto-adjoints d'une C* algèbre séparable non commutative $\mathcal{A}$
- les observables canoniques quantiques satisfont la relation canonique de commutation : $[\hat{X}, \hat{P}] \in \mathbb{C}$

Théorème de Gelfand-Naimark : une C* algèbre séparable non commutative est isomorphe (construction de Gelfand–Naimark–Segal) à une sous algèbre de $\mathcal{B}(H)$ pour un espace de Hilbert complexe séparable H

def : état quantique $\in \mathcal{A}^*$, positif normalisé

$\varphi(i[\hat{X}, \hat{P}]) = i[\hat{X}, \hat{P}]$, $\varphi(1) = i[\hat{X}, \hat{P}] \in \mathbb{R}$, $i\hbar := [\hat{X}, \hat{P}]$

Inégalité de Heisenberg : $\sigma_\varphi(\hat{X})\,\sigma_\varphi(\hat{P}) \geq \frac{\hbar}{2}$

Mesure

Mesure classique de f sur l'état φ, $\in \mathcal{B}$ (Borélien de $\mathbb{R}$) avec proba $\mu_\varphi(f^{-1}(\mathcal{B})) = f_*\mu_\varphi$ — mesure sur T^*M

mesure sur $\mathbb{R}$ — masse des points tq $f(x) \in \mathcal{B}$

$\sigma \in \mathcal{B}(H)$ auto-adjoint, $\quad \gamma : \mathcal{B}(H) \to \mathbb{C}$ positif, normalisé

prédual de $\mathcal{B}(H) = \mathcal{L}^1(H) \hookrightarrow \mathcal{B}(H)^*$
$\gamma \mapsto \mathrm{Tr}[\gamma\,\cdot\,]$

Donc $\gamma(\sigma) = \mathrm{Tr}[\gamma\sigma]$ et $\gamma(\mathbb{1}) = \mathrm{Tr}[\gamma] = 1$

$$\begin{cases} \sigma = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, d\pi_\sigma(\lambda) \\ f(\sigma) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda)\, d\pi_\sigma(\lambda) \\ \mathbb{1}_{\sigma\in\mathcal{B}} = \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1}_{\lambda\in\mathcal{B}}\, d\pi_\sigma(\lambda) = \pi_{\mathcal{B}} \end{cases}$$

$\mathbb{P}($la mesure de σ sur $\gamma \in \mathcal{B}) := \gamma(\sigma^{-1}(\mathcal{B})) = \gamma(\mathbb{1}_{\sigma\in\mathcal{B}}) = \gamma(\pi_{\mathcal{B}}) = \mathrm{Tr}[\gamma\pi_{\mathcal{B}}]$

Transformée de Wigner-Weyl

$M = \mathbb{R}^d$, $H_{\text{séparable}} \simeq L^2(\mathbb{R}^d)$, $\psi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ $\quad \hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ est la seule définition que satisfait $\hat{x}\,\delta_y = y\,\delta_y$

$\hat{p}$ caractérisé par $\hat{x}$ est la CCR

$\left([\hat{x},\hat{p}] = i\hbar = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} \text{ on } \delta_y : \quad x\hat{p}\delta_y(x) - y\hat{p}\delta_y(x) = i\hbar\,\delta_y(x) \Rightarrow (y-x)\cdot\hat{p}\,\delta_y(x) = i\hbar\,\delta_y(x) \right)$

$\hat{p} := -i\hbar\nabla$, $[\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) = -i\hbar\, x\cdot\nabla\psi(x) + i\hbar\nabla(x\psi(x)) = i\hbar\,\psi(x)\,(d)$, $\quad \hat{p} = \hbar\mathcal{F}^{-1}\hat{x}\mathcal{F}$

$$f = \frac{1}{(2\pi)^d}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \hat{f}(k,q)\, e^{i(k\cdot x + v\cdot p)}\, dk\, dv \qquad q[f] := \frac{1}{(2\pi)^d}\iint_{\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d} \hat{f}(k,q)\, e^{i(k\cdot\hat{x} + v\cdot\hat{p})}\, dk\, dv$$

Propriétés :

- $q(\{f,g\}) = \frac{i}{\hbar}[q(f), q(g)] + o(\hbar)$, $\quad [q(f), q(g)] = -i\hbar\, q[\{f,g\}] + o(\hbar^2)$
  $\hookrightarrow$ Great tool for semi-classic
- si f, g sont des polynomes dont un est de degrès 2, alors l'erreur est nulle
- $f(x,p) = g(x) \Rightarrow q(f) = g$ $\quad$ en particulier $\quad q(x) = \hat{x}$
- $q(p^i) = \hat{p}^i$ $\qquad\qquad\qquad\qquad q(p) = \hat{p}$

Calcul :

- $e^{i(k\cdot\hat{x} - q\cdot\hat{p})} \underset{\hat{p}}{=} e^{ik\cdot\hat{x}}\, e^{-iq\cdot\hat{p}}\, e^{\frac{\hbar}{2}k\cdot q}$ $\qquad\bullet\ e^{ik\hat{x}}\psi(x) = e^{ik\cdot x}\psi(x)$

Formule de Baker-Campbell-Hausdorff : $e^{X+Y} = e^{X}e^{Y}e^{-\frac{1}{2}[X,Y]}$ quand $[X,[X,Y]] = [Y,[X,Y]] = 0$

- $e^{-iq\cdot(-i\hbar\nabla)}\psi(x) = \sum_{k\in\mathbb{N}} \frac{(-\hbar q\cdot\nabla)^k}{k!}\psi(x) = \psi(x - \hbar q)$

Ouverture

- Von neuman algebras à la place de C* algèbre --> opérateurs non bornées, fonctions mesurables à la place de continues (mesure de indicatrices)
- Pourquoi $\mathbb{C}$? Solèr's theorem
- d'autres forme de quantification : path integral, geometric .. $\quad \int e^{-\frac{iS[x]}{\hbar}}\mathcal{D}x$ $\quad M = \mathbb{R}^d \to H = L^2(\mathbb{R}^d)$ et non $L^2(\mathbb{R}^{2d})$
- the collapse of wave functions ? (mesure --> système couplés, décohérence)
- dynamique :

Quantum mechanics: why complex Hilbert space
G. Cassinelli and P. Lahti

Invariance en temps : $(u(t))_{t\in\mathbb{R}_+}$ semi groupe d'évolution

$$u(t_1 + t_2) = u(t_1)\,u(t_2)$$

Conservation de la masse $\quad \mathrm{Tr}[u\gamma u^*] = \mathrm{Tr}[\gamma] \quad \Rightarrow uu^* = \mathrm{Id}$
$\quad$ "$\mathrm{Tr}[uu^*\gamma] = \mathrm{Tr}[\gamma]$"

self-adjoint

$\Rightarrow u(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_t}$, $\quad [u(t_1), u(t_2)] \Rightarrow H_{t_1} + H_{t_2} = H_{t_1+t_2} \quad \Rightarrow H_t = Ht$

$u(t) = e^{\frac{i}{\hbar}tH}$, $\quad \psi_n(t) = e^{\frac{i\lambda_n t}{\hbar}}\psi_n(0)$ $\quad t\in\mathbb{R}$ $\quad \in\mathbb{R}$ $\quad \Rightarrow$ a bande

Calcul pour WW

- $q_{\rho}(f(X))\,\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \iint \hat{f}(k)\,\delta_{v=0}\, e^{i(k.\hat{x} + v.\hat{p})}\, dk\, dv\, \Psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int \hat{f}(k)\, e^{ik.x}\, \Psi(x)\, dk = f(x)\,\Psi(x)$

$$\mathcal{F}(f(X))(k,v) = \hat{f}(k)\,\delta_{v=0}$$

- $\mathcal{F}(X) = i\nabla\delta$

$$\langle \mathcal{F}(\nabla\delta), \varphi\rangle = \langle \nabla\delta, \mathcal{F}(\varphi)\rangle = -\langle \delta, \nabla.\mathcal{F}(\varphi)\rangle = i\langle \delta, \mathcal{F}(X\varphi)\rangle = i\langle \mathcal{F}(\delta), X\varphi\rangle$$
$$= i\langle 1, X\varphi\rangle = \langle -iX\, \varphi\rangle$$

donc $\mathcal{F}(\nabla\delta) = -iX$

- $q(p^k)\,\Psi(x) = \frac{i^k}{(2\pi)^{d/2}} \int \nabla^k \delta_{v=0}\, e^{iv.\hat{p}}\, \Psi(x)\, dv = \frac{i^k}{(2\pi)^{d/2}} \int \nabla^k \delta_{v=0}\, \Psi(x+\hbar v)\, dv$

$\mathcal{F}(p^k)(k,v) = i^k \nabla^k \delta_{v=0} \quad \delta_{k=0}$

$$= \frac{(-i\hbar)^k}{(2\pi)^{d/2}} \int \delta\, \nabla^k \Psi(x+\hbar v)\, dv = \hat{p}^k\, \Psi(x)$$