

Formalisme de Dirac et surprises mathématiques en mécanique quantique¹

Dédié à la mémoire de **Tanguy Altherr** (1963 - 1994)²

François Gieres

*Institut de Physique Nucléaire
Université Claude Bernard (Lyon 1)
43, boulevard du 11 novembre 1918
F - 69622 - Villeurbanne Cedex*

Résumé

Différents formalismes sont utilisés en mécanique quantique pour la description des états et des observables : la mécanique ondulatoire, la mécanique matricielle et le formalisme invariant. Nous discutons les problèmes et inconvénients du formalisme invariant ainsi que ceux de la notation des bras et kets introduite par Dirac dans ce contexte. Nous indiquons comment tous les problèmes peuvent être résolus ou du moins évités. Une série d'exemples illustre les points soulevés et montre comment l'insouciance mathématique peut aisément conduire à des contradictions mathématiques surprenantes.

¹Ceci est la traduction française du preprint LYCEN 9960a. Ce travail a été soutenu par la Fondation Alexander von Humboldt lors d'un séjour de l'auteur à l'Institut für Theoretische Physik de l'Université de Göttingen.

²Je dédie ces notes à la mémoire de Tanguy Altherr qui nous a quitté de manière très brutale dans les montagnes qu'il aimait tant (et où j'ai pu faire de belles courses avec lui). Pour ce qui est du sujet de ces notes (sujet duquel j'ai eu le plaisir de discuter avec lui), Tanguy appréciait bien le formalisme de Dirac et savait certainement l'appliquer à de vrais problèmes physiques (comme ceux sur lesquels il travaillait avec un enthousiasme, une énergie et une productivité impressionnantes). Même s'il ne partageait pas mes préoccupations à ce sujet, il aimait bien discuter des problèmes concernant le formalisme général de la physique quantique.

Table des matières

1	Introduction	1
2	Mécanique quantique et espaces de Hilbert	2
2.1	Les différents espaces de Hilbert	2
2.2	Liens entre les espaces de Hilbert	4
3	Discussion du formalisme invariant	5
3.1	Problèmes	6
3.2	“Solution” des problèmes	7
4	Discussion des notations de Dirac	8
4.1	Inconvénients	8
4.2	Avantages	10
4.3	“Solution” des problèmes	11
5	Conclusion	12
A	Le formalisme mathématique	14
A.1	Les notations de Dirac	14
A.2	Opérateurs linéaires	15
A.3	Triplets de Gelfand (vecteurs généralisés)	17
B	Surprises mathématiques en mécanique quantique	22
C	Il n’y a pas de surprise	26

1 Introduction

Les différentes formulations ou ‘représentations’ utilisées en mécanique quantique pour la description des états d’une particule (ou d’un système de particules) sont essentiellement au nombre de trois : la mécanique ondulatoire, la mécanique matricielle et le formalisme invariant. Les deux premières utilisent des espaces de Hilbert concrets et la troisième un espace de Hilbert abstrait. En général la dernière formulation est présentée moyennant la notation des bras et kets de Dirac [1], notation qui va d’habitude de pair avec une certaine interprétation des opérations mathématiques donnée par Dirac. Rappelons-en les principaux ingrédients :

- $|\Psi\rangle$ et $\langle\Psi|$
- $A|\Psi\rangle$ et $\langle\Psi|A^\dagger$
- $\langle\Phi|A|\Psi\rangle$
- $\{|n\rangle\}_{n\in\mathbf{N}}$ et $\{|x\rangle\}_{x\in\mathbf{R}}$
- $|n_1, n_2, \dots\rangle$ associé à un ECOC $\{A_1, A_2, \dots\}$.

Dans la section prochaine et dans l’annexe A, nous précisons ces notations tout en rappelant quelques notions mathématiques importantes. Dans les sections 3 et 4, nous discuterons successivement les questions suivantes :

1. Est-ce qu’une représentation est préférable à une autre du point de vue mathématique ou pratique ? En particulier, nous discuterons le statut du *formalisme invariant* auquel la préférence est donnée dans la plupart des ouvrages récents.
2. Quels sont les avantages, inconvénients et problèmes des *notations de Dirac* et de leur interprétation ? (Les règles de calcul déduites de ces notations et de leur interprétation sont d’habitude appliquées dans le cadre du formalisme invariant et représentent alors un calcul symbolique.)

Pour anticiper nos réponses à ces questions, nous signalons d’ores et déjà que nous aboutirons à la conclusion que l’application *systematique* du formalisme invariant et l’usage *rigide* des notations de Dirac - formalisme et usage prônés dans la majorité des traités modernes de la mécanique quantique - ne sont pas recommandables ni du point de vue mathématique ni du point de vue pratique. Des compromis qui retiennent les avantages de ces formalismes tout en évitant leurs inconvénients seront indiqués. Les conclusions qu’on peut en tirer pour la pratique et pour l’enseignement de la théorie quantique sont résumées dans la section finale.

Dans ce contexte, il est peut-être utile de mentionner que la monographie classique de Dirac [1] (et donc la majorité des ouvrages modernes qu’elle a inspirés) contient un bon nombre d’affirmations qui sont ambiguës ou incorrectes du point de vue mathématique : ces points ont été soulevés et discutés par Jauch [2]. L’état des choses peut être décrit de la manière suivante [3] : “L’élégance, la clarté apparente et la force percutante du formalisme de Dirac sont malheureusement acquises au détriment de l’introduction de fictions mathématiques. [...] On a une ‘machinerie’ formelle dont la signification est impénétrable,

surtout pour le débutant, et dont celui-ci ne peut pas reconnaître la problématique.” Aussi le verdict de mathématiciens majeurs comme J. Dieudonné est foudroyant [4] : “Mais c’est lorsqu’on aborde les théories mathématiques qui sont à la base de la mécanique quantique que l’attitude de certains physiciens dans le maniement de ces théories confine véritablement au délire. [...] On se demande ce qui peut rester dans l’esprit d’un étudiant lorsqu’il a absorbé cette invraisemblable accumulation de non-sens, une véritable ‘bouillie pour les chats’! Ce serait à croire que les physiciens d’aujourd’hui ne sont à l’aise que dans le flou, l’obscur et le contradictoire.” Certes nous pouvons reprocher à beaucoup de mathématiciens leur intransigeance et leur refus de faire le moindre effort pour comprendre des formulations manquant de rigueur, mais leur jugement devrait quand même nous donner à réfléchir, une réflexion à laquelle nous espérons contribuer de manière constructive par le présent travail.

En fait, on ne peut pas nier que l’insouciance mathématique (qui est pratiquement inhérente au calcul symbolique de Dirac) conduit souvent et vite à des contradictions apparentes qui sont parfois très étonnantes : nous allons illustrer ceci par une série d’exemples simples qui sont présentés dans l’annexe B. Dans la littérature, de telles contradictions se sont manifestées dans l’étude de phénomènes physiques plus compliqués et elles ont même conduit à la mise en question d’effets physiques comme par exemple l’effet d’Aharonov et Bohm [5]. Les contradictions peuvent seulement être écartées en faisant appel à une formulation mathématique plus précise des problèmes, formulation qui va souvent de pair avec une compréhension physique plus profonde des phénomènes étudiés. Dans les annexes A et C, nous introduisons les outils mathématiques appropriés (qui sont bien connus en physique mathématique, mais ne pas évoqués dans la plupart des ouvrages de mécanique quantique) et nous montrons comment ils permettent de résoudre de manière efficace tous les problèmes posés.

2 Mécanique quantique et espaces de Hilbert

Les différentes représentations utilisées en mécanique quantique sont discutées dans de nombreux ouvrages [6] et nous les résumerons dans la suite pour fixer les notations. La théorie mathématique sous-jacente est exposée dans les livres d’analyse fonctionnelle [7]. Parmi ceux-ci il existe d’excellentes monographies qui présentent la théorie générale avec ses applications à la mécanique quantique [8, 9, 10] (voir aussi [11, 12, 13, 14]).

2.1 Les différents espaces de Hilbert

Nous considérons le mouvement d’une particule sur une droite paramétrée par $x \in \mathbf{R}$. (La généralisation à un intervalle borné, à 3 dimensions, au spin ou à un système de particules ne pose pas de problèmes notables.) Les espaces de Hilbert utilisés pour la description des états de la particule sont essentiellement au nombre de trois.

(1) “**Mécanique ondulatoire**” : [de Broglie, Schrödinger, 1923 - 1926]

On considère l’espace des fonctions de carré sommable (fonctions d’onde),

$$L^2(\mathbf{R}, dx) = \{f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C} \mid \int_{\mathbf{R}} dx |f(x)|^2 < \infty\} ,$$

avec le produit scalaire³

$$\langle f, g \rangle_{L^2} = \int_{\mathbf{R}} dx \overline{f(x)} g(x) \quad \text{pour } f, g \in L^2(\mathbf{R}, dx) .$$

Cet espace est relié par la transformation de Fourier à l’espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R}, dp)$ des fonctions d’onde dépendant de l’impulsion p :

$$\begin{aligned} \mathcal{F} : L^2(\mathbf{R}, dx) &\longrightarrow L^2(\mathbf{R}, dp) & (1) \\ f &\longmapsto \mathcal{F}f \quad \text{avec} \quad (\mathcal{F}f)(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbf{R}} dx f(x) \exp(-\frac{i}{\hbar}px) . \end{aligned}$$

(2) “**Mécanique matricielle**” : [Heisenberg, Born, Jordan, Dirac, 1925 - 1926]

On travaille avec l’espace des suites infinies de carré sommable,

$$l_2 = \{\vec{x} = (x_1, x_2, \dots) \mid x_k \in \mathbf{C} \text{ et } \sum_{k=1}^{\infty} |x_k|^2 < \infty\} ,$$

avec le produit scalaire

$$\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle_{l_2} = \sum_{k=1}^{\infty} \overline{x_k} y_k .$$

L’équivalence entre la mécanique ondulatoire et la mécanique matricielle a été démontrée en 1926 par Schrödinger. Elle représentait le point de départ pour la recherche d’une version “invariante” de la mécanique quantique, recherche qui conduisit, par l’intermédiaire des travaux de Dirac et Jordan, à l’étude des opérateurs linéaires agissant sur un espace de Hilbert abstrait [15, 16].

Au fait, l’espace l_2 a été introduit en 1912 par D.Hilbert dans ses travaux sur les équations intégrales, mais une définition axiomatique de l’espace de Hilbert a seulement été donnée en 1927 par J.von Neumann dans un travail sur le fondement mathématique de la mécanique quantique [14]. C’est une coïncidence remarquable que la monographie de Courant et Hilbert [17] développant les mathématiques de l’espace de Hilbert ait paru en 1924 et qu’elle semble avoir été écrite expressément pour les physiciens de l’époque⁴. Dans la suite, cette théorie a trouvé des raffinements qui sont principalement dûs à von Neumann [16], à Schwartz [19] et à Gelfand [20] et qui permettent de décrire d’une manière précise toutes les observables et états en mécanique quantique.

³Le complexe conjugué de $z \in \mathbf{C}$ est noté par \bar{z} ou z^* .

⁴D.Hilbert : “I developed my theory of infinitely many variables from purely mathematical interests and even called it ‘spectral analysis’ without any presentiment that it would later find an application to the actual spectrum of physics.” [18]

(3) **“Formalisme invariant”** : [Dirac, Jordan, von Neumann, 1926 - 1931]

On utilise un espace de Hilbert complexe abstrait \mathcal{H} qui est *séparable* (ce qui veut dire qu’il admet une base orthonormée constituée d’une famille dénombrable de vecteurs) et *de dimension infinie*.

Dans l’annexe A, nous avons résumé les notions fondamentales de la théorie des espaces de Hilbert ainsi que la notation des bras et kets développée par Dirac dans ce cadre à partir de 1939 [1]. Dirac a inventé ces notations astucieuses suite à une interprétation particulière des expressions faisant intervenir les vecteurs et opérateurs. L’interprétation qu’il en a donné et les avantages et inconvénients qui en résultent seront discutés dans la section 4.

2.2 Liens entre les espaces de Hilbert

Pour décrire les liens entre les espaces de Hilbert introduits dans la section précédente, nous avons besoin des concepts d’opérateur unitaire et d’isomorphisme [8].

Définition 1 *Pour $i = 1, 2$, soit \mathcal{H}_i un espace de Hilbert complexe séparable avec produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_i}$. Un opérateur linéaire $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ est dit unitaire si*

- (i) *U est partout défini sur \mathcal{H}_1 .*
- (ii) *L’image de \mathcal{H}_1 par U est \mathcal{H}_2 tout entier.*
- (iii) *U préserve le produit scalaire :*

$$\langle Uf, Ug \rangle_{\mathcal{H}_2} = \langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_1} \quad \text{pour tout } f, g \in \mathcal{H}_1 \quad . \quad (2)$$

Deux espaces de Hilbert \mathcal{H}_1 et \mathcal{H}_2 qui sont reliés par un opérateur unitaire sont dits isomorphes et on écrit $\mathcal{H}_1 \simeq \mathcal{H}_2$.

Concernant les espaces de Hilbert intervenant en mécanique quantique, nous disposons d’un résultat classique de l’analyse fonctionnelle :

Théorème 1 (i) *Les espaces de Hilbert complexes l_2 , $L^2(\mathbf{R}, dx)$ et $L^2(\mathbf{R}, dp)$ sont séparables et de dimension infinie.*

(ii) *Tout espace de Hilbert complexe qui est séparable et de dimension infinie est isomorphe à l_2 .*

Il suit de ce résultat que tous les espaces de Hilbert introduits ci-dessus sont isomorphes :

$$\boxed{\mathcal{H} \simeq l_2 \simeq L^2(\mathbf{R}, dx) \simeq L^2(\mathbf{R}, dp)} \quad . \quad (3)$$

En particulier, le théorème de Parseval et Plancherel dit que la transformation de Fourier (1) réalise l’isomorphisme entre $L^2(\mathbf{R}, dx)$ et $L^2(\mathbf{R}, dp)$:

$$\langle \mathcal{F}f, \mathcal{F}g \rangle = \langle f, g \rangle \quad \text{pour tout } f, g \in L^2(\mathbf{R}, dx) \quad .$$

D’une manière générale, le passage entre \mathcal{H} et les autres espaces se fait en choisissant une base orthonormée $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbf{N}}$ (ou une base orthonormée généralisée $\{|x\rangle\}_{x \in \mathbf{R}}$) de \mathcal{H} et

en associant à tout vecteur $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ l'ensemble de ses composantes par rapport à cette base :

$$\begin{aligned} \psi_n &:= \langle n|\Psi\rangle \quad \text{pour } n \in \mathbf{N} & , & \quad \vec{\psi} \equiv (\psi_0, \psi_1, \dots) \in l_2 \\ \psi(x) &:= \langle x|\Psi\rangle \quad \text{pour } x \in \mathbf{R} & , & \quad \psi \in L^2(\mathbf{R}, dx) . \end{aligned}$$

Dans la deuxième expression, l'action de $\langle x|$ sur $|\Psi\rangle$ est à comprendre au sens d'une action de distribution - voir annexe A.3.

Le passage entre $L^2(\mathbf{R}, dx)$ et l_2 se fait de manière analogue : à la fonction $\psi \in L^2(\mathbf{R}, dx)$ on associe la suite $(\psi_0, \psi_1, \dots) \in l_2$ constituée des composantes $\psi_n := \langle \varphi_n, \psi \rangle_{L^2}$ de ψ par rapport à une base orthonormée $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbf{N}}$ de $L^2(\mathbf{R}, dx)$.

3 Discussion du formalisme invariant

Comme les différents espaces de Hilbert utilisés en mécanique quantique sont tous isomorphes, ils sont complètement équivalents du point de vue mathématique. (Ils représentent des réalisations différentes d'une même structure abstraite.) Cependant, du point de vue pratique, certains espaces sont plus appropriés que d'autres⁵.

1. Le calcul matriciel basé sur l'espace l_2 n'est pas facilement maniable et ce formalisme n'a guère été utilisé après les débuts de la mécanique quantique (1926) où il a joué un rôle important [21].
2. L'arène des phénomènes physiques est l'espace dit de configuration paramétré par x et les conditions aux limites ou de régularité concernent directement les fonctions d'onde définies sur cet espace, ce qui favorise l'utilisation de l'espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R}, dx)$.
3. Le choix d'un espace de Hilbert abstrait \mathcal{H} est d'habitude motivé par l'analogie avec la géométrie dans l'espace euclidien \mathbf{R}^n (ou \mathbf{C}^n) : l'utilisation de "vecteurs abstraits" est plus géométrique que celle de leurs composantes. Ainsi il est tentant de travailler avec des vecteurs $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ tout en interprétant les suites de l_2 ou les fonctions de $L^2(\mathbf{R}, dx)$ comme les composantes des vecteurs $|\Psi\rangle$ par rapport à différentes bases de \mathcal{H} . Dans cet esprit, l'utilisation d'un espace de Hilbert abstrait en mécanique quantique est souvent présentée comme étant plus générale que la mécanique ondulatoire ou matricielle [6]. Cependant il y a des différences importantes entre les espaces vectoriels de dimension finie et ceux de dimension infinie qui font en sorte que l'analogie avec la géométrie ordinaire est très délicate et douteuse. Nous allons maintenant discuter les problèmes résultants qui montrent que le choix d'un espace de Hilbert abstrait en mécanique quantique obscurcit et complique des points importants de la théorie.

⁵G.Orwell : "All animals are equal, but some animals are more equal than others."

3.1 Problèmes

- Pour l'étude de problèmes simples comme par exemple la détermination du spectre d'énergie de l'oscillateur harmonique (pour lequel les fonctions propres de l'hamiltonien sont des éléments bien définis de $L^2(\mathbf{R}, dx)$), il faut commencer par introduire les distributions propres $|x\rangle$ de l'opérateur de position qui n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert \mathcal{H} (annexe A.3).
- Comme nous l'avons souligné dans l'annexe A et illustré dans l'annexe C, la définition d'un opérateur linéaire sur un espace de Hilbert de dimension infinie nécessite la donnée d'une prescription d'opération et d'un domaine de définition de cette opération. Cet aspect ne constitue pas simplement un point de détail mathématique, puisque le spectre de l'opérateur est très sensible au domaine de définition (conditions aux limites, ...). Par exemple, suivant le choix du domaine de définition, le spectre de l'opérateur d'impulsion $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ sur un intervalle compact $[a, b] \subset \mathbf{R}$ peut être vide, tout \mathbf{C} ou un sous-ensemble de \mathbf{R} (voir annexe C et référence [9]). Alors que ce problème est bien posé dès le départ pour les fonctions d'onde définies sur l'espace de configuration, il ne l'est pas de la même façon pour un espace de Hilbert abstrait. Cette problématique se retrouve en mécanique statistique quantique : par exemple, la définition de la pression associée à un ensemble de particules confinées dans un réservoir fait intervenir les conditions aux limites [22].
- Dans le formalisme invariant de la mécanique quantique, une *observable* est définie comme étant un “opérateur hermitien dont les vecteurs propres orthonormés définissent une base de l'espace de Hilbert” [6]. Partant de cette définition, on peut alors montrer d'une manière formelle que les opérateurs de position et d'impulsion sur \mathbf{R} sont des observables. Des complications notables apparaissent déjà dans \mathbf{R}^2 ou \mathbf{R}^3 , si l'on considère des coordonnées non-Cartésiennes ; par exemple, la composante radiale P_r de l'opérateur d'impulsion dans \mathbf{R}^3 est hermitien, mais elle ne représente pas une observable - voir Messiah [6] chap.9. Et il existe des opérateurs nettement plus compliqués comme par exemple des hamiltoniens avec des potentiels aléatoires, des potentiels du type $1/x^n$ ou $\delta_{x_0}(x)$ ou encore des hamiltoniens sur des espaces de configuration qui ne sont pas topologiquement triviaux comme pour l'effet de Aharonov et Bohm ou pour les anyons [8, 23, 24]. La définition d'une observable rappelée plus haut nécessite alors d'imposer des conditions *ad hoc* sur les fonctions d'onde associées aux états propres (conditions de régularité, de finitude, d'univalueur, ...); par ailleurs, elle nécessite la détermination explicite d'un système orthonormé de vecteurs propres et la vérification de la relation de fermeture pour ce système.

Dans une approche qui tient compte des domaines de définition, une observable est simplement donnée par un opérateur qui est auto-adjoint (annexe A.2). Cette condition assure que le spectre de l'opérateur est réel et que ses vecteurs propres (généralisés) engendrent une base (généralisée) de l'espace de Hilbert (“théorème spectral de Hilbert”). Par ailleurs, il existe des critères simples pour décider quand un opérateur donné est auto-adjoint ou pour classer les différentes manières suivant

lesquelles on peut le rendre auto-adjoint - voir [8, 9, 25] et annexe C. (En général, si un opérateur admet plusieurs extensions auto-adjointes, alors ces dernières décrivent différentes situations physiques [26, 8].) En particulier, il n'est pas nécessaire de faire appel à des propriétés *ad hoc* de la fonction d'onde comme celles mentionnées plus haut ou d'essayer de déterminer un système complet de vecteurs propres orthonormés. L'intérêt d'une approche simple et précise apparaît aussi dans la théorie des perturbations [25] ou la théorie de la diffusion [27].

- Une notion importante de la mécanique quantique est celle d'un ECOC (ensemble complet d'observables qui commutent). Elle fait intervenir la commutativité d'opérateurs auto-adjoints qui représente un point délicat pour les opérateurs non bornés. En effet, deux opérateurs auto-adjoints A et B commutent si et seulement si tous les projecteurs intervenant dans leurs décompositions spectrales respectives commutent [8]. Malheureusement des contre-exemples montrent que pour la commutativité de A et B il n'est pas suffisant que $[A, B] = 0$ sur un sous-espace dense de \mathcal{H} sur lequel cette relation est bien définie [8]. Certes ces exemples n'apparaissent guère en pratique, mais dans une approche qui tient compte des domaines de définition, on dispose de tous les éléments auxquels il faut faire appel si une complication mathématique se présente.

Concernant les points mathématiques soulevés, nous soulignons qu'en mécanique quantique une formulation précise n'est pas seulement nécessaire pour décider de l'existence ou de la non-existence d'effets physiques (comme par exemple l'effet de Aharonov et Bohm [5]), mais aussi pour discuter les problèmes difficiles de l'interprétation (théorie de la mesure, objectivité et réalité, ...) [28]. Par ailleurs, une telle formulation s'applique directement à d'autres domaines de la physique, un exemple étant le chaos dans les systèmes dynamiques classiques [29].

3.2 “Solution” des problèmes

Certains des problèmes soulevés dans la section précédente sont tellement profonds qu'il semble plus opportun de les éviter que d'y remédier. Les complications proviennent surtout du fait que l'on veut - pour des raisons conceptuelles - mettre en avant la structure géométrique d'espace de Hilbert qui est sous-jacente à la théorie. Or celle-ci est également implicite en mécanique ondulatoire où les problèmes soulevés sont *absents* ou du moins *bien posés dès le départ*. Il est donc facile d'éviter les ennuis mathématiques ou du moins de les rendre plus transparents.

En particulier, pour l'enseignement de la mécanique quantique, une “solution” évidente des problèmes est de donner une introduction à la mécanique ondulatoire qui souligne les structures géométriques sous-jacentes et d'indiquer l'arbitraire de cette formulation en passant à d'autres représentations comme la mécanique matricielle. En modifiant la définition explicite de l'espace de Hilbert et de son produit scalaire, le formalisme de la mécanique ondulatoire sur \mathbf{R} se généralise aisément à plusieurs dimensions spatiales, au spin ou à des systèmes de particules. (L'arbitraire de la représentation peut aussi être

mis en évidence en discutant le passage entre \mathcal{H} et $L^2(\mathbf{R}, dx)$ tout en travaillant avec les fonctions d'onde pour le reste.)

4 Discussion des notations de Dirac

Comme il a été mentionné dans l'introduction, le formalisme des bras et kets de Dirac se résume d'une part dans une certaine écriture des vecteurs, formes linéaires, ... et d'autre part dans une interprétation particulière des opérations mathématiques qui font intervenir ces quantités.

4.1 Inconvénients

Cette écriture, ou plutôt son interprétation, présente un certain nombre d'inconvénients plus ou moins gênants. Parmi ceux-ci le plus grave est le fait qu'il est *impossible* de donner un sens précis à l'adjoint A^\dagger (d'un opérateur non borné A), si l'on adhère strictement à l'interprétation de Dirac (voir [3] et aussi [30]). Rappelons à ce sujet la définition fondamentale de Dirac (voir par exemple les équations (B.45) et (B.51) du chap.II de Cohen-Tannoudji et al. [6]) :

$$(\langle \Phi|A|\Psi \rangle = \langle \Phi|(A|\Psi) \rangle \equiv \langle \Phi|A|\Psi \rangle \quad \text{avec} \quad \langle \Phi|A = \langle A^\dagger \Phi| \quad . \quad (4)$$

D'après ces relations, on ne sait pas s'il faut interpréter l'expression $\langle \Phi|A|\Psi \rangle$ comme⁶

$$\langle A^\dagger \Phi|\Psi \rangle \quad (\text{dans quel cas } |\Phi \rangle \in \mathcal{D}(A^\dagger) \text{ et } |\Psi \rangle \in \mathcal{H})$$

ou comme

$$\langle \Phi|A\Psi \rangle \quad (\text{dans quel cas } |\Psi \rangle \in \mathcal{D}(A) \text{ et } |\Phi \rangle \in \mathcal{H}),$$

sauf si l'on réintroduit les parenthèses (ce qui enlève évidemment la simplicité et élégance du calcul). Hélas [8], il se peut que $\mathcal{D}(A^\dagger) = \{0\}$ pour un opérateur A défini sur un sous-espace dense de \mathcal{H} . Même si ce cas de figure ne se présente guère en pratique, les exemples 3 et 7 présentés dans l'annexe B montrent que l'ignorance des domaines de définition peut aisément conduire à des contradictions et résultats incorrects : le traitement correct d'un problème faisant intervenir des opérateurs qui ne peuvent pas être partout définis (opérateurs non bornés) est donc délicat.

Si l'on convient que $\langle \Phi|A|\Psi \rangle$ est à interpréter comme $\langle \Phi|(A|\Psi) \rangle$ de sorte que $\langle \Phi|A$ ne représente pas $\langle A^\dagger \Phi|$, mais simplement une composition d'applications (selon l'équation (17)), alors les ambiguïtés mathématiques concernant les éléments matriciels sont écartées. Cependant il reste encore des inconvénients : nous allons discuter ceux-ci dans le cas habituel où l'on applique strictement la notation des bras et kets dans un espace de Hilbert abstrait \mathcal{H} qui est de dimension infinie.

⁶ $\mathcal{D}(A)$ dénote le domaine de définition de l'opérateur A (annexe A.1).

- *Notation rigide* : Rappelons d’abord la définition standard de l’adjoint A^\dagger d’un opérateur linéaire⁷ $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$:

$$\langle |\Phi\rangle, A|\Psi\rangle \rangle_{\mathcal{H}} = \langle A^\dagger|\Phi\rangle, |\Psi\rangle \rangle_{\mathcal{H}} \quad \text{pour tout } |\Phi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H} . \quad (5)$$

Si l’on adhère rigidement à la notation de Dirac, alors l’expression sur la droite doit être réécrite en utilisant l’antisymétrie du produit scalaire, $\langle \Phi|\Psi\rangle = \langle \Psi|\Phi\rangle^*$; ainsi la relation (5) qui définit l’adjoint de A devient

$$\langle \Phi|A|\Psi\rangle = \langle \Psi|A^\dagger|\Phi\rangle^* \quad \text{pour tout } |\Phi\rangle, |\Psi\rangle \in \mathcal{H} . \quad (6)$$

En conséquence, l’élément matriciel $\langle A|\Phi\rangle, |\Psi\rangle \rangle_{\mathcal{H}}$ peut seulement être représenté par $\langle \Psi|A|\Phi\rangle^*$ ou par $\langle \Phi|A^\dagger|\Psi\rangle$. Un exemple fréquemment utilisé est donnée par

$$\|A|\Psi\rangle\|^2 = \langle A|\Psi\rangle, A|\Psi\rangle \rangle_{\mathcal{H}} = \langle |\Psi\rangle, A^\dagger A|\Psi\rangle \rangle_{\mathcal{H}} \equiv \langle \Psi|A^\dagger A|\Psi\rangle ,$$

où la dernière expression est la seule écriture admissible suivant Dirac.

- *Manque de naturel et de simplicité* : Comme indiqué dans l’annexe A, on peut se passer de la discussion de l’espace dual \mathcal{H}^* (l’espace des bras), puisque celui-ci est isométrique à \mathcal{H} . Or le formalisme de Dirac fait un usage systématique de \mathcal{H}^* . Alors que l’on est habitué à des opérateurs et matrices agissant sur “tout ce qui vient après”, il faut distinguer dans ce formalisme entre l’action des opérateurs linéaires à droite et à gauche [6],

$$\begin{aligned} A(\lambda|\Phi\rangle + \mu|\Psi\rangle) &= \lambda A|\Phi\rangle + \mu A|\Psi\rangle & (\lambda, \mu \in \mathbf{C}) \\ (\lambda\langle\Phi| + \mu\langle\Psi|)A &= \lambda\langle\Phi|A + \mu\langle\Psi|A , & (7) \end{aligned}$$

ce qui entraîne des ambiguïtés potentielles concernant les domaines de définition. Par ailleurs, il faut changer l’ordre naturel des vecteurs dans certaines expressions qui sont souvent utilisées (comparer les équations (5) et (6)).

- *Règles de calcul changeantes* : Quand on passe de \mathcal{H} à $L^2(\mathbf{R}, dx)$ (ce que l’on est pratiquement toujours obligé de faire à un certain moment, puisque la physique a lieu dans l’espace des configurations), alors une partie des règles de calcul changent : les opérateurs de différentiation sur $L^2(\mathbf{R}, dx)$ agissent uniquement vers la droite, leurs éléments matriciels peuvent s’écrire comme $\langle A\varphi, \psi \rangle_{L^2}$, ... etc.
- *Interprétation mathématique difficile dans un espace de Hilbert abstrait \mathcal{H}* : Si l’on suppose (comme nous l’avons fait) que les vecteurs appartiennent à un espace de Hilbert abstrait de dimension infinie, alors on retrouve tous les problèmes mentionnés dans la section 3. Dans ce cas, le formalisme des bras et kets de Dirac représente un **calcul purement symbolique** et ce n’est certainement pas un hasard que von

⁷Pour éviter la discussion des domaines de définition, nous supposons que A est un opérateur borné : A et A^\dagger peuvent alors être définis sur tout l’espace \mathcal{H} .

Neumann n'a pas cherché une explication ou formulation mathématique de cette approche en élaborant les bases mathématiques de la mécanique quantique [16]. Les introductions modernes à ce formalisme essaient d'en préciser un peu le contenu mathématique, mais il existe très peu de tentatives sérieuses essayant de traduire l'approche de Dirac dans une théorie mathématique rigoureuse suite à une interprétation appropriée de celle-ci [31, 32, 33, 2]. La théorie résultante (qui fait intervenir dès le départ des triplets de Gelfand abstraits et des familles spectrales) est très compliquée et difficilement maniable.

- *Approche non pédagogique* : Les concepts de base de l'algèbre linéaire (applications linéaires, produits scalaires, ...) sont abondamment utilisés dans tous les domaines de la physique (mécanique rationnelle, électromagnétisme, relativité, ...) avec les notations mathématiques standard et non pas avec le formalisme de Dirac. L'analyse fonctionnelle basée sur l'espace $L^2(\mathbf{R}, dx)$ (ou sur l_2) est une synthèse naturelle de l'algèbre linéaire et de l'analyse réelle et des notions de cette théorie font partie de la formation mathématique de tout physicien (par exemple par le biais de l'analyse de Fourier). Par contre le calcul symbolique de Dirac donne parfois l'impression de représenter quelque chose de qualitativement nouveau et pratiquement incontournable pour le développement de la mécanique quantique⁸.

Pour les espaces de Hilbert de dimension finie qui interviennent dans la description du spin (ou du moment angulaire) des particules, on a $\mathcal{H} \simeq \mathbf{C}^n$ et la notation de Dirac représente alors une réécriture des vecteurs et une interprétation particulière des opérations de l'algèbre linéaire standard [30]. Dans ce cas, tout est mathématiquement bien défini, mais les autres inconvénients mentionnés ne sont pas tous écartés.

4.2 Avantages

La grande puissance des notations de Dirac consiste dans le fait qu'elles permettent de faire des calculs formels donnant automatiquement la forme correcte des résultats. Par exemple, l'insertion de l'opérateur identité (13) entre deux opérateurs linéaires A et B ,

$$\langle \Phi | AB | \Psi \rangle \stackrel{(13)}{=} \langle \Phi | A \left(\sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle \langle n| \right) B | \Psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Phi | A | n \rangle \langle n | B | \Psi \rangle , \quad (8)$$

donne tout de suite le bon résultat final sans qu'on ait besoin de contempler l'action successive des applications $|n\rangle$ et $\langle n|$ décrite dans l'équation (14). Similairement, le projecteur $P_{|\Phi\rangle}$ sur l'état $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ s'écrit simplement

$$P_{|\Phi\rangle} = |\Phi\rangle \langle \Phi|$$

et pour ses éléments de matrice on obtient immédiatement

$$\langle \Psi | P_{|\Phi\rangle} | \Psi' \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle \langle \Phi | \Psi' \rangle . \quad (9)$$

⁸Il est peut-être bon de rappeler que la théorie quantique a été développée sans l'utilisation de ce formalisme [21] et de noter que son enseignement peut s'en passer largement ou complètement comme en témoigne un bon nombre d'excellents ouvrages [34, 35, 36].

4.3 “Solution” des problèmes

Comme nous venons de le souligner, la notation $|\Psi\rangle$ pour les vecteurs et $\langle\Psi|$ pour les formes linéaires est très utile à des fins mnémotechniques et calculatoires. Aussi serait-il déplacé d’éviter ces notations et de se priver de leurs avantages. Un bon compromis que nous résumerons maintenant est celui adopté ou mentionné dans un certain nombre d’ouvrages [34, 35, 36, 25].

Si nous “identifions” les différents espaces de Hilbert discutés dans la section 2, nous pouvons écrire $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}, dx)$ et dans ce cas nous évitons déjà les complications mathématiques du formalisme invariant (section 3). Dans tous les cas - que l’on fasse cette identification ou pas - il est souvent commode de *noter les fonctions d’onde par $|\psi\rangle$* au lieu de ψ (ou par $\langle\psi|$) comme suggéré par Dirac [1]) pour mémoriser les relations suivantes qui sont valables pour toute base orthonormée $\{|\varphi_n\rangle\}_{n\in\mathbf{N}}$ de $L^2(\mathbf{R}, dx)$:

$$\begin{aligned} \langle|\varphi_n\rangle, |\varphi_m\rangle\rangle_{L^2} &\equiv \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \\ \sum_{n\in\mathbf{N}} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| &= \mathbf{1}_{L^2} \quad . \end{aligned}$$

Ici, la dernière relation veut dire que

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{n\in\mathbf{N}} |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \quad \text{pour tout } |\psi\rangle \in L^2(\mathbf{R}, dx) \\ \text{ou } |\psi(x)\rangle &= \sum_{n\in\mathbf{N}} |\varphi_n(x)\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \quad \text{pour tout } x \in \mathbf{R} \quad . \end{aligned}$$

Dans le même esprit, le projecteur P_ψ sur $|\psi\rangle \in L^2(\mathbf{R}, dx)$ peut s’écrire comme $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$.

Pour les opérateurs, il est commode d’utiliser la notation [6]

$$|A\psi\rangle \equiv A|\psi\rangle$$

tout en évitant l’interprétation (4) des éléments matriciels qui est source d’ambiguïtés ; un élément matriciel peut alors être mis sous une des formes suivantes :

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|A\psi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger\varphi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle^* \quad .$$

Les insertions d’opérateurs sont réalisées comme dans les expressions (8) et (9).

Finalement, la notation $|n..m\rangle$ au lieu de $\varphi_{n..m}$ pour les vecteurs d’une base de l’espace de Hilbert, indexée par n, \dots, m , est bien utile pour écrire les éléments matriciels⁹,

$$a_{n..m, n'..m'} = \langle n..m|A|n'..m'\rangle \quad .$$

Ainsi, avec un peu de flexibilité, on peut bénéficier des avantages de la notation de Dirac tout en évitant ses inconvénients.

⁹Il faut prendre garde au fait que la matrice résultante représente un opérateur linéaire sur l’espace de Hilbert l_2 qui est de dimension infinie, ce qui implique qu’il faut se soucier de son domaine de définition : l’existence de représentations matricielles et leurs pièges mathématiques sont discutés dans la référence [9].

5 Conclusion

Essayons de tirer quelques conclusions des discussions précédentes, en particulier pour l'enseignement de la mécanique quantique.

Physique et mathématique sont deux sciences différentes et on peut très bien justifier qu'une présentation de physicien ne tienne pas compte d'une rigueur mathématique parfaite même si l'auteur maîtrise complètement celle-ci. En physique c'est probablement un art d'utiliser un minimum de mathématiques tout en restant tellement précis dans le raisonnement et dans la présentation que le physicien mathématicien puisse compléter tous les détails techniques sans ambiguïté et ainsi établir les résultats et leur domaine de validité d'une manière irréfutable. En mécanique quantique, une telle démarche correspondrait à donner des définitions précises au départ (pour les opérateurs linéaires sur $L^2(\mathbf{R}, dx)$) tout en évitant de discuter systématiquement les détails mathématiques (domaines de définition, distributions, ...) dans la suite. Par contre, toute approche basée sur un calcul symbolique qui est très difficile à rendre rigoureux (et donc apte à des conclusions précises) paraît contestable. Ceci est d'autant plus vrai que la première approche n'est pas plus compliquée et qu'elle est basée sur une théorie mathématique standard, bien développée et trouvant des applications dans beaucoup d'autres domaines de la physique (systèmes dynamiques, relativité, optique, ...).

Les ouvrages de physique qui ne suivent pas l'approche du calcul symbolique (et qui mentionnent les domaines de définition ainsi que la différence entre opérateurs hermitiens et auto-adjoints) ne sont pas très nombreux : citons les monographies [34] qui ne sont pas basées sur le formalisme invariant et qui font un usage libéral des notations de Dirac chaque fois que cela paraît utile (voir aussi [37]). Une présentation comparable, mais plus mathématique et s'orientant vers les fondements conceptuels est donnée dans [38], alors que les traités [39, 24, 25, 33] peuvent être qualifiés de relevant du domaine de la physique mathématique. Parmi les ouvrages [6], ceux de Messiah, Peebles et Schwabl discutent en détail la mécanique ondulatoire et sa structure géométrique avant de présenter le formalisme invariant et les notations de Dirac. Finalement nous mentionnons aussi quelques ouvrages qui évitent le formalisme invariant et l'usage rigide des notations de Dirac, mais qui ne discutent pas les détails mathématiques concernant les opérateurs sur $L^2(\mathbf{R}, dx)$: à part les 'classiques' [35], il s'agit des introductions élémentaires et modernes [36] qui présentent clairement tous les principes de la théorie tout en appliquant un strict minimum de mathématiques utiles.

Remerciements

Je profite de l'occasion pour remercier les enseignants superbes auprès de qui j'ai pu apprendre la mécanique quantique à Göttingen (H.Goenner, H.Roos, F.Hund (†1997), J.Yngvason, H.Reeh) et à Berkeley (G.W.Mackey). Merci à A.Bilal pour m'avoir expliqué un peu le formalisme invariant lors de mon arrivée en France! J'exprime ma gratitude à I.Laktineh, M.Kibler et R.Barbier pour avoir enduré mes innombrables plaintes, pour toutes nos discussions sur la mécanique quantique et pour leurs commentaires sur le texte. Merci à D.Maison, P.Breitenlohner, S.Fleck, R.McDermott, H.Kühn et au très regretté K.Baumann (†1998) pour leurs remarques pertinentes sur les exemples! Je tiens aussi à exprimer ma gratitude à Bénédicte Bruckert et Annabelle Pontvianne pour de nombreuses discussions sur la physique et les mathématiques.

A Le formalisme mathématique

A.1 Les notations de Dirac

Un vecteur $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ est appelé *ket* et à ce vecteur nous pouvons associer une forme linéaire $\omega_{|\Psi\rangle} \equiv \langle\Psi|$ appelée *bra* et définie par l'intermédiaire du produit scalaire (“*bracket*”) :

$$\begin{aligned} \omega_{|\Psi\rangle} &\equiv \langle\Psi| : \mathcal{H} \xrightarrow{\text{lin.}} \mathbf{C} \\ |\Phi\rangle &\longmapsto \omega_{|\Psi\rangle}(|\Phi\rangle) = \langle|\Psi\rangle, |\Phi\rangle\rangle_{\mathcal{H}} \equiv \langle\Psi|\Phi\rangle . \end{aligned} \quad (10)$$

D'après l'inégalité de Cauchy et Schwarz reliant le produit scalaire et la norme $\|\Psi\| \equiv \|\langle\Psi|\rangle\| = \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$ dans \mathcal{H} ,

$$|\langle\Psi|\Phi\rangle| \leq \|\Psi\| \cdot \|\Phi\| ,$$

la forme linéaire $\omega_{|\Psi\rangle}$ est continue : ceci veut dire que pour tout $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$ il existe une constante $c \geq 0$ telle que $|\omega_{|\Psi\rangle}(|\Phi\rangle)| \leq c \|\Phi\|$. Par conséquent, le bra $\langle\Psi|$ est un élément de l'espace de Hilbert dual

$$\mathcal{H}^* = \{\omega : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbf{C} \text{ linéaire et continu} \} .$$

Inversement, à tout bra $\langle\Psi| \in \mathcal{H}^*$ nous pouvons associer un ket $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$; en effet, d'après le lemme de Riesz [8], chaque élément $\omega \in \mathcal{H}^*$ détermine de manière unique un vecteur $|\Psi_\omega\rangle \in \mathcal{H}$ tel que

$$\omega(|\Phi\rangle) = \langle\Psi_\omega|\Phi\rangle \quad \text{pour tout } |\Phi\rangle \in \mathcal{H} .$$

(Le vecteur $|\Psi_\omega\rangle$ “réalise” l'application ω par l'intermédiaire du produit scalaire.) Le vecteur associé à la forme linéaire $\langle\Psi|$ est noté par $|\Psi\rangle$ et nous avons donc une correspondance biunivoque entre $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ et $\langle\Psi| \in \mathcal{H}^*$:

$$\boxed{\mathcal{H} \ni |\Psi\rangle \xleftrightarrow{1-1} \langle\Psi| \in \mathcal{H}^*} . \quad (11)$$

Ainsi nous pouvons identifier¹⁰ \mathcal{H} et \mathcal{H}^* et nous passer complètement de \mathcal{H}^* . L'introduction d'un espace vectoriel dual est seulement nécessaire pour définir les vecteurs généralisés, voir section A.3 ci-dessous.

Une *base hilbertienne* $\{|\Phi_n\rangle \equiv |n\rangle\}_{n \in \mathbf{N}}$ de \mathcal{H} est un ensemble de vecteurs satisfaisant la relation d'orthonormalité

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \quad \text{pour tout } n, m \in \mathbf{N} \quad (12)$$

¹⁰Si on définit la norme de $\omega \in \mathcal{H}^*$ par $\|\omega\| = \sup |\omega(f)|$ (où le supremum est pris sur tous les vecteurs $f \in \mathcal{H}$ de norme 1), alors on peut montrer que la bijection $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^*$ est antilinéaire et qu'elle préserve les normes, c'est-à-dire qu'elle représente une isométrie.

et la relation de fermeture

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}_{\mathcal{H}} . \quad (13)$$

Cette relation fait intervenir la somme des opérateurs $|n\rangle\langle n|$ qui sont obtenus par composition de deux applications :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\xrightarrow{\langle n|} \mathbf{C} \xrightarrow{|n\rangle} \mathcal{H} \\ |\Phi\rangle &\longmapsto \langle n|\Phi\rangle \longmapsto \langle n|\Phi\rangle |n\rangle . \end{aligned} \quad (14)$$

Ici, la première application est la forme linéaire (10) et la deuxième représente la multiplication d'un nombre complexe par le vecteur $|n\rangle \in \mathcal{H}$.

Un *opérateur sur \mathcal{H}* est une application linéaire

$$\begin{aligned} A : \mathcal{D}(A) &\longrightarrow \mathcal{H} \\ |\Psi\rangle &\longmapsto A|\Psi\rangle , \end{aligned} \quad (15)$$

où $\mathcal{D}(A)$ (*domaine de définition de A*) est un sous-espace vectoriel dense de \mathcal{H} . (On peut généraliser cette définition en supprimant les hypothèses que $\mathcal{D}(A)$ soit dense et que l'application A soit linéaire, mais ces généralisations n'interviennent guère en mécanique quantique.)

Avant de discuter quelques exemples d'opérateurs, nous rappelons que le produit scalaire des vecteurs $|\Phi\rangle$ et $A|\Psi\rangle$ est noté suivant Dirac par

$$\langle |\Phi\rangle , A|\Psi\rangle \rangle_{\mathcal{H}} \equiv \langle \Phi|A|\Psi\rangle . \quad (16)$$

L'expression $\langle \Phi|A|\Psi\rangle$ peut donc être considéré comme résultant de la composition de deux applications linéaires,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A) &\xrightarrow{A} \mathcal{H} \xrightarrow{\langle \Phi|} \mathbf{C} \\ |\Psi\rangle &\longmapsto A|\Psi\rangle \longmapsto \langle \Phi|A|\Psi\rangle , \end{aligned} \quad (17)$$

où la composition est définie comme d'habitude par $(\langle \Phi| \circ A)|\Psi\rangle := \langle \Phi|(A|\Psi\rangle)$. Cependant Dirac ne s'est pas limité à cette interprétation sans équivoque des notations qu'il a introduites - voir section 4.1.

A.2 Opérateurs linéaires

Pour simplifier l'écriture et éviter toute ambiguïté, nous n'utilisons pas les notations de Dirac dans la suite. Nous encourageons fortement le lecteur qui n'est pas familier avec les définitions et résultats énoncés au début de cette section de continuer la lecture avec les nombreuses illustrations qui suivront.

Pour un opérateur A sur \mathcal{H} , le *domaine de définition de A^\dagger* est défini par

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A^\dagger) &= \{ \varphi \in \mathcal{H} \mid \exists \tilde{\varphi}(A; \varphi) \in \mathcal{H} \text{ tel que} \\ &\quad \langle \varphi, A\psi \rangle = \langle \tilde{\varphi}(A; \varphi), \psi \rangle \text{ pour tout } \psi \in \mathcal{D}(A) \} . \end{aligned}$$

(La notation $\tilde{\varphi}(A; \varphi)$ indique que le vecteur $\tilde{\varphi}$ dépend de A et de φ .) Pour $\varphi \in \mathcal{D}(A^\dagger)$, on définit $A^\dagger \varphi = \tilde{\varphi}(A; \varphi)$, c'est-à-dire

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle A^\dagger \varphi, \psi \rangle \quad \text{pour tout } \psi \in \mathcal{D}(A) \quad . \quad (18)$$

En théorie quantique, les observables physiques sont décrites par des opérateurs A sur \mathcal{H} qui ont la propriété d'être *auto-adjoint* : ceci veut dire que $A = A^\dagger$, c'est-à-dire $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^\dagger)$ et $A\varphi = A^\dagger \varphi$ pour tout $\varphi \in \mathcal{D}(A)$. Cette condition assure que le spectre de A est réel et que les vecteurs propres (généralisés) de A forment un système complet de vecteurs orthonormaux.

Le *spectre* d'un opérateur auto-adjoint est l'union du *spectre discret* (ensemble des valeurs propres de A) et du *spectre continu* (ensemble des valeurs propres généralisées de A , c'est-à-dire des valeurs propres pour lesquelles les vecteurs propres n'appartiennent pas à \mathcal{H}) : ces notions seront précisées et illustrées dans la suite (ainsi que dans l'annexe C où nous mentionnerons aussi le soi-disant spectre résiduel qui peut apparaître pour un opérateur non auto-adjoint).

Deux complications techniques apparaissent lors de l'étude d'une observable A en mécanique quantique :

- (i) Si le spectre de A n'est pas borné, alors le domaine de définition de A ne peut pas être \mathcal{H} tout entier.
- (ii) Si le spectre de A contient une partie continue, alors les vecteurs propres correspondants n'appartiennent pas à \mathcal{H} , mais à un espace plus large contenant \mathcal{H} .

Dans cette section et dans la suivante, nous discuterons tour à tour ces deux problèmes.

La classe la plus simple d'opérateurs est celle des opérateurs qui sont *bornés*, c'est-à-dire pour tout vecteur $\psi \in \mathcal{D}(A)$, on a

$$\|A\psi\| \leq c \|\psi\| \quad \text{où } c \geq 0 \text{ est une constante} \quad . \quad (19)$$

Cette condition revient à dire que le spectre de A est borné. Les opérateurs bornés peuvent toujours être définis sur tout l'espace de Hilbert, c'est-à-dire que $\mathcal{D}(A) = \mathcal{H}$. Un exemple important est celui d'un opérateur unitaire $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$; un tel opérateur est borné, car la relation (2) implique $\|U\psi\| = \|\psi\|$ pour tout $\psi \in \mathcal{H}$ et la condition (19) est donc satisfaite. (Le spectre de U est borné, puisqu'il appartient au cercle unité du plan complexe.)

Une grande partie des subtilités mathématiques de la mécanique quantique provient du résultat suivant [9, 8].

Théorème 2 (Hellinger et Toeplitz) *Soit A un opérateur sur \mathcal{H} qui est partout défini et qui satisfait à la condition d'hermité*

$$\langle \varphi, A\psi \rangle = \langle A\varphi, \psi \rangle \quad (20)$$

pour tous les vecteurs $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$. Alors A est borné.

En théorie quantique, on a souvent des opérateurs comme ceux de position, d'impulsion ou d'énergie qui obéissent à la condition d'hermité (20) sur leur domaine de définition,

mais pour lesquels le spectre n'est pas borné. (En fait, la relation structurelle de base de la mécanique quantique, c'est-à-dire la relation de commutation canonique, exige même que certains des opérateurs fondamentaux qu'elle fait intervenir soient non bornés - voir annexe C.) Le théorème précédent indique alors qu'il n'est pas possible de définir ces opérateurs hermitiens sur tout l'espace de Hilbert \mathcal{H} et que leur domaine de définition doit nécessairement être un vrai sous-espace de \mathcal{H} . Parmi tous les choix de sous-espace qui sont mathématiquement possibles, certains sont privilégiés en pratique par des considérations physiques (conditions aux limites, ...) [26, 8, 9, 24, 25].

A titre d'exemple, considérons *l'opérateur de position* Q , c'est-à-dire l'opérateur 'multiplication par x ' sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R}, dx)$:

$$(Q\psi)(x) = x\psi(x) \quad \text{pour tout } x \in \mathbf{R} \quad . \quad (21)$$

Le *domaine de définition maximal* de Q est celui qui assure que la fonction $Q\psi$ existe et qu'elle appartient encore à $L^2(\mathbf{R}, dx)$:

$$\mathcal{D}_{\max}(Q) = \{\psi \in L^2(\mathbf{R}, dx) \mid \|x\psi\|^2 \equiv \int_{\mathbf{R}} dx x^2 |\psi(x)|^2 < \infty\} \quad . \quad (22)$$

Pour tous les vecteurs de cet espace (qui est un sous-espace non-trivial et dense de $L^2(\mathbf{R}, dx)$), la condition (20) est satisfaite ce qui implique que le spectre de Q est réel. En fait, le spectre de cet opérateur est constitué de tout l'axe réel et il n'est donc pas borné.

Nous notons que pour certaines considérations il est commode de disposer d'un domaine de définition qui est laissé invariant par l'opérateur. Pour l'opérateur Q , un tel domaine est donné par l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ des fonctions à décroissance rapide. Rappelons qu'une fonction $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{C}$ appartient à $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ si elle est dérivable une infinité de fois et si cette fonction et toutes ses dérivées décroissent plus vite à l'infini que l'inverse d'un polynôme quelconque). On peut en déduire que $\mathcal{S}(\mathbf{R}) \subset \mathcal{D}_{\max}(Q)$ et

$$Q : \mathcal{S}(\mathbf{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbf{R}) \quad .$$

L'espace de Schwartz est aussi un *domaine de définition invariant* pour *l'opérateur d'impulsion* $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ sur $L^2(\mathbf{R}, dx)$, c'est-à-dire $P : \mathcal{S}(\mathbf{R}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbf{R})$.

A.3 Triplets de Gelfand (vecteurs généralisés)

L'opérateur de position (21) défini sur $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ illustre aussi le fait que les vecteurs propres associés au spectre continu d'un opérateur auto-adjoint n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert¹¹. En effet, la fonction propre ψ_{x_0} associée à la valeur propre $x_0 \in \mathbf{R}$ est définie par la relation

$$(Q\psi_{x_0})(x) = x_0 \psi_{x_0}(x) \quad (x_0 \in \mathbf{R}, \psi_{x_0} \in \mathcal{S}(\mathbf{R}), \psi_{x_0} \neq 0) \quad (23)$$

¹¹Pour être précis, l'opérateur (21) défini sur $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ est *essentiellement auto-adjoint*, ce qui implique qu'on peut le rendre auto-adjoint d'une seule façon en élargissant son domaine de définition de manière naturelle (voir [8, 9] pour des détails).

ou encore, d'après (21), par

$$(x - x_0) \psi_{x_0}(x) = 0 \quad \text{pour tout } x \in \mathbf{R} .$$

Cette condition implique $\psi_{x_0}(x) = 0$ pour $x \neq x_0$. En conséquence, la fonction ψ_{x_0} est nulle presque partout et représente donc l'élément nul de $L^2(\mathbf{R}, dx)$ [9, 7, 8]. L'opérateur Q n'admet donc aucune valeur propre.

Notons que la situation est la même pour l'opérateur P défini sur $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ qui est aussi essentiellement auto-adjoint : l'équation aux valeurs propres

$$(P\psi_p)(x) = p\psi_p(x) \quad (p \in \mathbf{R}, \psi_p \in \mathcal{S}(\mathbf{R}), \psi_p \neq 0), \quad ,$$

est résolue par $\psi_p(x) = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \exp(ipx/\hbar)$, mais $\psi_p \notin \mathcal{S}(\mathbf{R})$. Donc P n'admet aucune valeur propre.

Par contre, les équations aux valeurs propres pour Q et P admettent des solutions faibles (solutions distributives). Par exemple, la fonction généralisée (distribution) de Dirac avec support en x_0 , $\delta_{x_0}(x) \equiv \delta(x - x_0)$, est une solution faible de l'équation aux valeurs propres (23) : pour vérifier que $x\delta_{x_0}(x) = x_0\delta_{x_0}(x)$ au sens des distributions, il faut étaler cette relation avec une fonction test $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$:

$$\int_{\mathbf{R}} dx x \delta_{x_0}(x) \varphi(x) = x_0 \varphi(x_0) = \int_{\mathbf{R}} dx x_0 \delta_{x_0}(x) \varphi(x) . \quad (24)$$

La fonction généralisée de Dirac et la fonction généralisée $x\delta_{x_0}$ n'appartiennent pas au domaine de définition $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ de Q , mais à l'espace dual

$$\mathcal{S}'(\mathbf{R}) = \{\omega : \mathcal{S}(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{C} \text{ linéaire et continu} \} ,$$

c'est-à-dire à l'espace des distributions tempérées sur \mathbf{R} [8, 9, 10, 19, 20]. Elles sont définies d'une manière abstraite et précise par

$$\begin{aligned} \delta_{x_0} : \mathcal{S}(\mathbf{R}) &\longrightarrow \mathbf{C} \\ \varphi &\longmapsto \delta_{x_0}(\varphi) = \varphi(x_0) \end{aligned} \quad (25)$$

et

$$\begin{aligned} x\delta_{x_0} : \mathcal{S}(\mathbf{R}) &\longrightarrow \mathbf{C} \\ \varphi &\longmapsto (x\delta_{x_0})(\varphi) = \delta_{x_0}(x\varphi) \stackrel{(25)}{=} x_0 \varphi(x_0) . \end{aligned}$$

Avec ces définitions, l'écriture formelle (24) prend la forme exacte

$$(x\delta_{x_0})(\varphi) = (x_0\delta_{x_0})(\varphi) \quad \text{pour tout } \varphi \in \mathcal{S}(\mathbf{R}) .$$

Ainsi l'équation aux valeurs propres $Q\psi_{x_0} = x_0\psi_{x_0}$ admet une solution distributive ψ_{x_0} pour tout nombre $x_0 \in \mathbf{R}$. Comme le spectre de l'opérateur (essentiellement auto-adjoint) Q est l'ensemble des nombres réels pour lesquels l'équation aux valeurs propres admet

comme solution une fonction $\psi \in \mathcal{D}(Q) = \mathcal{S}(\mathbf{R})$ (spectre discret) ou bien une fonction généralisée $\psi \in \mathcal{S}'(\mathbf{R})$ (spectre continu), nous pouvons conclure que $\text{Sp } Q = \mathbf{R}$ et que le spectre de Q est purement continu.

De manière analogue, la fonction $\psi_p(x) = 1/\sqrt{2\pi\hbar} \exp(ipx/\hbar)$ définit une distribution l_p selon

$$\begin{aligned} l_p : \mathcal{S}(\mathbf{R}) &\longrightarrow \mathbf{C} \\ \varphi &\longmapsto l_p(\varphi) = \int_{\mathbf{R}} dx \overline{\psi_p(x)} \varphi(x) \stackrel{(1)}{=} (\mathcal{F}\varphi)(p) \end{aligned} \quad (26)$$

où $\mathcal{F}\varphi$ dénote la transformée de Fourier (1). La distribution l_p représente une solution de l'équation aux valeurs propres $Pl_p = pl_p$, car d'après les règles de calcul pour les distributions et la transformation de Fourier [9, 20] et d'après la définition (26), nous avons

$$(Pl_p)(\varphi) = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{dl_p}{dx} \right) (\varphi) = l_p \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dx} \right) \stackrel{(26)}{=} (\mathcal{F} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dx} \right))(p) = p (\mathcal{F}\varphi)(p) \stackrel{(26)}{=} pl_p(\varphi).$$

Il s'ensuit que $\text{Sp } P = \mathbf{R}$ (spectre purement continu).

Le problème aux valeurs propres pour des opérateurs avec spectre continu nous amène donc à considérer le *triplet de Gelfand* (“*rigged Hilbert space*” ou *triade hilbertienne*)¹²

$$\boxed{\mathcal{S}(\mathbf{R}) \subset L^2(\mathbf{R}, dx) \subset \mathcal{S}'(\mathbf{R})} \quad (27)$$

Ici, $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ est un sous-espace dense de $L^2(\mathbf{R}, dx)$ [8] et toute fonction $\psi \in L^2(\mathbf{R}, dx)$ définit une distribution $\omega_\psi \in \mathcal{S}'(\mathbf{R})$ selon

$$\begin{aligned} \omega_\psi : \mathcal{S}(\mathbf{R}) &\longrightarrow \mathbf{C} \\ \varphi &\longmapsto \omega_\psi(\varphi) = \int_{\mathbf{R}} dx \overline{\psi(x)} \varphi(x) \end{aligned} \quad (28)$$

Mais $\mathcal{S}'(\mathbf{R})$ contient aussi des distributions comme la distribution δ_{x_0} de Dirac ou la distribution l_p qui ne peuvent pas être représentées à l'aide d'une fonction $\psi \in L^2(\mathbf{R}, dx)$ selon (28). La procédure d'étalement avec une fonction test $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbf{R})$ correspond à la formation de *paquets d'onde* et la théorie des distributions donne un sens bien précis à cette procédure ainsi qu'aux fonctions généralisées qu'elle fait intervenir.

La définition abstraite du triplet (27) peut être précisée (topologie de $\mathcal{S}(\mathbf{R}), \dots$) et par ailleurs $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ peut être généralisé à d'autres sous-espaces (associés avec Q ou avec d'autres opérateurs définis sur $L^2(\mathbf{R}, dx)$). A ces détails près, nous pouvons dire :

¹²Les triplets de Gelfand sont discutés en détail dans l'ouvrage [20] (voir aussi [31] pour une définition légèrement modifiée). Une introduction courte et excellente aux définitions et applications en mécanique quantique est donnée dans les références [40, 9, 24]. Concernant l'importance des triplets de Gelfand, nous citons leurs inventeurs [20] : “Nous estimons que cette notion est, au moins, aussi importante, sinon plus, que la notion d'espace de Hilbert.”

Le triplet (27) décrit d'une manière exacte et simple la nature mathématique de tous les kets et bras utilisés en mécanique quantique.

En effet, d'après le lemme de Riesz mentionné dans la section A.1, l'espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R}, dx)$ est équivalent à son dual : à tout ket appartenant à $L^2(\mathbf{R}, dx)$ correspond donc un bra et inversement. Par ailleurs, un ket appartenant au sous-espace $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ définit toujours un bra appartenant à $\mathcal{S}'(\mathbf{R})$ selon la définition (28). Mais il existe des éléments de $\mathcal{S}'(\mathbf{R})$, des *bras généralisés*, auxquels on ne peut pas associer un ket appartenant à $\mathcal{S}(\mathbf{R})$ ou $L^2(\mathbf{R}, dx)$. Nous notons que la transparence de ce résultat mathématique se perd, si l'on procède comme d'habitude et que l'on écrit l'action d'une distribution sur une fonction test φ d'une manière purement formelle comme un produit scalaire entre $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbf{R}) \subset L^2(\mathbf{R}, dx)$ et une fonction qui n'appartient pas à $L^2(\mathbf{R}, dx)$:

$$\begin{aligned} l_p(\varphi) &= \langle \psi_p, \varphi \rangle_{L^2} \equiv \int_{\mathbf{R}} dx \overline{\psi_p(x)} \varphi(x) \\ \delta_{x_0}(\varphi) &= \langle \delta_{x_0}, \varphi \rangle_{L^2} \equiv \int_{\mathbf{R}} dx \overline{\delta_{x_0}(x)} \varphi(x) . \end{aligned}$$

D'une manière générale, considérons un opérateur auto-adjoint A sur l'espace de Hilbert \mathcal{H} . Les fonctions propres associées aux éléments du spectre continu de A n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert \mathcal{H} : il faut munir \mathcal{H} avec un sous-espace dense approprié Ω et son dual Ω' qui contient les vecteurs propres généralisés de A ,

$$\Omega \subset \mathcal{H} \subset \Omega' .$$

Le choix du sous-espace Ω est étroitement lié au domaine de définition de l'opérateur A que l'on souhaite étudier. Alors que l'introduction de l'espace Ω est nécessaire pour avoir un problème mathématique bien posé, celle de Ω' est très commode, mais elle n'est pas indispensable pour la détermination du spectre de A . En effet, il existe plusieurs *caractérisations du spectre* qui ne font pas appel à une extension de l'espace de Hilbert¹³. Citons trois exemples. Les différentes parties du spectre de A peuvent être décrites par différentes propriétés de la *résolvante* $R_A(z) = (A - z\mathbf{1})^{-1}$ (où $z \in \mathbf{C}$) [9, 10] ou bien (dans le cas où A est auto-adjoint) par les propriétés des *projecteurs spectraux* $E_A(\lambda)$ (où $\lambda \in \mathbf{R}$) associés à A [16, 9, 8] ou encore en remplaçant la notion de fonction propre distributive de A par celle de *fonction propre approximée* [10]. (Cette dernière approche reflète le fait bien connu que les distributions telles δ_{x_0} peuvent être approximées arbitrairement bien par des fonctions ordinaires et continues.)

Comme indiqué en haut, les exemples discutés dans cette section illustrent à la fois les problèmes posés par un spectre non borné et ceux posés par une partie continue du spectre. Nous soulignons que ces problèmes ne sont pas reliés entre eux et considérons à ce sujet l'exemple d'une particule à une dimension avec conditions aux limites périodiques, c'est-à-dire des fonctions d'onde appartenant à l'espace de Hilbert $L^2([a, b], dx)$ avec $-\infty < a <$

¹³Citons à ce sujet les auteurs de la référence [8] : "We only recommend the abstract rigged space approach to readers with a strong emotional attachment to the Dirac formalism." Cette affirmation un peu provocatrice reflète assez bien l'approche suivie dans la plupart des ouvrages d'analyse fonctionnelle.

$b < +\infty$ et satisfaisant aux conditions aux limites $\psi(a) = \psi(b)$. Dans ce cas, l'opérateur de position (21) admet un spectre continu et borné, donné par l'intervalle $[a, b]$, alors que le spectre de l'opérateur d'impulsion $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ est discret et non borné (ce qui veut dire que l'impulsion peut seulement prendre certaines valeurs discrètes, mais arbitrairement grandes).

B Surprises mathématiques en mécanique quantique

Des exemples mathématiquement simples seront suivis d'exemples plus sophistiqués et plus intéressants du point de vue de la physique. Tous ces exemples seront formulés dans le cadre de la mécanique ondulatoire. Cette théorie étant équivalente aux autres formulations de la mécanique quantique, les problèmes mentionnés sont aussi présents dans les autres formulations, mais éventuellement ils y sont moins apparents. Nous utilisons le langage mathématique standard des ouvrages de mécanique quantique. La solution des problèmes soulevés est implicite dans l'annexe précédente, mais pour être complet, nous la détaillerons dans l'annexe suivante tout en faisant appel aux notions mathématiques appropriées.

(1) Pour une particule à une dimension, les opérateurs d'impulsion et de position P et Q satisfont à la relation de commutation canonique de Heisenberg,

$$[P, Q] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{1} . \quad (29)$$

En prenant la trace de cette relation, on trouve un résultat nul pour le membre de gauche, $\text{Tr} [P, Q] = 0$, alors que $\text{Tr} \left(\frac{\hbar}{i} \mathbf{1} \right) \neq 0$. Conclusion ?

(2) Considérons des fonctions d'onde φ et ψ de carré sommable sur \mathbf{R} ainsi que l'opérateur d'impulsion $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$. Une intégration par parties donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \overline{\varphi(x)} (P\psi)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \overline{(P\varphi)(x)} \psi(x) + \frac{\hbar}{i} [(\overline{\varphi} \psi)(x)]_{-\infty}^{+\infty} .$$

Comme φ et ψ sont de carré sommable, on conclut d'habitude que ces fonctions s'annulent pour $x \rightarrow \pm\infty$. Ainsi le dernier terme dans l'équation précédente est zéro et l'opérateur P est donc hermitien.

Cependant les ouvrages de mathématiques nous apprennent que les fonctions de carré sommable n'admettent en général pas de limite pour $x \rightarrow \pm\infty$ et qu'elles ne s'annulent donc pas nécessairement à l'infini. (Pour illustrer la problématique, nous donnons un exemple [41] d'une fonction qui est continue, positive et sommable sur \mathbf{R} sans pour autant s'annuler pour $x \rightarrow \pm\infty$: considérons $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(x)$ où f_n est zéro sur \mathbf{R} , sauf sur un intervalle de largeur $\frac{2}{n^2}$ centré en n , où le graphe de f_n est un triangle symétrique par rapport à n et de hauteur 1. L'aire de ce triangle étant égale à $\frac{1}{n^2}$, on a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} < \infty ,$$

mais la fonction f ne s'annule pas pour $x \rightarrow +\infty$.) On peut même trouver des fonctions de carré sommable sur \mathbf{R} qui ne sont pas bornées à l'infini [11] : un exemple d'une telle fonction est donné par $f(x) = x^8 \exp(-x^8 \sin^2 x)$, ce qui correspond essentiellement à un

raffinement de l'exemple précédent. Est-ce que l'opérateur P est quand même hermitien et pourquoi ?

(3) Considérons les opérateurs $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ et ' $Q =$ multiplication par x ' agissant sur les fonctions d'onde dépendant de $x \in \mathbf{R}$. Comme P et Q sont des opérateurs hermitiens, l'opérateur $A = PQ^3 + Q^3P$ l'est aussi, car son adjoint est donné par

$$A^\dagger = (PQ^3 + Q^3P)^\dagger = Q^3P + PQ^3 = A .$$

En conséquence, toutes les valeurs propres de A sont réelles. Pourtant, on vérifie aisément que

$$Af = \frac{\hbar}{i} f \quad \text{avec} \quad f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} |x|^{-3/2} \exp\left(\frac{-1}{4x^2}\right) & \text{pour } x \neq 0 \\ 0 & \text{pour } x = 0 \end{cases} , \quad (30)$$

ce qui veut dire que A admet la valeur propre complexe \hbar/i . Notons que la fonction f est dérivable une infinité de fois sur \mathbf{R} et qu'elle est de carré sommable, car

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = 2 \int_0^{\infty} dx |f(x)|^2 = \int_0^{\infty} dx x^{-3} e^{-1/(2x^2)} = \left[e^{-1/(2x^2)} \right]_0^{\infty} = 1 .$$

Où est l'erreur ?

(4) Nous considérons une particule enfermée dans l'intervalle $[0, 1]$ et décrite par une fonction d'onde ψ satisfaisant aux conditions aux limites $\psi(0) = 0 = \psi(1)$. L'opérateur d'impulsion $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ est alors hermitien, car le terme de surface intervenant dans l'intégration par parties s'annule :

$$\int_0^1 dx \left(\overline{\varphi} (P\psi) - (\overline{P\varphi}) \psi \right) (x) = \frac{\hbar}{i} [(\overline{\varphi} \psi) (x)]_0^1 = 0 . \quad (31)$$

Comme P est hermitien, ses valeurs propres sont réelles. Pour déterminer celles-ci, nous notons que l'équation aux valeurs propres,

$$(P\psi_p)(x) = p \psi_p(x) \quad (p \in \mathbf{R} , \psi_p \neq 0) ,$$

est résolue par $\psi_p(x) = c_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right)$ avec $c_p \in \mathbf{C} - \{0\}$. La condition aux limites $\psi_p(0) = 0$ implique alors $\psi_p \equiv 0$ et P n'admet donc pas de valeurs propres. Néanmoins le spectre de P est le plan complexe entier et P ne représente pas une observable [9]. Comment peut-on comprendre ce résultat qui paraît étonnant ?

(5) Si l'on introduit les coordonnées polaires dans le plan ou les coordonnées sphériques dans l'espace, alors l'angle polaire φ et la composante L_z du moment angulaire sont des

variables canoniquement conjuguées en mécanique classique. En théorie quantique, la variable φ devient l'opérateur de multiplication de la fonction d'onde $\psi(\varphi)$ par φ et $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$, ce qui implique la relation de commutation

$$[L_z, \varphi] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{1} . \quad (32)$$

Ces opérateurs agissant sur des fonctions d'onde périodiques ($\psi(0) = \psi(2\pi)$) sont hermitiens. Par ailleurs, L_z admet un système complet de fonctions propres orthonormées ψ_m ,

$$L_z \psi_m = m\hbar \psi_m \quad \text{avec} \quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad \text{et} \quad m \in \mathbf{Z} . \quad (33)$$

(Pour les fonctions d'onde ψ , nous spécifions seulement la dépendance de la variable angulaire φ et pour l'orthonormalisation, nous nous référons au produit scalaire standard des fonctions de carré sommable sur l'intervalle $[0, 2\pi)$:

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \overline{\psi_1(\varphi)} \psi_2(\varphi) .)$$

En prenant la valeur moyenne de l'opérateur $[L_z, \varphi]$ dans l'état ψ_m [42, 3] et en tenant compte du fait que L_z est hermitien, on trouve que

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} &= \langle \psi_m, \frac{\hbar}{i} \mathbf{1} \psi_m \rangle \stackrel{(32)}{=} \langle \psi_m, L_z \varphi \psi_m \rangle - \langle \psi_m, \varphi L_z \psi_m \rangle \\ &= \langle L_z^\dagger \psi_m, \varphi \psi_m \rangle - m\hbar \langle \psi_m, \varphi \psi_m \rangle \\ &= (m\hbar - m\hbar) \langle \psi_m, \varphi \psi_m \rangle = 0 . \end{aligned} \quad (34)$$

Il doit y avoir un petit problème quelque part...

(6) Rajoutons un peu à la confusion de l'exemple précédent ! En 1927, Pauli a noté que la relation de commutation canonique (29) implique la relation d'incertitude de Heisenberg $\Delta P \cdot \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}$ en vertu de l'inégalité de Cauchy et Schwarz. Comme la relation de commutation (32) a la même forme que (29), on peut déduire de la même manière la relation d'incertitude

$$\Delta L_z \cdot \Delta \varphi \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (35)$$

Le raisonnement physique suivant montre que cette inégalité ne peut pas être correcte [43, 42, 34]. On peut toujours trouver un état pour lequel $\Delta L_z < \hbar/4\pi$ et alors l'incertitude sur l'angle φ devrait être plus grande que 2π , ce qui n'a pas de sens physique, puisque φ prend des valeurs dans l'intervalle $[0, 2\pi)$. Comment se fait-il que la relation (32) est correcte, mais que la conclusion (35) ne l'est pas ?

D'ailleurs cet exemple montre que la relation d'incertitude $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle [A, B] \rangle |$ pour deux observables quelconques A et B (dont on trouve la dérivation dans la plupart des livres de mécanique quantique) n'est pas valable dans cette généralité.

(7) Considérons une particule de masse m dans le puits de potentiel infini

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| \leq a \quad (a > 0) \\ \infty & \text{sinon .} \end{cases}$$

L'hamiltonien pour la particule enfermée dans le puits est simplement $H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$. Soit

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{15}}{4a^{5/2}} (a^2 - x^2) \quad \text{pour } |x| \leq a \quad (\text{et } \psi(x) = 0 \text{ autrement}) \quad (36)$$

la fonction d'onde normée de la particule à un instant donné. Comme $H^2\psi = \frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{d^4\psi}{dx^4} = 0$, la valeur moyenne de l'opérateur H^2 dans l'état ψ s'annule :

$$\langle H^2 \rangle_\psi = \langle \psi, H^2 \psi \rangle = \int_{-a}^{+a} dx \overline{\psi(x)} (H^2 \psi)(x) = 0 \quad . \quad (37)$$

Cette valeur moyenne peut aussi être déterminée à partir des valeurs et fonctions propres de H ,

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad \text{avec} \quad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots) \quad , \quad (38)$$

en appliquant la formule

$$\langle H^2 \rangle_\psi = \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 p_n \quad \text{avec} \quad p_n = |\langle \varphi_n, \psi \rangle|^2 \quad . \quad (39)$$

En procédant de cette manière, on ne trouve certainement pas un résultat nul, car $E_n^2 > 0$ et $0 \leq p_n \leq 1$, $\sum_{n=1}^{\infty} p_n = 1$. En fait, le calcul donne $\langle H^2 \rangle_\psi = \frac{15\hbar^4}{8m^2a^4}$. Lequel des deux résultats est correct et d'où provient l'incohérence ? [3]

C Il n'y a pas de surprise

La résolution des problèmes et contradictions apparentes de l'annexe précédente peut être paraphrasée de la manière suivante [8] : la théorie des opérateurs linéaires sur des espaces vectoriels de dimension infinie est plus compliquée et plus intéressante que la théorie des matrices de dimension finie. Discutons maintenant les problèmes mentionnés tout en appliquant les résultats mathématiques de l'annexe A.

(1) Supposons que la relation de commutation $[P, Q] = \frac{\hbar}{i} \mathbf{1}$ soit satisfaite par des opérateurs P et Q agissant sur un espace de Hilbert \mathcal{H} de dimension finie n (c'est-à-dire $\mathcal{H} \simeq \mathbf{C}^n$). Dans ce cas, P et Q peuvent être réalisés par des matrices carrées $n \times n$, la trace est une opération bien définie et nous obtenons le résultat

$$0 = \text{Tr} [P, Q] \stackrel{(29)}{=} \text{Tr} \left(\frac{\hbar}{i} \mathbf{1}_n \right) = \frac{\hbar}{i} n \quad .$$

On en déduit que la relation de Heisenberg ne peut pas être réalisée sur un espace de Hilbert de dimension finie. La mécanique quantique doit donc être formulée sur un espace de Hilbert de dimension infinie : sur un tel espace, la trace n'est plus une opération bien définie pour tous les opérateurs (en particulier, la trace de l'opérateur $\mathbf{1}$ n'existe pas) et on ne peut donc plus déduire de contradiction de la relation de commutation de Heisenberg de la manière indiquée.

Une incohérence peut encore être déduite d'une autre façon sur un espace de Hilbert de dimension infinie en supposant que P et Q sont tous les deux des opérateurs bornés [8] ; par conséquent, au moins l'un des deux opérateurs P et Q satisfaisant la relation de Heisenberg doit être non borné et cette relation fondamentale ne peut donc pas être discutée sans se soucier des domaines de définition des opérateurs.

(2) Le domaine de définition maximal de l'opérateur $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ sur l'espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R}, dx)$ est¹⁴

$$\mathcal{D}_{\max}(P) = \{ \psi \in L^2(\mathbf{R}, dx) \mid \psi' \in L^2(\mathbf{R}, dx) \} \quad .$$

Les fonctions appartenant à $\mathcal{D}_{\max}(P)$ possèdent donc certaines propriétés de régularité et leur dérivée est de carré sommable sur \mathbf{R} . En particulier, ces fonctions sont continues et leur limite pour $x \rightarrow \pm\infty$ est zéro [11, 10], ce qui implique que l'opérateur P agissant sur $\mathcal{D}_{\max}(P)$ est hermitien. La fonction non bornée à l'infini que nous avons mentionnée est dérivable, mais sa dérivée n'est pas de carré sommable et elle n'appartient donc pas à $\mathcal{D}_{\max}(P)$.

¹⁴Comme l'intégrale intervenant dans la définition de l'espace $L^2(\mathbf{R}, dx)$ est celle de Lebesgue, il faut seulement s'assurer que les fonctions considérées se comportent correctement 'presque partout' par rapport à la mesure de Lebesgue (voir livres d'analyse) : $\psi' \in L^2(\mathbf{R}, dx)$ veut donc dire que la dérivée ψ' existe presque partout et qu'elle appartient à $L^2(\mathbf{R}, dx)$.

Un autre domaine de définition acceptable pour P est l'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbf{R}) \subset \mathcal{D}_{\max}(P)$. Dans ce cas, les fonctions sur lesquelles agit l'opérateur P ont même une décroissance rapide à l'infini.

(3a) L'espace de Schwartz $\mathcal{S}(\mathbf{R}) \subset L^2(\mathbf{R}, dx)$ est un domaine de définition invariant pour les opérateurs P et Q et donc aussi pour $A = PQ^3 + Q^3P$:

$$A : \mathcal{S}(\mathbf{R}) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathbf{R}) \quad .$$

Une intégration par parties montre que l'opérateur A ainsi défini est *hermitien* :

$$\langle g, Af \rangle = \langle Ag, f \rangle \quad \text{pour tout } f, g \in \mathcal{D}(A) = \mathcal{S}(\mathbf{R}) \quad .$$

La fonction f donnée par (30) appartient à l'espace de Hilbert $L^2(\mathbf{R}, dx)$, mais elle n'appartient pas au domaine de définition de A , puisqu'elle ne décroît pas plus rapidement que l'inverse d'un polynôme quelconque à l'infini : par exemple, $x^3 f(x) \propto x^{3/2} \exp[-1/(4x^2)]$ n'est pas borné pour $x \rightarrow +\infty$. En conséquence, \hbar/i n'est *pas* une valeur propre de A .

Par contre, \hbar/i est une valeur propre de A^\dagger [40]. Avant de discuter ce point, il est préférable de résoudre d'abord les autres problèmes.

(4a) Les résultats étonnants que nous avons cités dans cet exemple indiquent qu'il ne suffit pas de vérifier qu'un opérateur est hermitien pour l'identifier comme une observable : ceci est bien connu [1, 6]. Par ailleurs, ces résultats indiquent que le spectre d'un opérateur n'est pas simplement l'ensemble de ses valeurs propres (comme c'est le cas pour les matrices de dimension finie). Dans la suite, nous explicitons ces deux points.

Le domaine de définition que l'on considère ici pour l'opérateur P sur $\mathcal{H} = L^2([0, 1], dx)$ est

$$\mathcal{D}(P) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi' \in \mathcal{H} \text{ et } \psi(0) = 0 = \psi(1)\} \quad . \quad (40)$$

Sur ce domaine, P est hermitien :

$$\langle \varphi, P\psi \rangle = \langle P\varphi, \psi \rangle \quad \text{pour tout } \varphi, \psi \in \mathcal{D}(P) \quad .$$

Comme il n'existe pas de solution de l'équation aux valeurs propres

$$P\psi_p = p\psi_p \quad \text{avec } \psi_p \in \mathcal{D}(P) \text{ et } \psi_p \neq 0 \quad ,$$

l'opérateur P n'admet aucun vecteur propre (et pas non plus de vecteur propre généralisé). En conséquence, il n'existe pas de système complet de vecteurs propres de P et l'opérateur P n'est donc pas une observable selon la définition habituelle donnée en mécanique quantique [1, 6]. En effet, l'opérateur P avec le domaine de définition (40) est hermitien, mais pas auto-adjoint. Pour vérifier ceci, nous rappelons de l'annexe A.2 que le domaine de définition de P^\dagger est donnée par

$$\mathcal{D}(P^\dagger) = \{\varphi \in \mathcal{H} \mid \exists \tilde{\varphi} \in \mathcal{H} \text{ tel que } \langle \varphi, P\psi \rangle = \langle \tilde{\varphi}, \psi \rangle \text{ pour tout } \psi \in \mathcal{D}(P)\}$$

et que la prescription d'opération de P^\dagger est déterminée par la relation

$$\langle \varphi, P\psi \rangle = \langle P^\dagger \varphi, \psi \rangle \quad \text{pour tout } \psi \in \mathcal{D}(P) . \quad (41)$$

L'intégration par parties (31) ou, plus précisément,

$$\int_0^1 dx (\overline{\varphi} P\psi - \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\varphi}{dx} \right) \psi)(x) = \frac{\hbar}{i} [\overline{\varphi(1)}\psi(1) - \overline{\varphi(0)}\psi(0)] = 0 \quad \text{pour tout } \psi \in \mathcal{D}(P)$$

montre que les conditions aux limites satisfaites par $\psi \in \mathcal{D}(P)$ suffisent déjà pour annuler le terme de surface et que P^\dagger agit de la même manière que P . Ainsi

$$P^\dagger = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad , \quad \mathcal{D}(P^\dagger) = \{ \varphi \in \mathcal{H} \mid \varphi' \in \mathcal{H} \} .$$

Le domaine de définition de P^\dagger est donc plus large que celui de P : $\mathcal{D}(P) \subset \mathcal{D}(P^\dagger)$. Nous en concluons que P est hermitien, mais pas auto-adjoint : $P \neq P^\dagger$, car $\mathcal{D}(P) \neq \mathcal{D}(P^\dagger)$. Le spectre de P sera discuté plus loin.

(5) L'opérateur de multiplication par φ sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2([0, 2\pi], d\varphi)$ est partout défini et auto-adjoint :

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

La discussion précédente concernant l'opérateur $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ sur $L^2([0, 1], dx)$ s'applique verbatim à l'opérateur $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi}$ sur $L^2([0, 2\pi], d\varphi)$: une intégration par parties donne

$$\int_0^{2\pi} d\varphi (\overline{g} L_z f - \left(\frac{\hbar}{i} \frac{dg}{d\varphi} \right) f)(\varphi) = \frac{\hbar}{i} [g(2\pi)f(2\pi) - \overline{g(0)}f(0)] \quad \text{pour tout } f \in \mathcal{D}(L_z). \quad (42)$$

A cause du caractère périodique de l'angle polaire, les fonctions appartenant au domaine de définition de L_z sont périodiques¹⁵ :

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} \quad , \quad \mathcal{D}(L_z) = \{ f \in \mathcal{H} \mid f' \in \mathcal{H} \text{ et } f(0) = f(2\pi) \} . \quad (43)$$

Par conséquent, le terme de surface dans (42) s'annule si et seulement si $g(0) = g(2\pi)$: ceci implique que L_z^\dagger agit de la même manière que L_z et admet le même domaine de définition, donc l'opérateur (43) est auto-adjoint.

¹⁵A ce sujet, nous remarquons que l'utilisation des coordonnées polaires attribue un rôle distingué au demi-axe polaire $\varphi = 0$, alors que cet axe n'est pas privilégié si l'on choisit d'autres systèmes de coordonnées comme les coordonnées cartésiennes : aussi une discontinuité des fonctions d'onde sur cet axe ($f(2\pi) = e^{i\alpha} f(0)$ avec $\alpha \neq 0$) n'a pas de raison d'être.

Pour déterminer le domaine de définition du commutateur $[L_z, \varphi]$, nous notons que pour deux opérateurs A et B , on a

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(A+B) &= \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) \\ \mathcal{D}(AB) &= \{f \in \mathcal{D}(B) \mid Bf \in \mathcal{D}(A)\} .\end{aligned}\tag{44}$$

Ainsi $\mathcal{D}([L_z, \varphi]) = \mathcal{D}(L_z\varphi) \cap \mathcal{D}(\varphi L_z)$ avec

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\varphi L_z) &= \{f \in \mathcal{D}(L_z) \mid L_z f \in \mathcal{D}(\varphi) = \mathcal{H}\} = \mathcal{D}(L_z) \\ \mathcal{D}(L_z\varphi) &= \{f \in \mathcal{D}(\varphi) = \mathcal{H} \mid \varphi f \in \mathcal{D}(L_z)\} .\end{aligned}$$

Or la fonction $\tilde{f} \equiv \varphi f$ qui intervient dans la dernière expression prend les valeurs

$$\begin{aligned}\tilde{f}(0) &= (\varphi f)(0) = 0 \\ \tilde{f}(2\pi) &= (\varphi f)(2\pi) = 2\pi f(2\pi)\end{aligned}$$

et $\tilde{f} \in \mathcal{D}(L_z)$ implique $\tilde{f}(0) = \tilde{f}(2\pi)$, donc $f(2\pi) = 0$.

En résumé,

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(\varphi L_z) &= \mathcal{D}(L_z) \\ \mathcal{D}(L_z\varphi) &= \{f \in \mathcal{H} \mid f' \in \mathcal{H} \text{ et } f(2\pi) = 0\} \\ \mathcal{D}([L_z, \varphi]) &= \{f \in \mathcal{H} \mid f' \in \mathcal{H} \text{ et } f(0) = 0 = f(2\pi)\} .\end{aligned}\tag{45}$$

Les fonctions propres $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$ de L_z n'appartiennent pas au domaine de définition de $[L_z, \varphi]$, puisqu'elles ne s'annulent pas en 0 et 2π : ainsi la dérivation (34) n'a pas de sens.

(6) Considérons deux observables A, B (opérateurs auto-adjoints sur un espace de Hilbert \mathcal{H}) et un état ψ (vecteur de norme 1 appartenant à \mathcal{H}). La relation d'incertitude pour A, B est d'habitude écrite sous la forme [34]

$$\Delta_\psi A \cdot \Delta_\psi B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi, i[A, B]\psi \rangle \right| ,\tag{46}$$

où $(\Delta_\psi A)^2 = \|(A - \langle A \rangle_\psi \mathbf{1})\psi\|^2$ avec $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi, A\psi \rangle$ et de même pour B . Ainsi le membre de gauche de la relation (46) est défini pour $\psi \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$ (qui est précisément le sous-espace de \mathcal{H} contenant tous les états ψ pour lesquels les incertitudes $\Delta_\psi A$ et $\Delta_\psi B$ ont toutes les deux une signification physique). Par contre le membre de droite est seulement défini sur le sous-espace $\mathcal{D}([A, B]) = \mathcal{D}(AB) \cap \mathcal{D}(BA)$ qui est en général beaucoup plus petit.

Mais A, B étant auto-adjoints, la relation (46) peut être réécrite sous la forme [44]

$$\Delta_\psi A \cdot \Delta_\psi B \geq \frac{1}{2} \left| i\langle A\psi, B\psi \rangle - i\langle B\psi, A\psi \rangle \right| ,\tag{47}$$

où le domaine de définition du membre de droite est maintenant le même que celui de gauche, c'est-à-dire $\mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$. Ainsi le produit des incertitudes pour deux observables A et B n'est pas déterminée par leur commutateur, mais par la forme hermitienne sesquilinéaire¹⁶

$$\Phi_{A,B}(f, g) = i\langle Af, Bg \rangle - i\langle Bf, Ag \rangle \quad \text{pour tout } f, g \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) .$$

La dérivation de l'inégalité (47) est la même que celle de (46) (voir par exemple [7] pour cette dernière) et se fait en quelques lignes : soit $\psi \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$ et soit

$$\hat{A} = A - \langle A \rangle_{\psi} \mathbf{1} \quad , \quad \hat{B} = B - \langle B \rangle_{\psi} \mathbf{1} \quad ;$$

en utilisant le fait que A et B sont auto-adjoints et en appliquant l'inégalité triangulaire et celle de Cauchy et Schwarz, nous trouvons l'inégalité (47) :

$$\begin{aligned} |i\langle A\psi, B\psi \rangle - i\langle B\psi, A\psi \rangle| &= |i\langle \hat{A}\psi, \hat{B}\psi \rangle - i\langle \hat{B}\psi, \hat{A}\psi \rangle| \\ &\leq |\langle \hat{A}\psi, \hat{B}\psi \rangle| + |\langle \hat{B}\psi, \hat{A}\psi \rangle| = 2 |\langle \hat{A}\psi, \hat{B}\psi \rangle| \\ &\leq 2 \|\hat{A}\psi\| \cdot \|\hat{B}\psi\| = 2 \Delta_{\psi} A \cdot \Delta_{\psi} B . \end{aligned}$$

Montrons maintenant que cette modification n'est pas purement cosmétique. Pour $A = P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ et $B = Q = x$ sur $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R}, dx)$, le membre de droite de l'inégalité (47) est facile à évaluer par intégration par parties et implique la relation d'incertitude bien connu $\Delta_{\psi} P \cdot \Delta_{\psi} Q \geq \frac{\hbar}{2}$ pour $\psi \in \mathcal{D}(P) \cap \mathcal{D}(Q)$. Par contre, pour $A = L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi}$ et $B = \varphi$ sur $\mathcal{H} = L^2([0, 2\pi], d\varphi)$, le terme de surface intervenant dans l'intégration par parties ne s'annule pas et conduit à la relation d'incertitude

$$\Delta_{\psi} L_z \cdot \Delta_{\psi} \varphi \geq \frac{\hbar}{2} |1 - 2\pi|\psi(2\pi)|^2| \quad \text{pour tout } \psi \in \mathcal{D}(L_z) \cap \mathcal{D}(\varphi) = \mathcal{D}(L_z). \quad (48)$$

Ainsi le produit des incertitudes $\Delta_{\psi} L_z$ et $\Delta_{\psi} \varphi$ peut devenir plus petit que $\hbar/2$ - voir Galindo et Pascual [34] pour un exemple. Si $\psi \in \mathcal{D}([L_z, \varphi])$, c'est-à-dire $\psi(2\pi) = 0$, l'inégalité (46) peut aussi être appliquée et elle donne le même résultat que (48).

Alors que l'inégalité (48) est mathématiquement correcte, elle n'est pas acceptable sous cette forme du point de vue physique : si l'on définit la valeur moyenne et l'incertitude de l'observable φ par les formules habituelles, ces expressions n'ont pas les bonnes propriétés de transformation par rapport aux rotations $\psi(\varphi) \rightarrow (\exp(\frac{i}{\hbar}\alpha L_z))\psi(\varphi) = \psi(\varphi + \alpha)$. Nous renvoyons à la littérature [43, 44] pour une légère modification de (48) qui tient compte de ce problème ainsi que pour des estimations du produit $\Delta_{\psi} L_z \cdot \Delta_{\psi} \varphi$ qui ne dépendent pas explicitement de l'état particulier ψ que l'on considère. Des problèmes similaires concernant les opérateurs de phase et du nombre, qui sont d'intérêt en optique quantique, sont discutés dans [42].

¹⁶i.e. $\Phi_{A,B}(f, g)$ est linéaire en g , antilinéaire en f et $\Phi_{A,B}(g, f) = \overline{\Phi_{A,B}(f, g)}$.

(7) Une solution purement formelle du problème peut être obtenue, si l'on considère la fonction d'onde comme définie sur tout l'axe réel au lieu de se limiter à l'intervalle $[-a, +a]$. En effet, pour la fonction ψ définie par (36), la discontinuité de ψ'' en $x = \pm a$ implique que ψ'''' est donné par des dérivées de la fonction généralisée de Dirac :

$$\psi''''(x) = -\frac{\sqrt{15}}{2a^{5/2}} [\delta'(x+a) - \delta'(x-a)] \quad \text{pour } x \in \mathbf{R} .$$

Substitution de cette expression dans $\langle \psi, H^2 \psi \rangle$ conduit alors au même résultat non nul que l'évaluation de $\sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 p_n$. L'incohérence mentionnée provient donc du fait qu'on n'a pas correctement tenu compte des conditions aux limites dans le calcul (37).

Dans la suite, nous montrons comment un raisonnement rigoureux limité à l'intervalle $[-a, +a]$ permet d'incorporer les conditions aux limites et de confirmer le résultat non nul pour $\langle H^2 \rangle_{\psi}$. Pour commencer, nous définissons H et H^2 en tant qu'opérateurs auto-adjoints sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2([-a, +a], dx)$.

Le puits de potentiel infini est une idéalisation mathématique qui est à interpréter comme la limite $V_0 \rightarrow \infty$ d'un puits de potentiel fini de hauteur V_0 . Pour ce dernier, on trouve qu'en dehors du puits, les fonctions d'onde des états stationnaires tendent vers zéro pour $V_0 \rightarrow \infty$ et par conséquent $\psi(\pm a) = 0$ est la condition aux limites appropriée pour la particule enfermée dans le puits infini. Analysons maintenant si H est auto-adjoint si l'on le fait agir sur des fonctions suffisamment dérivables satisfaisant $\psi(\pm a) = 0$: par deux intégrations par parties successives, nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle \varphi, H\psi \rangle &\equiv \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-a}^{+a} dx \overline{\varphi(x)} \psi''(x) \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m} \int_{-a}^{+a} dx \overline{\varphi''(x)} \psi(x) + \frac{\hbar^2}{2m} [(\overline{\varphi'}\psi - \overline{\varphi}\psi')(x)]_{-a}^{+a} \\ &= \langle H^\dagger \varphi, \psi \rangle - \frac{\hbar^2}{2m} [\overline{\varphi}(a)\psi'(a) - \overline{\varphi}(-a)\psi'(-a)] . \end{aligned}$$

Comme nous n'avons pas de contraintes sur $\psi'(\pm a)$, le terme de surface s'annule si et seulement si $\varphi(\pm a) = 0$. En résumé, H^\dagger opère de la même manière que H et les fonctions φ appartenant à son domaine de définition satisfont les mêmes conditions que celles du domaine de H . Donc l'opérateur $H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ agissant sur \mathcal{H} avec le domaine de définition

$$\mathcal{D}(H) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi'' \in \mathcal{H} \text{ et } \psi(\pm a) = 0\} \quad (49)$$

est un opérateur auto-adjoint (une observable). Son spectre, qui a été explicité dans l'équation (38), est discret et non dégénéré et les fonctions propres associées sont données par

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & \text{pour } n = 2, 4, 6, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) & \text{pour } n = 1, 3, 5, \dots \end{cases} .$$

Par conséquent, la décomposition spectrale de H s'écrit $H = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \mathcal{P}_n$ où \mathcal{P}_n est le projecteur sur l'état normalisé $\varphi_n : \mathcal{P}_n \psi = \langle \varphi_n, \psi \rangle \varphi_n$.

D'après le théorème spectral [8], l'opérateur H^2 est défini à partir de la décomposition spectrale de H ,

$$H^2 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 \mathcal{P}_n \quad , \quad (50)$$

ce qui implique que $H^2 \varphi_n = E_n^2 \varphi_n$. Pour déterminer explicitement le domaine de définition sur lequel cet opérateur est auto-adjoint, on fait quatre intégrations par parties successives :

$$\begin{aligned} \langle \varphi, H^2 \psi \rangle &\equiv \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-a}^{+a} dx \overline{\varphi(x)} \psi''''(x) \\ &= \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-a}^{+a} dx \overline{\varphi''''(x)} \psi(x) + \frac{\hbar^4}{4m^2} [(\overline{\varphi} \psi'''' - \overline{\varphi}' \psi'' + \overline{\varphi}'' \psi' - \overline{\varphi}''' \psi)(x)]_{-a}^{+a} . \end{aligned}$$

Les conditions aux limites $\psi(\pm a) = 0 = \varphi(\pm a)$ du puits infini enlèvent la première et la dernière contribution du terme de surface. Pour annuler les autres, il y a différentes possibilités, par exemple $\psi'(\pm a) = 0 = \varphi'(\pm a)$ ou $\psi''(\pm a) = 0 = \varphi''(\pm a)$. Or, par suite de la définition (50) de H^2 , les fonctions propres φ_n de H doivent appartenir au domaine de H^2 : comme ces fonctions satisfont $\varphi_n''(\pm a) = 0$, le domaine de définition de l'observable H^2 est

$$\mathcal{D}(H^2) = \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \psi'''' \in \mathcal{H} \text{ et } \psi(\pm a) = 0 = \psi''(\pm a) \} \quad . \quad (51)$$

Notons que ceci ne représente qu'une manière de rendre auto-adjoint l'opérateur $\frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{d^4}{dx^4}$ parmi beaucoup d'autres (déterminées par d'autres conditions aux limites, par exemple $\psi(\pm a) = 0 = \psi'(\pm a)$), mais il s'agit de celle qui correspond au système physique que nous considérons.

Venons-en maintenant au paradoxe soulevé dans notre exemple. Pour $\psi \in \mathcal{D}(H^2) \subset \mathcal{D}(H)$, la décomposition (50) donne

$$\begin{aligned} \langle H^2 \rangle_{\psi} &\equiv \langle \psi, H^2 \psi \rangle \stackrel{(50)}{=} \left\langle \psi, \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 \mathcal{P}_n \psi \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 \langle \psi, \mathcal{P}_n \psi \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 p_n \end{aligned} \quad (52)$$

avec $p_n = |\langle \varphi_n, \psi \rangle|^2$. Si $\psi \in \mathcal{D}(H)$, nous pouvons aboutir d'une autre manière au même résultat en utilisant le fait que les projecteurs \mathcal{P}_n sont auto-adjoints et orthogonaux (c'est-à-dire $\mathcal{P}_n \mathcal{P}_m = \delta_{nm} \mathcal{P}_n$) :

$$\begin{aligned} \|H\psi\|^2 &\equiv \langle H\psi, H\psi \rangle = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} E_n \mathcal{P}_n \psi, \sum_{m=1}^{\infty} E_m \mathcal{P}_m \psi \right\rangle = \sum_{n,m=1}^{\infty} E_n E_m \langle \mathcal{P}_n \psi, \mathcal{P}_m \psi \rangle \\ &= \sum_{n,m=1}^{\infty} E_n E_m \langle \psi, \mathcal{P}_n \mathcal{P}_m \psi \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 p_n \quad . \end{aligned} \quad (53)$$

La fonction $\psi(x) = \sqrt{15}/(4a^{5/2})(a^2 - x^2)$ de notre exemple ne satisfait pas $\psi''(\pm a) = 0$ et n'appartient donc pas au domaine de définition de H^2 : l'expression $\langle \psi, H^2\psi \rangle$ n'est donc pas définie, car la grandeur H^2 qui y intervient n'est pas simplement caractérisée par sa prescription d'opération, mais aussi par son domaine de définition. (Autrement dit : quoique l'intégrale dans l'équation (37) soit correctement évaluée, elle ne peut pas être identifiée à $\langle \psi, H^2\psi \rangle = \langle H^2 \rangle_\psi$ pour la fonction ψ considérée.) Par contre, nous avons $\psi \in \mathcal{D}(H)$ et la valeur moyenne $\langle H^2 \rangle_\psi$ peut être évaluée selon $\sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 p_n$ ou d'une manière équivalente selon

$$\|H\psi\|^2 \equiv \int_{-a}^{+a} dx |(H\psi)(x)|^2 = \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-a}^{+a} dx |\psi''(x)|^2 = \frac{15\hbar^4}{8m^2 a^4} .$$

(4b) Considérons maintenant le deuxième point mentionné dans l'exemple 4, à savoir le spectre de P . Comme indiqué dans l'annexe A.2, le spectre d'un opérateur non auto-adjoint P contient en général une partie appelée *spectre résiduel* : ce sont tous les nombres $z \in \mathbf{C}$ qui ne sont pas valeurs propres de P , mais pour lesquels \bar{z} est valeur propre de P^\dagger . Dans l'exemple présent, le spectre discret et le spectre continu de P sont vides, donc le spectre de l'opérateur P coïncide avec son spectre résiduel. Comme les fonctions $\varphi_p(x) = \exp(\frac{i}{\hbar}px)$ avec $p \in \mathbf{C}$ sont des solutions de l'équation aux valeurs propres pour P^\dagger ,

$$(P^\dagger \varphi_p)(x) = p \varphi_p(x) \quad (p \in \mathbf{C}, \varphi_p \in \mathcal{D}(P^\dagger), \varphi_p \neq 0) , \quad (54)$$

tous les nombres complexes sont valeurs propres de P^\dagger . En conclusion, le spectre résiduel (et donc le spectre complet) de P est \mathbf{C} . P n'étant pas auto-adjoint, ce spectre n'a pas d'interprétation physique directe. Cependant nous allons tout de suite voir qu'il contient des informations qui sont importantes pour la physique.

Pour étudier si le domaine de définition de P peut être élargi de telle manière que P devienne auto-adjoint, il convient d'appliquer la théorie de von Neumann [8, 9] selon laquelle il faut étudier les valeurs propres complexes de P^\dagger . Comme cas particulier de (54), nous avons

$$P^\dagger \varphi_\pm = \pm i \varphi_\pm \quad \text{avec} \quad \varphi_\pm(x) = e^{\mp x/\hbar} ,$$

ou encore $(P^\dagger \mp i\mathbf{1})\varphi_\pm = 0$. Le noyau de l'opérateur $P^\dagger \pm i\mathbf{1}$ est donc un espace vectoriel unidimensionnel :

$$\begin{aligned} n_-(P) &\equiv \dim \text{Ker} (P^\dagger + i\mathbf{1}) = 1 \\ n_+(P) &\equiv \dim \text{Ker} (P^\dagger - i\mathbf{1}) = 1 . \end{aligned} \quad (55)$$

Les nombres naturels $n_+(P)$ et $n_-(P)$ s'appellent les *indices de défaut* de P . Leur utilité est montrée par le résultat suivant :

Théorème 3 (Critère pour ‘auto-adjoint’) Soit A un opérateur hermitien avec indices de défaut n_+ et n_- .

(i) A est auto-adjoint si et seulement si $n_+ = 0 = n_-$. Dans ce cas (et uniquement dans celui-ci), le spectre de A est un sous-ensemble de l’axe réel.

(ii) A admet des extensions auto-adjointes (c’est-à-dire il est possible de rendre A auto-adjoint en élargissant son domaine de définition) si et seulement si $n_+ = n_-$. Si $n_+ > 0$ et $n_- > 0$, le spectre de A est tout le plan complexe.

(iii) Si l’on a $n_+ = 0 \neq n_-$ ou bien $n_- = 0 \neq n_+$, l’opérateur A n’a pas d’extension auto-adjointe non-triviale. Alors le spectre de A est le demi-plan complexe fermé supérieur, respectivement inférieur.

Dans le cas (ii), il existe des expressions explicites pour les extensions auto-adjointes possibles de A [8].

Dans notre exemple, nous avons $n_+ = n_- > 0$; donc l’opérateur P n’est pas auto-adjoint et son spectre est tout le plan complexe (ce que nous savons déjà). Les expressions explicites pour les extensions auto-adjointes auxquels nous avons fait allusion, impliquent que pour tout nombre réel α , l’opérateur

$$P_\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad , \quad \mathcal{D}(P_\alpha) = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \psi' \in \mathcal{H} \text{ et } \psi(0) = e^{i\alpha}\psi(1)\} \quad (56)$$

est auto-adjoint et on a $\text{Sp } P_\alpha = \mathbf{R}$.

Du point de vue physique, la condition aux limites $\psi(0) = e^{i\alpha}\psi(1)$ veut dire que tout ce qui sort de l’intervalle $[0, 1]$ à droite rentre de nouveau dans l’intervalle à gauche avec un certain déphasage (déterminé par $\alpha \in \mathbf{R}$) : ceci permet l’existence d’états avec une valeur bien définie de l’impulsion, alors que la condition aux limites $\psi(0) = 0 = \psi(1)$ exclut de tels états. Pour $\alpha = 0$, on a des fonctions d’onde périodiques et on retrouve l’extension auto-adjointe (43).

(3b) Nous revenons à l’affirmation que \hbar/i est une valeur propre de A^\dagger . Pour $f \in \mathcal{D}(A) = \mathcal{S}(\mathbf{R})$, une intégration par parties donne

$$\langle g, Af \rangle = \left\langle \frac{\hbar}{i} [(x^3 g)' + x^3 g'], f \right\rangle + 2 \frac{\hbar}{i} [x^3 (\bar{g}f)(x)]_{-\infty}^{+\infty} . \quad (57)$$

Le terme de surface dans le membre de droite s’annule si la fonction g ne croît pas plus vite qu’un polynôme à l’infini. Dans ce cas, l’équation précédente implique que l’opérateur A^\dagger agit de la même manière que A ,

$$A^\dagger g = \frac{\hbar}{i} [(x^3 g)' + x^3 g'] = \frac{\hbar}{i} [3x^2 g + 2x^3 g'] \quad , \quad (58)$$

mais que son domaine de définition est plus large que $\mathcal{S}(\mathbf{R})$: ce domaine contient toutes les fonctions g qui sont telles que l’expression (58) existe et est de carré sommable. (Pour toutes ces fonctions, le terme de surface dans l’équation (57) s’annule.)

En résumé, le domaine de définition de A^\dagger est plus grand que celui de A et l'opérateur A n'est donc pas auto-adjoint. Par ailleurs, la fonction (30) n'appartient pas à $\mathcal{D}(A)$, mais elle appartient à $\mathcal{D}(A^\dagger)$ et \hbar/i est donc une valeur propre de A^\dagger .

Pour conclure, nous étudions brièvement si le domaine de définition de A peut être élargi de telle manière que A devienne auto-adjoint. Pour cela nous faisons de nouveau appel à la théorie de von Neumann. On vérifie facilement que

$$A^\dagger g_\pm = \pm i g_\pm \quad \text{avec} \quad \begin{cases} g_\pm(x) = |x|^{-3/2} \exp\left(\pm \frac{1}{4\hbar x^2}\right) & \text{pour } x \neq 0 \\ g_-(0) = 0 \end{cases} .$$

Nous avons $g_- \in \mathcal{D}(A^\dagger)$, mais $g_+ \notin \mathcal{D}(A^\dagger)$ (à cause de la croissance exponentielle de g_+ à l'origine), donc

$$\begin{aligned} n_-(A) &\equiv \dim \text{Ker}(A^\dagger + i\mathbf{1}) = 1 \\ n_+(A) &\equiv \dim \text{Ker}(A^\dagger - i\mathbf{1}) = 0 \end{aligned} .$$

Du point (iii) du dernier théorème, il s'ensuit maintenant qu'il n'y a pas moyen de rendre auto-adjoint l'opérateur hermitien A .

Alors que l'introduction du spectre résiduel apparaît, de premier abord, comme une complication non motivée et non physique, les deux derniers exemples montrent qu'elle est très intéressante du point de la physique. En effet, pour un opérateur A , donné sur l'espace de Hilbert, il est d'habitude facile de vérifier s'il est hermitien (en intégrant par parties); les indices de défaut de A (qui sont étroitement liés au spectre résiduel de A) donnent alors une méthode simple et constructive pour déterminer toutes les extensions auto-adjointes possibles de A , c'est-à-dire ils décrivent explicitement toutes les manières pour transformer un opérateur hermitien en observable.

Une compréhension plus intuitive des deux derniers exemples peut être obtenue en considérant les fonctions propres potentielles des opérateurs impliqués et leur admissibilité pour le problème physique que l'on étudie. Pour l'opérateur d'impulsion P sur l'intervalle $[0, 1]$, l'onde plane $\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$ (avec $p \in \mathbf{R}$) résout formellement l'équation aux valeurs propres pour P , mais elle n'est pas compatible avec les conditions aux limites $\psi(0) = 0 = \psi(1)$ du puits de potentiel infini; d'un autre côté, la fonction $f_\lambda(x) \propto |x|^{-3/2} \exp\left(\frac{-i\lambda}{4\hbar x^2}\right)$ peut formellement être associée à la valeur propre réelle λ de $A = PQ^3 + Q^3P$, mais elle n'est pas de carré sommable à cause de son comportement singulier à l'origine. Ainsi, les contraintes cruciales pour transformer des opérateurs hermitiens en observables proviennent, respectivement, des conditions aux limites pour un problème sur un intervalle compact et de la condition d'intégrabilité du carré pour un problème sur tout l'espace. (D'ailleurs, ceci sont exactement les mêmes conditions qui impliquent la quantification des niveaux d'énergie sur un intervalle fini et sur tout l'espace, respectivement.)

Références

- [1] P.A.M.DIRAC : “*The Principles of Quantum Mechanics*”, 4th edition (Oxford University Press, Oxford 1958) .
- [2] J.M.JAUCH : *On bras and kets*, in “Aspects of Quantum Theory”, A.Salam and E.P.Wigner, eds. (Cambridge University Press, Cambridge 1972) .
- [3] D.GRAU : “*Übungsaufgaben zur Quantentheorie - Quantentheoretische Grundlagen*”, 3.Auflage (C.Hanser Verlag, München 1993) .
- [4] J.DIEUDONNÉ : “*De la communication entre mathématiciens et physiciens*”, dans “La Pensée Physique Contemporaine”, S.Diner, D.Fargue et G.Loachak, eds., (Éditions A.Fresnel, Hiersac 1982) .
- [5] M.BREITENECKER AND H.-R.GRÜMM : *Remarks on the paper by P.Bocchieri and A.Loinger “Nonexistence of the A-B-effect”*, Nuov.Cim. **55A** (1980) 453-455 ;
H.-R.GRÜMM : *Quantum mechanics in a magnetic field*, Act.Phys.Austr. **53** (1981) 113-131 ;
S.N.M.RUISJENAARS : *The Aharonov-Bohm effect and scattering theory*, Ann.Phys. **146** (1983) 1-34 ;
F.GIERES : *Über den Aharonov-Bohm-Effekt*, Diplomarbeit (Institut für Theoretische Physik, Universität Göttingen, 1983) .
- [6] A.MESSIAH : “*Mécanique Quantique, Tome 1 et 2*”, (Dunod, Paris 1969) ;
E.MERZBACHER : “*Quantum Mechanics*”, second edition (John Wiley and Sons, New York 1970) ;
R.P.FEYNMAN, R.B.LEIGHTON AND M.SANDS : “*The Feynman Lectures on Physics, Vol.3*”, (Addison-Wesley, London 1965) ;
K.GOTTFRIED : “*Quantum Mechanics*”, (Benjamin/Cummings Publ. Co., Reading 1966) ;
G.BAYM : “*Lectures on Quantum Mechanics*”, (W.A.Benjamin Inc., New York 1969) ;
C.COHEN-TANNOUJJI, B.DIU ET F.LALOË : “*Mécanique Quantique, Vol.1 et 2*”, deuxième édition (Hermann, Paris 1977) ;
R.SHANKAR : “*Principles of Quantum Mechanics*”, (Plenum, New York 1980) ;
J.-L.BASDEVANT : “*Mécanique Quantique*”, École Polytechnique (Ellipses, Paris 1986) ;
A.DAS AND A.C.MELISSINOS : “*Quantum Mechanics - A Modern Introduction*”, (Gordon and Breach Science Publ., New York 1986) ;
CH.NGÔ ET H.NGÔ : “*Physique Quantique - Introduction avec Exercices*”, (Masson, Paris 1991) ;
P.J.E.PEEBLES : “*Quantum Mechanics*”, (Princeton University Press, Princeton 1992) ;
F.SCHWABL : “*Quantum Mechanics*”, second revised edition (Springer, Berlin 1995) ;

- J.J.SAKURAI : “*Modern Quantum Mechanics*”, revised edition (Addison-Wesley Publ. Co., Reading 1994) ;
- E.ELBAZ : “*Quantique*”, (Ellipses, Paris 1995) .
- [7] F.HIRZEBRUCH UND W.SCHARLAU : “*Einführung in die Funktionalanalysis*”, B.I.-Hochschultaschenbücher Bd.296 (Bibliographisches Institut, Mannheim 1971) ;
- F.RIESZ ET B.SZ.NAGY : “*Leçons d’Analyse Fonctionnelle*”, (Gauthiers-Villars, Paris 1968) ;
- N.I.AKHIEZER AND I.M.GLAZMAN : “*Theory of Linear Operators in Hilbert Space, Vol.I and II*”, (Frederick Ungar Publ. Co., New York 1961 and 1963) ;
- N.DUNFORD AND J.T.SCHWARTZ : “*Linear Operators, Vol.I-III*”, (Interscience Publishers, New York 1958, 1963 and 1971) ;
- J.WEIDMANN : “*Lineare Operatoren in Hilberträumen*”, (B.G.Teubner, Stuttgart 1976) .
- [8] M.REED AND B.SIMON : “*Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.1- Functional Analysis*”, revised edition (Academic Press, New York 1980) ;
- M.REED AND B.SIMON : “*Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.2- Fourier Analysis, Self-Adjointness*”, (Academic Press, New York 1975) .
- [9] S.GROSSMANN : “*Funktionalanalysis I, II - im Hinblick auf Anwendungen in der Physik*”, Studententext (Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden 1975, 1977).
- [10] P.BENOIST-GUEUTAL ET M.COURBAGE : “*Mathématiques pour la Physique, Tome 3 - Opérateurs linéaires dans les espaces de Hilbert*”, (Eyrolles, Paris 1993) .
- [11] R.D.RICHTMYER : “*Principles of Advanced Mathematical Physics I*”, (Springer Verlag, Berlin 1978) .
- [12] E.WEISLINGER : “*Mathématiques pour Physiciens (2ème et 3ème cycles, avec rappels de 1er cycle)*”, (Ellipses, Paris 1991) ;
- R.DAUTRAY ET J.-L.LIONS : “*Analyse Mathématique et Calcul Numérique pour les Sciences et les Techniques, Tomes 1-3*”, Collection CEA (Masson, Paris 1985) ;
- R.GEROCH : “*Mathematical Physics*”, (The University of Chicago Press, Chicago 1985) ;
- H.TRIEBEL : “*Höhere Analysis*”, 2.Auflage (Verlag Harri Deutsch, Thun 1980) ;
- PH.BLANCHARD AND E.BRÜNING : “*Distributionen und Hilbertraumoperatoren - Mathematische Methoden der Physik*”, (Springer Verlag, Berlin 1993) ;
- E.ZEIDLER : “*Applied Functional Analysis - Applications to Mathematical Physics*”, Appl.Math.Sci. Vol.108 (Springer Verlag, Berlin 1995) ;
- M.A.SHUBIN (ED.) : “*Partial Differential Equations VII - Spectral Theory of Differential Operators*”, Encyclopaedia of Mathematical Sciences, Vol. 64, (Springer Verlag, Berlin 1994) .
- [13] T.F.JORDAN : “*Linear Operators for Quantum Mechanics*”, (John Wiley and Sons, New York 1969) .

- [14] E. KREYSZIG : “*Introductory Functional Analysis with Applications*”, Wiley Classics Library Edition (John Wiley, New York 1989) .
- [15] F.HUND : “*Geschichte der Physikalischen Begriffe*”, B.I.-Hochschultaschenbücher Bd.543, (Bibliographisches Institut, Mannheim 1968) .
- [16] J.VON NEUMANN : “*Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*”, (Springer Verlag, Berlin 1932); English transl. : “*Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*” (Princeton University Press, Princeton 1955) .
- [17] R.COURANT AND D.HILBERT : “*Methoden der Mathematischen Physik, Bd.1 und 2*”, (Springer Verlag, Berlin 1924 and 1937), (English transl. : “*Methods of Mathematical Physics, Vol.1 and 2*” (Interscience Publ., New York 1966 and 1962) .
- [18] C.REID : “*Hilbert - Courant*”, (Springer Verlag, New York 1986) .
- [19] L.SCHWARTZ : “*Théorie des Distributions*”, (Hermann, Paris 1966) .
- [20] I.M.GEL’FAND AND N.YA.VILENKIN : “*Les Distributions, Vol.4 - Applications de l’Analyse Harmonique*”, (Dunod, Paris 1967) .
- [21] B.L.VAN DER WAERDEN : “*Sources of Quantum Mechanics*”, edited with a historical introduction (North-Holland Publ. Co., Amsterdam 1967) .
- [22] D.W.ROBINSON : “*The Thermodynamic Pressure in Quantum Statistical Mechanics*”, Lecture Notes in Physics 9, (Springer Verlag, Berlin 1971).
- [23] H.L.CYCON, R.G.FROESE, W.KIRSCH AND B.SIMON : “*Schrödinger Operators - with Applications to Quantum Mechanics and Global Geometry*”, (Springer Verlag, Berlin 1987);
R.CARMONA AND J.LACROIX : “*Spectral Theory of Random Schrödinger Operators*”, (Birkhäuser, Boston 1990);
S.ALBEVERIO, F.GESZTESY, R.HOEGH-KROHN AND H.HOLDEN : “*Solvable Models in Quantum Mechanics*”, Texts and Monographs in Physics, (Springer Verlag, Berlin 1988) .
- [24] F.A.BEREZIN AND M.A.SHUBIN : “*The Schrödinger Equation*”, Mathematics and its Applications Vol.66 (Kluwer Academic Publ., Dordrecht 1991).
- [25] W.THIRRING : “*A Course in Mathematical Physics, Vol.3 - Quantum Mechanics of Atoms and Molecules*”, second edition (Springer Verlag, Berlin 1991) .
- [26] A.S.WIGHTMAN : *Introduction to some aspects of the relativistic dynamics*, in “High Energy Electromagnetic Interactions and Field Theory”, M.Lévy ed. (Gordon and Breach, New York 1967) .
- [27] W.O.AMREIN, J.M.JAUCH AND K.B.SINHA : “*Scattering Theory in Quantum Mechanics*”, Lecture Notes and Supplements in Physics Vol.16 (Benjamin, Reading 1977) .
- [28] J.AUDRETSCH UND K.MAINZER (HRSG.) : “*Wieviele Leben hat Schrödingers Katze ?*”, (Bibliographisches Institut, Mannheim 1990);

- A.SHIMONY : *Les fondements conceptuels de la mécanique quantique*, dans “La Nouvelle Physique”, P.Davies ed. (Flammarion, Paris 1993) ;
- J.A.WHEELER AND W.H.ZUREK (EDS.) : “*Quantum Theory and Measurement*”, (Princeton University Press, Princeton 1983) .
- [29] I.PRIGOGINE : “*Les Lois du Chaos*”, Nouvelle Bibliothèque Scientifique (Flammarion, Paris 1994) .
- [30] G.FANO : “*Mathematical Methods of Quantum Mechanics*”, (McGraw-Hill Book Co., New York 1971) .
- [31] J.E.ROBERTS : *The Dirac Bra and Ket Formalism*, J.Math.Phys. **7** (1966) 1097-1104 ;
 J.E.ROBERTS : *Rigged Hilbert spaces in quantum mechanics*, Commun.Math.Phys. **3** (1966) 98-119 .
- [32] J.-P.ANTOINE : *Dirac formalism and symmetry problems in quantum mechanics I : General Dirac formalism*, J.Math.Phys. **10** (1969) 53-69 ;
 O.MELSHEIMER : *Rigged Hilbert space formalism as an extended mathematical formalism for quantum systems. I. General theory*, J.Math.Phys. **15** (1974) 902-916 ;
 O.MELSHEIMER : *Rigged Hilbert space formalism as an extended mathematical formalism for quantum systems. II. Transformation theory in nonrelativistic quantum mechanics*, J.Math.Phys. **15** (1974) 917-925 ;
 S.J.L.VAN ELJNDHOVEN AND J.DE GRAAF : “*A Mathematical Introduction to Dirac’s Formalism*”, (North-Holland, Amsterdam 1986) .
- [33] G.LUDWIG : “*Foundations of Quantum Mechanics, Vol.1 and 2*”, Texts and Monographs in Physics (Springer Verlag, Berlin 1983 and 1985) .
- [34] A.GALINDO AND P.PASCUAL : “*Quantum Mechanics, Vol.1 and 2*”, (Springer Verlag, Berlin 1990 and 1991) ;
 G.GRAWERT : “*Quantenmechanik*”, 3.Auflage (Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden 1977) ;
 G.C.HEGERFELDT : “*Quantenmechanik*”, Skriptum 1974/75 und 1981/82 (Institut für Theoretische Physik, Universität Göttingen) .
- [35] L.D.LANDAU AND E.M.LIFSCHITZ : “*Mécanique Quantique*”, (Editions MIR, Moscou 1967) ;
 L.I.SCHIFF : “*Quantum Mechanics*”, 3rd edition (McGraw-Hill, New York 1968) ;
 D.S.SAXON : “*Elementary Quantum Mechanics*”, (Holden-Day, San Francisco 1968) ;
 S.GASIOROWICZ : “*Quantum Physics*”, (John Wiley and Sons, New York 1974) .
- [36] H.HAKEN AND H.C.WOLF : “*The Physics of Atoms and Quanta - Introduction to Experiments and Theory*”, 4th edition (Springer Verlag, Berlin 1994) ;
 P.C.W.DAVIES : “*Quantum Mechanics*”, (Chapman and Hall, London 1984) ;
 B.H.BRANDEN AND C.J.JOACHAIN : “*Introduction to Quantum Mechanics*”, (Longman Scientific and Technical, Essex 1989) ;
 F.MANDL : “*Quantum Mechanics*”, (John Wiley and Sons, New York 1992) ;

- I.BIALYNICKI-BIRULA, M.CIEPLAK AND J.KAMINSKI : “*Theory of Quanta*”, (Oxford University Press, Oxford 1992) .
- [37] L.E.BALLENTINE : “*Quantum Mechanics - A Modern Development*”, (World Scientific, Singapore 1998) ;
A.BOHM : “*Quantum Mechanics : Foundations and Applications*”, Second edition (Springer Verlag, Berlin 1986) .
- [38] C.PIRON : “*Mécanique Quantique - Bases et Applications*”, (Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne 1990) ;
J.M.JAUCH : “*Foundations of Quantum Mechanics*”, (Addison-Wesley Publ., Reading 1968) .
- [39] R.JOST : “*Quantenmechanik I,II*”, (Verlag des Vereins der Mathematiker und Physiker an der ETH Zürich, Zürich 1969) ;
W.O.AMREIN : “*Non-Relativistic Quantum Dynamics*”, Mathematical Physics Studies Vol.2 (D.Reidel Publ. Co., Dordrecht 1981) .
- [40] N.N.BOGOLUBOV, A.A.LOGUNOV AND I.T.TODOROV : “*Introduction to Axiomatic Quantum Field Theory*”, Mathematical Physics Monograph Series Vol.18 (Benjamin/Cummings Publ. Co., Reading 1975) .
- [41] B.R.GELBAUM AND J.M.H.OLMSTED : “*Counterexamples in Analysis*”, (Holden-Day, San Francisco 1964) .
- [42] P.CARRUTHERS AND M.M.NIETO : *Phase and angle variables in quantum mechanics*, Rev.Mod.Phys. **40** (1968) 411-440 .
- [43] D.JUDGE : *On the uncertainty relation for L_z and φ* , Phys.Lett. **5** (1963) 189 .
- [44] K.KRAUS : *Remark on the uncertainty between angle and angular momentum*, Z.Phys. **188** (1965) 374-377 .