

Axiome des conditions initiales et légalité en mécanique quantique,

par M. RENÉ DUGAS, Ingénieur au Corps des Mines (*).

Énoncer des prévisions à partir d'une observation initiale est l'objet de toute mécanique. La nature même de ces prévisions — certitude ou probabilité — et celle des conditions initiales caractérisent une mécanique donnée.

Nous nous efforcerons de préciser à ce point de vue les caractères de la mécanique quantique, en situant celle-ci dans le cadre de la mécanique générale construite par M. J.-L. Destouches. Ceci nous conduira à l'étude des divers aspects de la légalité partielle qui subsiste en mécanique quantique et nous permettra d'apercevoir la nature des novations que cette doctrine nouvelle impose aux idées classiques.

1. Observation maximum.

Nous appellerons observation maximum celle qu'il est nécessaire et suffisant d'effectuer pour spécifier l'état d'un système mécanique à un instant donné, état qui servira de base aux prévisions effectuées. C'est cette observation qui intervient dans l'énoncé de l'axiome des conditions initiales.

En mécanique classique, la mesure simultanée des différentes grandeurs (ou observables) attachées à un système ne se heurte à aucune limitation. C'est en vertu d'un choix dicté par l'expérience macroscopique que l'on considère l'état d'un système comme précisé par la détermination des positions et des vitesses à un instant donné (axiome copernicien des conditions initiales).

(*) Présenté par M. Th. De Donder.

En mécanique quantique, l'observation maximum est la mesure simultanée du plus grand nombre possible d'observables attachées au système. Or, deux observables ne sont simultanément mesurables que si elles commutent; cette condition ne peut être remplie, en particulier, par une coordonnée x et par le moment conjugué p qui lui correspond. L'observation maximum quantique est donc incomplète *au sens copernicien*.

Pour une particule à un degré de liberté ⁽¹⁾, l'observation maximum quantique sera la mesure, soit de x (axiome scolastique des conditions initiales), soit de p , soit d'une seule grandeur $F(x, p)$, la fonction F étant d'ailleurs arbitraire. Dans ces trois cas les incertitudes sur x et p sont liées par la relation d'Heisenberg : $\Delta p \Delta x \geq h$, la détermination exacte de x (ou de p) entraînant ainsi la totale indétermination de p (ou de x).

2. Postulat de prévisibilité.

A partir de l'observation maximum spécifiant l'état X_0 du système à l'instant t_0 , il doit être possible — et ceci en toute mécanique — d'effectuer, à l'égard de ce système, à l'instant t , des prévisions que l'on notera $X(t)$.

M. J.-L. Destouches écrit cette condition ⁽²⁾

$$(1) \quad X(t) = \mathcal{A}(t) X_0$$

(\mathcal{A} désignant un opérateur appliqué à X_0).

Il fait, en outre, les hypothèses suivantes :

a) Homogénéité du temps, en l'absence d'actions extérieures dépendant du temps;

b) Propriété pour les \mathcal{A} de former un groupe.

⁽¹⁾ Dans toute cette étude, nous bornerons nos exemples à des systèmes n'ayant qu'un degré de liberté. La simplification formelle qui en résulte n'entache pas la généralité des résultats, car la détermination simultanée de plusieurs grandeurs indépendantes et commutables peut être traitée comme une seule et même observation.

⁽²⁾ *Bulletin de l'Acad. roy. de Belgique*, t. 22, 1936, p. 525.

La condition (1) a pour nous le caractère d'un postulat. Remarquons qu'elle traduit la science d'un observateur unique. Si des observateurs différents peuvent vérifier la même loi, il y aura un *principe de relativité* traduisant l'invariance des opérateurs \mathcal{A} pour l'ensemble des repérages correspondants.

3. Postulat de stabilité.

Dans toute mécanique douée de sens physique, de faibles erreurs de mesure traduites par une incertitude banale sur X_0 ne doivent entraîner que de faibles oscillations de $X(t)$.

La nécessité de cette condition a été formulée par Duhem de la manière suivante :

« Une déduction mathématique est inutile au physicien, tant qu'elle se borne à affirmer que telle proposition, rigoureusement vraie, a pour conséquence l'exactitude rigoureuse de telle autre proposition. Pour être utile au physicien, il lui faut encore prouver que la seconde proposition est à *peu près* exacte lorsque la première est à *peu près* vraie. Et cela ne suffit pas encore : il lui faut délimiter l'amplitude de ces deux à peu près; il lui faut fixer les bornes de l'erreur qui peut être commise sur le résultat, lorsqu'on connaît le degré de précision des méthodes qui ont servi à mesurer les données; il lui faut définir le degré d'incertitude que l'on pourra accorder aux données lorsqu'on voudra connaître le résultat avec une approximation déterminée » (1).

M. Bouligand a défini (2) et M. J.-L. Destouches a généralisé (3) les conditions qui permettent de juger de la stabilité — ou de l'instabilité — des propositions mathématiques.

(1) *La Théorie physique*. Paris, 1906, p. 231.

(2) *Bulletin de l'Acad. roy. de Belgique*, 1935, pp. 277 et *Comptes rendus de l'Acad. des Sciences*, t. 200, 1935, p. 1509.

(3) *Bulletin de l'Acad. roy. de Belgique*, 1935, p. 780.

L'existence de voisinages dans l'ensemble des X_0 — ou des X en vertu de l'équation (1) — fait de cet ensemble un espace abstrait (\mathfrak{X}). X doit être stable dans cet espace par rapport à X_0 . En outre, le paramètre t étant l'un des éléments de toute observation, $\mathfrak{A}(t)$ doit être une fonction continue de t .

M. J.-L. Destouches parvient ainsi, en supposant, en outre, que $\mathfrak{A}(t)$ est différentiable par rapport à t , au type suivant d'équations :

$$(2) \quad \frac{dX}{dt} = \mathfrak{K}X \quad \frac{d\mathfrak{A}}{dt} = \mathfrak{K}\mathfrak{A},$$

où \mathfrak{K} est un nouvel opérateur dont le domaine opérable comprend l'ensemble des X .

En n'invoquant que les deux postulats ci-dessus (prévisibilité et stabilité) on retrouve ainsi, condensées en (2), l'équation de Jacobi de la mécanique classique, l'équation de Schrödinger de la mécanique ondulatoire et celle qui leur correspond dans la mécanique ponctuelle abstraite plus générale de l'espace (\mathfrak{X})

4. Semi-légalité des observables en mécanique quantique ⁽¹⁾.

Dans les mécaniques anciennes, la possibilité de prévoir avec certitude, à partir de X_0 , la valeur à tout instant des différentes observables attachées au système correspond à ce que j'appellerai *légalité*.

En mécanique quantique, l'observateur a le libre choix de mesurer à l'instant initial, soit x , soit p , soit une grandeur arbitraire $F(x, p)$. L'une de ces déterminations suffit à définir un mouvement du système; *les différents mouvements ainsi construits ne peuvent avoir simultanément de sens expérimental*. Cette circonstance est liée au caractère incomplet (au sens copernicien) de l'observation maximum quantique.

(1) RENÉ DUGAS, *Comptes rendus de l'Ac. des Sciences*, t. 203, 1936, p. 41.

En outre, hormis le cas des intégrales premières, $X(t)$ ne sera *presque jamais* une fonction propre de l'observable α , objet de la mesure initiale, dont X_0 est fonction propre. Le développement en série de $X(t)$ suivant les fonctions propres de α permettra seulement de prévoir à *tout instant* les probabilités des différentes valeurs possibles de α . Nous dirons que pour l'observable α , à partir d'une mesure initiale de celle-ci, il y a seulement *semi-légalité*, ceci par opposition à la légalité qui règle, en vertu de l'équation (2), l'évolution de l'état du système.

Remarque sur une analogie scolastique. — Nous avons vu que l'axiome quantique des conditions initiales comprend comme cas particulier l'axiome scolastique correspondant. Après une mesure *exacte* de la coordonnée x d'une particule, le point abstrait qui figure l'état de celle-ci obéit bien à une loi de type scolastique, mais cette analogie purement formelle ne s'étend pas aux observables liées à la particule ⁽¹⁾.

Au surplus, on ne doit pas considérer que des mesures exactes, ceci même en raison des nécessités qui dictent le postulat de stabilité; or, si l'on tient compte de l'incertitude σ_0 qui affecte la mesure de x à l'instant initial, il faut, pour achever de déterminer l'état initial, mesurer p à $\frac{h}{\sigma_0}$ près, ce qui écarte immédiatement du cas scolastique. Bien plus, dans des exemples qui ont pu être étudiés d'une manière concrète, comme celui de la particule soumise à un champ uniforme et constant, l'incertitude σ sur x croît très rapidement au cours du temps, à l'avantage de p , dont l'incertitude est $\frac{h}{\sigma}$.

5. Légalité des intégrales premières.

Reprenons le cas des intégrales premières, écarté dans ce qui précède. D'après Dirac, la condition nécessaire et

(1) Toujours hormis le cas des intégrales premières.

suffisante pour qu'une grandeur $A(x, p, t)$ soit intégrale première du système — conservatif ou non — caractérisé par l'hamiltonien H s'écrit immédiatement

$$(3) \quad \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{2\pi i}{h} [AH - HA] = 0,$$

ceci par analogie avec la condition correspondante en mécanique ordinaire, en substituant le crochet quantique au crochet de Poisson.

L. de Broglie ⁽¹⁾ énonce une condition équivalente à (3) sous la forme suivante : soit

$$(4) \quad \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

l'équation des ondes du système. Appelons $\Psi_i(x, 0)$ la i° fonction propre normée de l'hamiltonien H à l'instant $t=0$ et considérons la solution $\varpi_i(x, t)$ de l'équation (4), qui se réduit à $\Psi_i(x, 0)$ à l'instant $t=0$. Les fonctions ϖ_i forment à l'instant t un système complet, orthogonal et normé (différent en général de celui des fonctions propres de H).

La grandeur $A(x, p, t)$ est intégrale première lorsque les éléments de la matrice qui la représente dans le système de base $\varpi_i(x, t)$ sont indépendants du temps.

A l'aide de cette nouvelle définition, on démontre (si A est un opérateur complet) que

1° les valeurs propres de A sont indépendantes du temps;

2° les probabilités $|c_i|^2$ des différentes valeurs propres de A , fixées à l'origine par le développement $\Psi_0 = \sum c_i \varphi_i$ de l'état initial suivant les fonctions propres de A , ne se modifient pas lorsque l'état $\Psi = \mathcal{U}\Psi_0$ du système évolue au cours du temps suivant l'équation (4).

En particulier :

Si l'état initial Ψ_0 est un état propre de A correspondant à la valeur propre a , l'état $\Psi = \mathcal{U}\Psi_0$ du système à l'instant t

⁽¹⁾ *Théorie de la quantification dans la nouvelle mécanique*, p. 227. Hermann, éd., 1932.

est encore un état propre de A correspondant à la même valeur a ⁽¹⁾. Il y a légalité pour la grandeur A au cours du mouvement, et cette légalité s'explique par une invariance.

**6. Préviation d'une certitude isolée pour une observable quelconque :
théorème de Fermi.**

La semi-légalité des observables, qui constitue le cas général, et la légalité des intégrales premières se conjuguent en donnant un théorème de Fermi, relatif à la préviation, à partir d'une mesure convenable, d'une certitude isolée pour une observable quelconque.

Considérons, avec L. de Broglie ⁽²⁾, l'équation

$$(5) \quad A_t^{\bar{\omega}_i(x, t)} = A_0^{\Psi_i(x, 0)}$$

exprimant que la matrice représentant l'intégrale première A à l'instant t dans le système de base $\bar{\omega}_i(x, t)$ défini au § 5 a les mêmes éléments que la matrice représentant A à l'instant zéro dans le système de base $\Psi_i(x, 0)$ des fonctions propres initiales de l'hamiltonien. Comme $\bar{\omega}_i(x, t)$ est la solution de l'équation des ondes (4) qui se réduit à $\Psi_i(x, 0)$ pour $t=0$, on a

$$(6) \quad \bar{\omega}_i(x, t) = \mathcal{Q} \Psi_i(x, 0);$$

d'où, par un changement de système de base,

$$(7) \quad A_t^{\bar{\omega}_i(x, t)} = \mathcal{Q}^{-1} A_t^{\Psi_i(x, 0)} \mathcal{Q};$$

d'où, en vertu de (5),

$$(8) \quad A_t^{\Psi_i(x, 0)} = \mathcal{Q} A_0^{\Psi_i(x, 0)} \mathcal{Q}^{-1}.$$

Cette dernière équation permet de construire l'intégrale première qui se réduit pour $t=0$ à une grandeur $A_0 = F(x, p)$, laquelle peut être arbitrairement choisie.

⁽¹⁾ Cette dernière proposition peut se vérifier immédiatement à l'aide de (3) et des propriétés de l'opérateur \mathcal{Q} . Mais il semble préférable de la situer comme un cas particulier de la permanence des probabilités $|c_i|^2$ énoncée sous 2°.

⁽²⁾ *Comptes rendus de l'Académie des Sciences*, t. 194. 1932, p. 693.

Plus généralement, $F(x, p)$ étant une fonction arbitraire définie à l'instant t_1 , il existe une intégrale première

$$A[F(x, p), t, t_1] \text{ se réduisant à } F(x, p) \text{ pour } t = t_1.$$

Supposons qu'à l'instant t_0 antérieur à t_1 nous mesurons cette intégrale première et que nous trouvions la valeur a . En vertu de la légalité de cette intégrale première et de son invariance, nous pourrions annoncer avec certitude que la grandeur $F(x, p)$ aura la valeur a à l'instant t_1 . En d'autres termes :

Etant donnée une grandeur physique quelconque $F(x, p)$, il est toujours possible de connaître la valeur qu'elle aura à un moment quelconque $t_1 > t_0$, grâce à une expérience convenable exécutée au temps t_0 .

Tel est le théorème dont Fermi a donné une démonstration directe ⁽¹⁾.

Je dois insister sur le fait que la certitude que l'on peut annoncer ainsi à l'égard d'une grandeur quelconque est une certitude *isolée*, faute de quoi, d'ailleurs, il y aurait dérogation à la semi-légalité qui constitue la règle générale.

Montrons-le sur l'exemple même étudié par Fermi.

Soit une particule libre assujettie à décrire l'axe des x . La quantité de mouvement p et l'hamiltonien

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2\pi i} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

sont ici des intégrales premières. En revanche, x ne peut l'être, puisqu'il ne commute pas avec H . Comme en mécanique ordinaire, l'opérateur

$$A_1 = x - \frac{p}{m} (t - t_1) = x + \frac{h(t - t_1)}{2\pi i m} \frac{\partial}{\partial x}$$

⁽¹⁾ Le mémoire original de FERMI a paru au *Nuovo Cimento*, 1930, p. 361. Ce mémoire a fait l'objet, sous le titre *Mécanique quantique et causalité*, d'une analyse de M. ANDRÉ GEORGE, avec remarques de M. L. DE BROGLIE (Hermann, éd. 1932).

est intégrale première et se réduit à x pour $t = t_1$. Si donc nous mesurons A_1 à l'instant $t = 0$ et que nous trouvions le résultat a_1 , nous pouvons prédire avec certitude que x aura cette même valeur pour $t = t_1$.

De même

$$A_2 = x - \frac{p}{m} (t - t_2)$$

est intégrale première. Si nous mesurons A_2 à l'instant $t = 0$ et que nous trouvions le résultat a_2 , nous pourrions prédire avec certitude que x aura cette même valeur pour $t = t_2$.

Mais, circonstance essentielle, la mesure simultanée de A_1 et A_2 est impossible. En effet, on vérifie immédiatement que

$$A_1 A_2 - A_2 A_1 = \frac{h}{2\pi i m} (t_2 - t_1),$$

c'est-à-dire que A_1 et A_2 ne sont commutables pour aucune valeur de t . L'observateur aura le libre choix de mesurer, soit A_1 , soit A_2 , etc.; mais il ne saurait acquérir qu'une certitude isolée sur l'un de ces opérateurs et par suite sur la valeur de x à un instant ultérieur choisi. Il est bien évident que ceci sauvegarde la semi-légalité de x .

7. Légalité et causalité.

Je dois m'expliquer ici sur une question qui n'est pas de simple terminologie.

Pour beaucoup de physiciens, le mot *causalité* s'entend au sens restreint de détermination des événements futurs. C'est ainsi, par exemple, que pour M. André George, le théorème de Fermi, rencontré au § 6 et exprimant que « l'indétermination n'augmente pas au cours du temps », serait un des éléments essentiels du « bilan causal » de la mécanique quantique.

Painlevé insiste, au contraire, sur la nécessité de ne pas confondre causalité et hypothèse déterministe. Pour lui, le

principe de causalité de la mécanique réside dans la possibilité d'un certain transfert des mouvements dans l'espace et le temps; ni l'espace ni le temps ne peuvent être des causes efficientes.

Le terme « causalité » a encore acquis droit de cité en mathématiques, grâce à M. Bouligand ⁽¹⁾ : une démonstration sera dite *causale* si elle réussit à s'affranchir de toute hypothèse parasite, du genre de celles qu'entraîne nécessairement le recours à certains algorithmes. De plus, à chaque groupe correspond *un domaine de causalité*, les hypothèses invariantes par les transformations du groupe entraînant des conclusions invariantes dans les mêmes conditions.

Revenant à mon sujet, je me bornerai à souligner que la causalité au sens de M. Bouligand apparaît une notion fort utile à considérer en dehors de la légalité propre à chaque mécanique. En voici un exemple : la dynamique de la relativité restreinte et la dynamique ordinaire — dans un système de référence donné — sont indiscernables au regard de l'analyse générale des §§ 1 à 4 : même observation maximum, même caractère de légalité des observables, même science de l'observateur unique. Cependant, le *domaine de causalité* de l'une se traduit par le groupe de Lorentz, celui de l'autre par le groupe de Galilée, et ceci suffit à les différencier.

8. Novations quantiques aux idées classiques.

La mécanique quantique oblige tout d'abord à renoncer à l'axiome copernicien des conditions initiales.

Rappelons à ce sujet que Painlevé ⁽²⁾ souligne que rien, au point de vue logique, n'impose le choix copernicien. L'axiome scolastique, caractérisant l'état initial d'un système par les seules positions de ses éléments, ou l'axiome

(1) *La causalité des théories mathématiques*. Hermann, éd., 1934.

(2) *Axiomes de la Mécanique*, p. 56. Gauthier-Villars, éd., 1922.

qui consisterait à partir de la connaissance de l'état du système pendant un intervalle de temps dt seraient à première vue plus naturels que l'axiome copernicien. Celui-ci, indépendant du « principe de causalité », n'est, dans le domaine macroscopique, que « le fruit d'observations innombrables ». Aucune objection théorique ne peut donc être élevée à l'abandon de cet axiome dans le domaine microscopique.

L'axiome scolastique réapparaît en mécanique quantique comme cas particulier, mais seulement pour une mesure *exacte* de x à l'instant initial.

L'axiome quantique des conditions initiales permet de spécifier d'une infinité de manières l'état initial, par le choix d'une fonction arbitraire $F(x, p)$.

Les novations à la légalité classique des observables se situent sur un autre plan. Certaines interprétations de la mécanique quantique y voient la « faillite du déterminisme ». Il y a là une exagération certaine. Dans l'analyse générale exposée plus haut, l'appel à un postulat de prévisibilité s'oppose à ce que la légalité soit intégralement mise en vacances. Les conditions de stabilité, jointes à ce premier postulat, entraînent au contraire une légalité complète dans l'évolution de l'état du système (sauf perturbation).

Si l'on considère, non plus l'état, mais les différentes observables attachées au système, la légalité de style classique ne subsiste que pour les seules intégrales premières. Pour les observables quelconques, la mécanique quantique n'offre plus en général qu'une semi-légalité (prévision à tout instant de la distribution des probabilités des différentes valeurs possibles). Toutefois, grâce à une mesure convenable, on peut prédire la valeur d'une observable quelconque à un instant ultérieur *isolé*, arbitrairement choisi.

Tout ce qui précède est vrai *dans le détail*. La légalité copernicienne peut, en outre, réapparaître, par voie de

compensation statistique, sur un ensemble d'individus x et p dont les incertitudes sont liées par la relation d'Heisenberg (théorème d'Ehrenfest).

La mécanique quantique conserve par ailleurs les caractères de stabilité et de relativité de la mécanique ordinaire: le premier doit s'entendre de la stabilité d'une distribution de probabilités, dans tous les cas de semi-légalité.
